

О.Ю.Хецелиус, к.ф.-м.н.

Одесский государственный экологический университет

НОВЫЙ МЕТОД КЭД ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ С УЧЕТОМ ЯДЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ И СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРОВ ТЯЖЕЛЫХ СИСТЕМ

Изложен новый подход к описанию сверхтонкой структуры СТС тяжелых конечных ферми-систем, базирующийся на методе калибровочно-инвариантной КЭД теории возмущений (ТВ) с корректным учетом ядерных эффектов. Приведены данные расчета констант СТС и электрического квадрупольного момента для изотопа ^{201}Hg .

Ключевые слова: КЭД теория возмущений, сверхтонкая структура

Введение. Фундаментальной проблемой современной теории тяжелых ферми-систем и квантовой теории поля остается разработка нового неэмпирического высокоточного метода расчета спектров собственных энергий, параметров различных каналов распада, СТС и т.д. с обязательным прецизионным одновременным учетом релятивистских, корреляционных, радиационных и ядерных эффектов [1-17]. Важнейшим фактором является интерференция меж электронными корреляционными и ядерными эффектами и, конечно же развитие адекватной вычислительной процедуры расчета КЭД поправок по возможности избегающей известных разложений по параметрам $1/Z, \alpha Z, ZR/\alpha$ [1,6,12,13,14]. Крайне осторой является проблема описания и получения надежных данных о спектрах и спектральных характеристиках тяжелых и сверхтяжелых ферми-систем, атомных, ядерных систем, являющихся существенно релятивистскими системами [1-8]. В данной работе развивается новый, усовершенствованный подход [10-13] к оценке СТС тяжелых конечных ферми-систем, базирующийся на формализме калибровочно-инвариантной КЭД ТВ с корректным учетом ядерных поправок в рамках новых методов [9,14] и корреляционных и КЭД (собственно-энергетический вклад и вклад за счет поляризации вакуума в сдвиг Лэмба) поправок в рамках эффективных вычислительных процедур [6,11]. Релятивистские одноэлектронные эффекты учтены в рамках приближения Дирака-Фока (ДФ), причем в отличие от классического метода ДФ, используемый в расчетах базис орбиталей генерируется с учетом условия калибровочной инвариантности. Для генерации использован фундаментальный принцип минимизации функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм 4-го порядка КЭД ТВ [7], т.е. вклад диаграмм, связанный с обменом продольными фотонами в мнимую часть энергии. Оператор возмущения ТВ учитывает эффект запаздывания взаимодействия. Магнитное межэлектронное взаимодействие учтено в низшем порядке по параметру α^2 (α -постоянная тонкой структуры). Ядерные эффекты, в частности, поправка на конечность ядра, и вклад эффектов типа остов-поляризационных эффектов, индуцируемых валентными протонами ядра, учтены в 0-ом приближении ТВ. Нерелятивистский эффект конечности массы ядра учитывается элементарно, и мы не обсуждаем его здесь. Эффект релятивистской отдачи ядра мал и в современных расчетах маскируется по крайней мере неточностями в определении КЭД сдвигов [1-6]. Для оценки поправок на сдвиг Лэмба применена известная процедура Иванова-Ивановой-Глушкова [6,7], основанная на использовании «точного» расчета Мора для H-подобных ионов [1] и формализме ковариантной регуляризации S-матрицы Фейнмана. В качестве иллюстрации приведены данные расчета констант СТС и электрического квадрупольного момента для ^{201}Hg .

Метод расчета: КЭД ТВ. Остановимся на ключевых моментах метода. Как обычно [9-11], исходим из того, что многоэлектронная система описывается уравнением Дирака с релятивистским гамильтонианом (атомные ед.)

$$H = \sum_i h(r_i) + \sum_{i>j} V(r_i, r_j), \quad (1)$$

где $h(r)$ – гамильтониан Дирака для электрона в поле ядра конечного размера, релятивистский потенциал межчастичного взаимодействия

$$V(r_i r_j) = \exp(i\omega_{ij} r_{ij}) \cdot \frac{(1 - \alpha_i \alpha_j)}{r_{ij}}. \quad (2)$$

Последовательный релятивистский вариант расчета сдвигов уровней, основанный на адиабатической формуле Гелл-Мана и Лоу с КЭД матрицей рассеяния рассмотрен в [6-9]. Формализм Гелл-Мана и Лоу приводят к рядам ТВ по константе связи для сдвигов ΔE , которые стандартно диаграмматизируются. Новые приближения в теории удобно формулировать как методы суммирования диаграмм определенного типа. Принципиальная новизна нашего подхода по сравнению с классическими методами [1-6] заключается в использовании *ab initio* принципа выбора 0-го калибровочно-инвариантного приближения ТВ [7] и эффективных процедур учета ядерных, корреляционных, КЭД (поляризация вакуума электрон-позитронного поля) эффектов [9-14]. Пусть электрон движется в сферически симметричном электрическом поле. Состояние электрона определяется значениями главного квантового числа, полным моментом и четностью. Волновая функция (биспинор) имеет вид

$$\Psi_{jlm}(r) = \begin{pmatrix} \Phi_{jlm}(r) \\ \chi_{jlm}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(r)\Omega_{jlm}(r) \\ G(r)\Omega_{jlm}(r) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $\Omega_{jlm}(r)$ - шаровой спинор;

$F(r), G(r)$ – радиальные функции Дирака, удовлетворяющие системе уравнений Дирака. Вид радиальных функций Дирака, естественно, зависит от вида $V(r)$. При больших χ радиальные функции F и G быстро изменяются в начале координат

$$F(r), G(r) \approx r^{\gamma-1}, \quad \gamma = \sqrt{\chi^2 - \alpha^2 z^2}. \quad (4)$$

Это создает известные трудности при численном интегрировании уравнений в области $r \rightarrow 0$. Удобно в обоих решениях выделить главную степенную зависимость при малых значениях аргумента. Это достигается заменой: $f = Fr^{1-|\chi|}$, $g = Gr^{1-|\chi|}$. Дираковские уравнения для компонент F и G преобразуются следующим образом:

$$f' = -(\chi + |\chi|)f/r - \alpha ZVg - (\alpha ZE_{n\chi} + 2/\alpha Z)g, \quad (5)$$

$$g' = (\chi - |\chi|)g/r - \alpha ZVf + \alpha ZE_{n\chi}f, \quad (6)$$

где $E_{n\chi}$ - одноэлектронная энергия (без учета энергии покоя).

Для учета эффекта конечности ядра распределение заряда моделируется гауссовой функцией с эффективным радиусом ядра R [11]:

$$\rho(r|R) = (4\gamma^{3/2}/\sqrt{\pi}) \exp(-\gamma r^2), \quad (7)$$

$$\int_0^\infty dr r^2 \rho(r|R) = 1, \quad \int_0^\infty dr r^3 \rho(r|R) = R, \quad \gamma = 4\pi/R^2, \quad (8)$$

Переход к потенциалу конечного ядра реализуется, например, для кулоновского потенциала со сферически симметричной плотностью $\rho(r|R)$ с помощью формулы

$$V_{nucl}(r|R) = -((1/r) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r'|R) + \int_r^\infty dr' r' \rho(r'|R)). \quad (10)$$

Искомый потенциал вычисляется из следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} V'_{nucl}(r, R) &= (1/r^2) \int_0^r dr' r'^2 \rho(r', R) \equiv (1/r^2) y(r, R), \\ y'(r, R) &= r^2 \rho(r, R), \\ \rho'(r, R) &= -8\gamma^{5/2} r/\sqrt{\pi} \exp(-\gamma r^2) = -2\gamma \rho(r, R) = -\frac{8r}{\pi r^2} \rho(r, R), \end{aligned} \quad (11)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} V_{nucl}(0, R) &= -4/(\pi r), \quad y(0, R) = 0, \\ \rho(0, R) &= 4\gamma^{3/2}/\sqrt{\pi} = 32/R^3. \end{aligned} \quad (12)$$

Вычисление потенциалов, их производных, матричных элементов сведено к решению одной системы дифференциальных уравнений (1D процедура). Энергии квадрупольного (W_q) и магнитного дипольного (W_μ) взаимодействий определяются стандартно [1,11]:

$$\begin{aligned} W_q &= [\Delta + C(C+1)]B, \quad W_\mu = 0,5 AC, \\ \Delta &= -(4/3)(4\chi-1)(I+1)/[i(I-1)(2I-1)], \\ C &= F(F+1) - J(J+1) - I(I+1), \end{aligned} \quad (14)$$

где I – спин ядра;

J, F – полный электронный момент и полный момент системы.

Константы СТС расщепления определяются следующими радиальными интегралами:

$$\begin{aligned} A &= \{[(4,32587)10^{-4} Z^2 \chi g_I]/(4\chi^2-1)\} (RA)_{-2}, \\ B &= \{7.2878 \cdot 10^{-7} Z^3 Q/[4\chi^2-1)I(I-1)]\} (RA)_{-3}, \end{aligned} \quad (15)$$

где g_I -фактор Ланде,

Q – квадрупольный момент ядра (Barn) и

$$(RA)_{-2} = \int_0^\infty dr r^2 F(r)G(r)U(1/r^2, R),$$

$$(RA)_{-3} = \int_0^{\infty} dr r^2 [F^2(r) + G^2(r)U(1/r^2, R)]. \quad (16)$$

Результаты расчета и выводы. Далее мы приведем данные расчета констант СТС и электрического квадрупольного момента Q для изотопа ^{201}Hg . Ртуть имеет один стабильный изотоп ^{201}Hg ($I=3/2$) с относительной распространенностью 13,2%. Величины квадрупольных моментов для нескольких радиоактивных изотопов с массами от 185 до 203 представлены группой Ulm и др. (см. [2,10,12]). Разумная компиляция значений Q для изотопов в интервале масс 185-206 дана в таблицах Raghavan [2]. Имеющиеся в настоящее время экспериментальные значения Q (^{201}Hg) приведены в табл.1. Мюонное "3d" значение 386(49) мБ использовано в итоговом отчете "year-2001" по ядерным квадрупольным моментам. В табл.2 представлены экспериментальные и рассчитанные значения Q (мб) для ^{201}Hg и констант СТС (МГц) для состояния 3P_1 атома ^{201}Hg . Расчеты выполнены на основе некоррелированного метода ДФ, в многоконфигурационном приближении метода ДФ (МКДФ) с учетом КЭД поправок [2], а также на основе нашего метода [10,13]. Значение момента Q , полученное нами, лучше всего согласуется с данными полученными группой Ulm и др. Сравнение результатов расчета в рамках нашего метода и метода ДФ показывает, что наши значения константы A находятся в лучшем согласии с экспериментом, чем ДФ.

Таблица 1 - Значения электрического квадрупольного момента Q (мб) для ^{201}Hg

Q (мб)	Метод	Ссылка	Год
382,3	Atomic	Наша работа	2007
387 (6)	Atomic	Pyykko et al	2005
347 (43,0)	Nuclear	Fornal et al	2001
385 (40)	Atomic ^a	Ulm et al	1988
485 (68)	Muonic ^b	Gunther et al	1983
386 (49)	Muonic 3d ^c	Hahn et al	1979
267 (37)	Muonic 2p ^c	Hahn et al	1979
390 (20)	Solid ^d	Edelstein and Pound	1975
455 (40)	Atomic 3P_2	McDermott and Lichten	1960
420	Atomic	Murakawa	1959
500 (50)	Atomic ^e	Blaise and Chantrel	1957
600	Solid ^e	Dehmelt et al	1954
500	Atomic ^e	Schuler and Schmidt	1935

Примечание: ^a стандартное значение Raghavan; ^b значение ^{199}Hg ($I=5/2$) согласовано с отношением 201/199; ^c прямой мюонный эксперимент для ^{201}Hg ; ^d твердотельное значение HgCl_2 плюс компилированная величина ^{199}Hg [2,10].

Этот факт мы связываем, во-первых, с использованием калибровочно-инвариантных базисов дираковских би-спиноров, во-вторых, с корректным учетом корреляционных, КЭД и ядерных эффектов. Впервые нами учтен вклад ядерных эффектов типа остов-поляризационных, индуцируемых валентными протонами ядра, в рамках модели [9,14]. Вклад поляризационных и экранировочных поправок, как эффектов 2-го и выше

порядков ТВ, является обязателен (см. табл.2). Корреляционный вклад в константы СТС составляет до 1200 МГц, ядерной и КЭД поправок~ до 2 десятков МГц.

Таблица 2 - Экспериментальные и расчетные значения момента Q (мб) для ^{201}Hg и констант СТС (МГц) для состояния 3P_1 ^{201}Hg [2,10,13]

Метод расчета	Q (mb)	A (MHz)	B (MHz)
ДФ	478,13	-4368,266	---
МКДФ (+Брейт+КЭД)	386,626	-5470,810	---
Наст.р-та: Эл.Корр.	-90,913	-1160	-60,963
Наст.р-та: Брейт+КЭД	-2,485	-20,748	-1,101
Наст.р-та: Полная знач.	382,304	-5458, 620	-284,832
Эксперимент	См.табл.1	-5454,569 (0,003)	-280,107 (0,005)

Имеющееся отличие теории и эксперимента мы связываем с отсутствием корректных данных о пространственном распределении магнитного момента внутри ядра (эффект Bohr-Weisskopf), а также неучетом КЭД поправок высших порядков. Поправка за счет пространственного распределения магнитного момента внутри ядра зависит от радиальной формы распределения, которая для ^{201}Hg в настоящее время неизвестна. Поэтому уместным является применение здесь модифицированного метода Zemach с приближенной оценкой мультипликативной поправки возникающей вследствие распределения магнитного момента для состояний 's' симметрии (см.[10]). Его использование требует выделения в расчетных значениях магнитной константы СТС контактного, спин-дипольного и орбитального членов. Контактный член включает примерно 80% общего значения констант СТС и учтен в расчете. Поправками к эффекту Bohr-Weisskopf вследствие других симметрий мы пренебрегли.

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за ценные советы.

Список литературы

1. *Mohr P.J.* Energy Levels of H-like atoms predicted by Quantum Electrodynamics, $10 < Z < 40$ // *Atom.Data Nucl .Data Tabl.*-2003-Vol.24,N2.-P.453-470.
2. *Bieron J., Pyykkö P., Jonsson P.*, Nuclear quadrupole moment of ^{201}Hg // *Phys.Rev. A.*-2005.-Vol.71.-P.012502-1-8.
3. *Koshelev K.V., Labzowsky L.N., Tupitsyn I.I.*, TInterelectron interaction corrections to hfs structure of the $2p_{3/2}$ state in Li-like, B-like and N-like Bi ions//*J.Phys.B.*-2004.-Vol.37.-P.843-851.
4. *Ivanova E.P., Ivanov L.N.* Modern Trends in Spectroscopy// *Phys.Rep.*-1991.-Vol.166.-P.315-390.
5. *Ivanov L.N., Ivanova E.P., Knight L.* Energy Approach to consistent QED theory for calculation of electron-collision strengths//*Phys.Rev.A.*-1993.-Vol.48,N6.-P.4365-74.
6. *Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.*, High order corrections in relativistic perturbation theory: Mg-like and Ne-like ions //*Phys.Scripta* –1985.-Vol.32,N4.-P.512-524.
7. *Glushkov A.V., Ivanov L.N.* Radiation decay of atomic states: atomic residue and gauge noninvariant contributions//*Phys.Lett.A.*-1992.-V.170,N3.-P.33-37.

8. *Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Loboda A.V.*, Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions // In: New projects and New lines of research in nuclear physics. Eds. G.Fazio, F.Hanappe, Singapore : World Scientific.-2003.-P.126-182.
9. *Glushkov A.V.*, Energy Approach to Resonance states of super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions// Low Energy Antiproton Phys., AIP Ser.(N.-Y.)-2005.-Vol.796.-P.206-210.
10. *Khetselius O.Yu.*, Nuclear quadrupole moments, hfs constants for superheavy ions. Radiation probabilities for ions of Fe in Supernova// Trans. NPDC –NPA III, Europ.Rad.Centre, Belgium, 2007.-p.81.; J.Phys.G., to be publ.;
11. *Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P.*, QED calculation of heavy multicharged ions with account for the correlation, radiative and nuclear effects// Recent Adv. in Theor. Phys. and Chem. Systems (Springer).-2006.-Vol.15.-P.285-300.
12. *Khetselius O.*, Hyperfine structure of isotopes ^{73}Ge , ^{75}As , ^{201}Hg //Photoel.-2007.- Vol.16.-P.131-137.
13. *Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., Dubrovskaya Yu.V.*, Consistent quantum theory of the recoil induced excitation and ionization in atoms during capture of neutron//J.Phys.C.-2006.- Vol.35.-P.425-430.
14. *Glushkov A.V., Malinovskaya S.V., Khetselius O.Yu., Dubrovskaya Yu.V., Vitavetskaya L.A.*, Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes: discharge of metastable nuclei for μ^- capture// Recent Adv. in Theor. Phys.Chem. Systems (Springer).-2006.-Vol.15.-P.301-328.

Новий метод КЕД теорії збурень з урахуванням ядерних ефектів і понадтонка структура спектрів важких систем. О.Ю.Хецеліус

Викладено новий підхід до опису понадтонкої структури важких скінчених фермі-систем, що базується на методі калібровочно-інваріантної КЕД теорії збурень з коректним урахуванням ядерних ефектів. Приведені данні розрахунку сталих СТС і електричного квадрупольного моменту для ізотопу ^{201}Hg .

Ключові слова: КЕД теорія збурень, понадтонка структура

New method of QED perturbation theory with account of nuclear effects and hyperfine structure of spectra of heavy systems O.Yu. Khetselius

It is proposed new approach to calculating hyperfine structure parameters for heavy finite fermi-systems, which is based on the formalism of gauge-invariant QED perturbation theory with correct accounting for nuclear effects. Results of calculating HFS constants and electric quadrupole moment for isotope of ^{201}Hg are presented.

Keywords: QED perturbation theory, hyperfine structure