

**О.Ю.Хецелиус, к.ф.-м.н.**

*Одесский государственный экологический университет*

## **НОВАЯ ЧИСЛЕННАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ПОПРАВКИ НА ПОЛЯРИЗАЦИЮ ВАКУУМА ПОЛЕМ ЯДРА В КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМАХ**

*Предложен новый численный подход к оценке поправки на поляризацию вакуума полем ядра в кулоновских системах, включая тяжелые и сверхтяжелые конечные ферми-системы. Новый подход легко включается в общий формализм КЭД теории возмущений (ТВ) с использованием калибровочно-инвариантных базисов релятивистских биспиноров в нулевом приближении.*

**Ключевые слова:** теория возмущений, поляризация вакуума, новая аппроксимация

**Введение.** Фундаментальной, наиболее актуальной проблемой современной теории тяжелых и сверхтяжелых ферми-систем и квантовой теории поля остается разработка нового неэмпирического высокоточного метода (или существенное усовершенствование существующих) расчета спектров собственных энергий, характеристик различных каналов распада, оценки радиационных поправок, включая поправку на поляризацию вакуума кулоновским полем ядра и так называемую собственно-энергетическую часть лэмбовского сдвига. [1-8]. Важнейшей задачей является развитие адекватной вычислительной процедуры расчета собственно энергетического и вакуум-поляризационного сдвига для протяженного ядра, по возможности избегающей разложений по известным параметрам  $1/Z$ ,  $\alpha Z$ ,  $ZR/\alpha$  [1-4]. В данной работе предложен новый численный подход к оценке поправки на поляризацию вакуума полем ядра в кулоновских системах, включая тяжелые и сверхтяжелые конечные ферми-системы. Новый подход легко включается в формализм КЭД ТВ с калибровочно-инвариантным нулевым приближением [1,8-15]. В нулевом приближении ТВ, как обычно, генерируется оптимизированный базис релятивистских дираковских биспиноров. Оператор возмущения ТВ учитывает эффект запаздывания кулоновского взаимодействия. Магнитное меж электронное взаимодействие учтено в низшем порядке по параметру  $\alpha^2$  ( $\alpha$ - постоянная тонкой структуры). Для учета поправок на лэмбовский сдвиг, в частности, собственно энергетической части сдвига Лэмба используется реализована эффективная процедура Глушкова-Иванова-Ивановой [6-8], основанная на использовании «точного» расчета Мора для H-подобных ионов с точечным ядром [2]. Фактически искомая процедура базируется на результатах ковариантной регуляризации S-матрицы Фейнмана.

**Новый численный подход.** Как известно, учет поправки на поляризацию вакуума обычно производится в приближении известного потенциала Юлинга-Сербера (см.[2]). Современные оценки (на июнь 2008г.) поправки на поляризацию вакуума ограничены, как правило, первым членом разложения по параметру  $\alpha$ . Искомое значение представляется в виде матричного элемента поляризационного потенциала  $VH$ , который записывается в виде стандартной суммы [1,2]

$$VH = VH_1 + VH_3 + \dots \quad (1)$$

Каждое слагаемое в (1) включает "n" полевых вставок в электронную петлю поляризационной диаграммы второго порядка; каждое слагаемое  $VH_n$  обычно вычисляется с помощью разложения по параметру  $\alpha Z$ . Многочисленные расчеты показывают, например, для водородоподобных ионов, что при  $Z > 80$  все известные

члены этого разложения вплоть до  $\sim (\alpha Z)^7$  дают вклад приблизительно одинакового порядка и в большой степени компенсируют друг друга. На самом деле, во многих случаях учет высших порядков разложения по  $\alpha Z$  в (1) приводит только к существенной потере точности расчета. Известно, что первый член в (1) полностью учитывает три первых слагаемых точного разложения по  $\alpha Z$ . Первый член в (1) известен как потенциал Юлинга-Сербера. Искомый потенциал для точечного ядра обычно записывается в следующем стандартном виде

$$U(r) = -\frac{2\alpha}{3\pi r} \int_1^{\infty} dt \exp(-2rt/\alpha Z) \left(1 + 1/2t^2\right) \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{t^2} \equiv -\frac{2\alpha}{3\pi r} C(g), \quad (2)$$

где  $g = \frac{r}{\alpha Z}$ .

Достаточно простая модель приближения Юлинга-Сербера предложена в [2] в расчетах H-подобных ионов. В [5-7] для расчета водородоподобных ионов была предложена достаточно эффективная процедура переопределения вклада потенциала Юлинга-Сербера путем дополнительного учета членов разложения по параметру  $r/\alpha Z$ . В нашей работе мы уточним искомую процедуру оценки эффекта поляризации вакуума за счет более эффективного численного алгоритма. В ее основе лежит аппроксимация точного потенциала Юлинга-Сербера (квadrатура (2)) с высокой точностью аналитической функцией (см. ниже). Аппроксимировать функцию  $C(g)$  упрощенной аналитической формулой особенно удобно с вычислительной точки зрения в универсальной вычислительной программе. Для ее определения мы получили следующие асимптотики функции  $C(g)$  в двух предельных случаях:

$$C(g) \rightarrow \tilde{C}_1(g) = \ln(g/2) + 1.410611 - 1.037901g, \quad (3)$$

$$g \rightarrow 0$$

$$C(g) \rightarrow \tilde{C}_2(g) = -1.8813 \exp(-g)/g^{3/2},$$

$$g \rightarrow \infty$$

Первое слагаемое в (3) хорошо известно [2]. Учет двух предельных выражений для функции  $C(g)$  можно произвести следующим образом

$$\tilde{C}(g) = \tilde{C}_1(g)\tilde{C}_2(g)/(\tilde{C}_1(g) + \tilde{C}_2(g)). \quad (4)$$

Для основного состояния водородоподобного иона ошибка вычисления на основе приближения (4) не превышает 5% общего поляризационного сдвига в широком интервале изменения заряда ядра  $Z=10-170$ . Основная часть искомой ошибки связана с погрешностью в определении  $\tilde{C}_2(g)$  в (4).

Для более точной аппроксимации потенциала Юлинга-Сербера мы провели полный численный расчет функции  $C(g)$  в (4). Используя точные значения функции  $C(g)$ , далее было проведено сравнение функции  $\tilde{C}_1(g)$  и функции  $\tilde{C}_2(g)$  с последующей коррекцией путем умножением на полином  $f(g)$ . Коэффициенты

искомого полинома определялись таким образом, чтобы достигнуть наилучшего согласия с точной функцией  $C(g)$ . Искомые формулы имеют следующий вид:

$$\tilde{C}(g) = \tilde{C}_1(g)\tilde{C}_2(g) / (\tilde{C}_1(g) + \tilde{C}_2(g)), \quad (5)$$

$$\tilde{C}_2(g) = \tilde{C}_2(g)f(g), \quad (6)$$

$$f(g) = ((1.1031/g - 1.3359)/g + 0.8017). \quad (7)$$

**Результаты расчета и выводы.** В табл. 1 представлены численные результаты для потенциала Юлинга-Сербера как функция параметра  $g = r/\alpha z$  в 3-х приближениях [2,16]. Использование новой аппроксимации потенциала Юлинга-Сербера позволяет уменьшить ошибку расчета до величины 0.1%. Важно также подчеркнуть, что применение достаточно простой аналитической формы для функции, аппроксимирующей потенциал Юлинга-Сербера, позволяет достаточно легко включить его в мастерную систему дифференциальных уравнений, в которую входят также уравнения Дирака, уравнения для матричных элементов.

Таблица 1 - Численные значения потенциала Юлинга-Сербера как функция параметра  $g = r/\alpha z$  в 3-х приближениях

$g = r/\alpha z$	Расчет [2]	Расчет [16]	Наш расчет	Точный расчет
2.000	0.08	0.0350	0.03490	0.03496
1.500	0.15	0.0756	0.07571	0.07574
1.000	0.22	0.1770	0.1762	0.1766
0.750	0.28	0.2802	0.2828	0.2832
0.500	0.43	0.4765	0.4827	0.4831
0.400	0.55	0.5976	0.6155	0.6160
0.300	0.73	0.7895	0.8077	0.8083
0.200	1.03	1.1096	1.1118	1.1126
0.150	1.27	1.3386	1.3467	1.3472
0.100	1.64	1.6883	1.6939	1.6948
0.075	1.91	1.9492	1.9449	1.9453
0.050	2.30	2.3301	2.3219	2.3225

Разумеется, в дальнейших вычислениях для учета эффекта поляризации вакуума с учетом конечности (протяженности) ядра необходимо перейти от потенциала Юлинга-Сербера для точечного ядра к потенциалу для протяженного ядра, т.е. провести процедуру “размазывания” потенциала по объему. В результате этого потенциал Юлинга-Сербера, как и обычный кулоновский, становится конечным при  $r \rightarrow 0$ . Математически искомая процедура определения поляризационного потенциала для конечного ядра реализуется стандартным образом. Искомый потенциал записывается в виде

$$U(r|R) = \int U(|\vec{r}' - \vec{r}|) \rho(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (8)$$

Далее следует записать соответствующее дифференциальное уравнение для функции  $U(r|R)$

$$U(r|R) = U(r) \int_0^r d\vec{r}' \rho(\vec{r}') + \int_r^\infty d\vec{r}' U(\vec{r}') \rho(\vec{r}'). \quad (9)$$

Искомое дифференциальное уравнение имеет вид

$$U'(r|R) = U'(r) \int_0^r dr' \rho(r') \quad (10)$$

и решается численно (обычно мы используем метод Рунге-Кутты четвертого порядка) с граничным условием:

$$U(0|R) = \int_0^\infty dr' U(r') \rho(r'). \quad (11)$$

Итак, эффект конечности ядра учитывается заменой функции  $U_1(r)$  на  $U_1(r|R)$ . Частная производная по R вычисляется заменой  $U_1(r)$  на  $\partial U_1(r|R)/\partial R$ .

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за полезные советы и критические замечания.

### Список литературы

1. Глушков А.В., Релятивистские и корреляционные эффекты в спектрах атомных систем.- Одесса: Астропринт, 2006.- 400С.
2. 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.
3. Blundell S.A. Ab initio Calculations of QED Effects in Li-like, Na-like and Cu-like Ions// *Phys.Scripta.*-1993.-Vol.46,N1.-P.144-150.
4. Karpeshin F, Trzhaskovskaya M., Gangrskii Y.P., Resonance Internal Conversion in heavy Ions // *JETP.*-2004.-Vol.99.-P.286-289.
5. Ivanova E.P., Ivanov L.N. Modern Trends in Spectroscopy of Multicharged Ions// *Physics Rep.*-1991.-Vol.166,N6.-P.315-390.
6. Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation, 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., Malinovskaya S.V., Co-operative laser nuclear processes: border lines effects// In: *New projects and new lines of research in nuclear physics.* Eds. G.Fazio and F.Hanappe, Singapore : World Scientific.-2003.-P.242-280.
9. Glushkov A.V., Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions// *Low Energy Antiproton Phys., AIP Serie.*-2005.-Vol.796.-P.206-210.

10. *Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Ambrosov S.V., Loboda A.V., Gurnitskaya E.P.*, QED calculation of heavy multicharged ions with account for the correlation, radiative and nuclear effects// Recent Advances in Theor. Phys. and Chem. Systems.-2006.-Vol.15.- P.285-300.
11. *Glushkov A.V., Gurnitskaya E.P., Khetselius O.Yu.*, Energy levels, Lamb shift, hyperfine structure of heavy Li-like ions within QED calculation approach//Вісник Київського ун-ту.Сер фіз.-мат.-2004.-№4 .-С.421-426.
12. *Khetselius O.Yu.*, On possibility of sensing nuclei of the rare isotopes by means of laser spectroscopy of hyperfine structure// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2007.-N4.- P.11-16.
13. *Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., Loboda A.V., Florko T.A., Lovett L.*, Gauge-invariant QED perturbation theory approach to calculating nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions// Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer).-2008.-Vol.18.- P.505-522.
14. *Khetselius O.Yu.*, Relativistic Calculating the Spectral Lines Hyperfine Structure Parameters for Heavy Ions // Spectral Line Shapes, AIP Serie.-2008.-Vol.801.-P.211-216.
15. *Khetselius O.Yu.*, Nuclear electric quadrupole moments and hyperfine structure parameters for heavy isotopes//Trans. of the SLAC –MENU (Stanford).-2008.-Vol.1.- P.192-198.
16. *Glushkov A.V., Vitavetskaya L.A.*, Accurate QED perturbation theory calculation of the structure of heavy and superheavy elements atoms and multicharged ions with account of nuclear size effect and QED corrections // Uzghorod Univ. Scientific Herald. Ser.Phys.-Math.-2000.-Vol.8, N2.- C.321-326.

**Нова чисельна апроксимація поправки на поляризацію вакууму полем ядра в кулонівських системах. Хецеліус О.Ю.**

*Розвинуто новий підхід до оцінки поправки на поляризацію вакууму полем ядра в кулонівських системах, включаючи важкі і надважкі скінченні фермі-системи. Новий підхід природньо включається у загальний формалізм КЕД теорії збурень з використанням калібровочно-інваріантних базисів релятивістських біспінорів у нульовому наближенні.*

**Ключові слова:** теорія збурень, поляризація вакууму, нова апроксимація

**New numerical approximation of correction due to the vacuum polarization by nucleus field in the Coulomb systems. Khetselius O.Yu.**

*It is proposed a new approach to calculating a correction due to the vacuum polarization by nucleus field in the Coulomb systems, including heavy and superheavy finite fermi-systems. New approach is naturally included to a general formalism of QED perturbation theory with using gauge-invariant basises of relativistic bi-spinors in the zeroth order.*

**Keywords:** perturbation theory, vacuum polarization, new approach.