

О.Ю.Хецелиус, к.ф.-м.н., доц..

Одесский государственный экологический университет

НОВЫЙ ПОДХОД К ПОСТРОЕНИЮ ОПТИМИЗИРОВАННОГО ОДНОКВАЗИЧАСТИЧНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ В ТЕОРИИ РЕЛЯТИВИСТСКИХ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

В рамках S-матричного формализма и КЭД теории возмущений предложен новый подход к построению оптимизированного одноквазичастичного представления в теории релятивистских многоэлектронных систем, обобщающий известный КЭД подход [1] и удовлетворяющий фундаментальному принципу калибровочной инвариантности.

Ключевые слова: теория возмущений, релятивистские многоэлектронные системы, оптимизированное одноквазичастичное представление

Введение. Фундаментальной и актуальной проблемой современной теории релятивистских многочастичных кулоновских систем (квантовой теории поля) остается разработка нового неэмпирического высокоточного метода (или существенное усовершенствование имеющихся) расчета спектров собственных энергий и собственных функций соответствующих релятивистских операторов энергии. В данной работе предложен новый принцип построения базиса функций релятивистской теории возмущений (ТВ) для многочастичной системы, обобщающий известный КЭД подход Глушкова-Иванова [1,2]. Подобная задача оказывается близка к традиционной задаче построения базисов волновых функций для многоэлектронных систем, а именно, проблеме выбора оптимизированного одноквазичастичного представления. Как указывалось, в методах самосогласованного поля (ССП) генерируется искомое представление, обладающее принципиальными недостатками. Альтернативный вариант дает метод естественных орбиталей, развитый в работах Дэвидсона [3]. Его главное достоинство - векторы состояний получаются значительно "чище", чем в представлении ССП, что упрощает расчет энергетической матрицы. Тем не менее, в настоящее время не известно регулярного метода построения базиса таких орбиталей, приемлемого для массовых расчетов. Среди других подходов к оптимизации базиса в последние годы применение получил метод функционала плотности (ФП)[4]. Наиболее ценный результат подхода - построение представления, генерирующего улучшенный одноэлектронный базис. Однако в том виде, как обычно этот метод используется в массовых расчетах, его точность часто оказывается недостаточно высокой. В подходе Dietz-Heß [5] на основе вариационного принципа получена система уравнений типа Хартри-Фока (так называемые g-ХФ уравнения) более оптимальных, чем в обычной схеме ХФ, однако полную инвариантность достичь не удалось. В известном подходе Рудзикаса-Каняускаса [1] в рамках амплитудной схемы калибровочная постоянная использована в качестве подгоночного параметра. Помимо известной теоретической непоследовательности, этот подход в ряде важных случаев не обеспечивает приемлемую точность расчета. В наиболее последовательном в настоящее время подходе Глушкова-Иванова [2] в рамках модельного энергетического КЭД подхода использован принцип минимизации калибровочно неинвариантных вкладов в мнимую часть электронной энергии системы; при этом рассмотрено водородоподобное приближение при определении класса функций для описания электронной плотности ρ . В модели [6] в расчетах эффекта лазерного усиления в плазме многозарядных ионов использована схема [2] с дополнением базиса дискретных состояний уравнения Дирака штурмовским дополнением для учета состояний континуума.

Энергетический подход. Для построения оптимизированного одноквазичастичного приближения мы, как и в [2], используем энергетический подход. При этом предполагаемая новая схема расчета должны быть полностью калибровочно-инвариантной. Соблюдение этого фундаментального принципа будет свидетельствовать о качестве генерируемых в ее рамках базисов функций состояний. Следуя [4], мы воспользуемся фундаментальным принципом оптимизации ρ_c , связанным с минимизацией энергетического функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм 4-порядка КЭД ТВ (2 порядка атомной ТВ). Как указывалось выше, в четвертом порядке появляются диаграммы, вклад которых связан с эффектами поляризацией остова надостовнной квазичастицей. Это первые диаграммы, в которых проявляются коллективные эффекты; их вклады зависят от калибровки потенциалов электромагнитного поля (калибровочно неинвариантные вклады). Для определенности ниже рассматриваем одноквазичастичная система. Возмущением в ТВ является оператор

$$-V_c(r) - J_\mu(x)A^\mu(x), \quad (1)$$

где A — вектор-потенциал электромагнитного поля, J — оператор тока.

Ниже рассматриваются диаграммы, изображенные на рис.1.

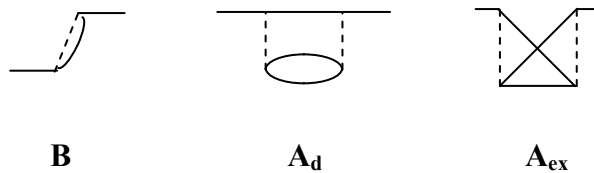


Рис.1 - Одно- и двухквазичастичные диаграммы КЭД ТВ.

На рис.1 диаграмма В - единственная диаграмма второго порядка ТВ, дающая вклад в мнимую часть энергии системы $\text{Im } E$; диаграмма A_d — прямая поляризационная диаграмма и A_{ex} — обменная поляризационная диаграмма. Это диаграммы 4-го порядка КЭД ТВ, учитывающие поляризацию остова. Электронный пропагатор:

$$G(X_1 X_2) = \begin{cases} - \sum_{s \leq F} \exp(-i\omega_s t_{12}) \Phi_s(r_1) \Phi_s(r_2), & t_1 < t_2 \\ \sum_{s > F} \exp(-i\omega_s t_{12}) \Phi_s(r_2) \Phi_s(r_1), & t_1 > t_2 \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $\sum_{s > F} \left(\sum_{s \leq F} \right)$ означает суммирование по всем электронным состояниям выше (ниже)

уровня Ферми электронов в остове, включая верхний континуум. Каждой пунктирной линии соответствует выражение $\gamma^\mu D_{\mu\nu} \gamma^\nu$. Вид фотонного пропагатора $D_{\mu\nu}$ зависит от калибровки. Обычно используемое выражение для пропагатора имеет следующий вид

$$D_{\mu\nu} = -\frac{1}{8\pi^2} \delta_{\mu\nu} \frac{1}{r_{12}} \int d\omega \exp(-i\omega t_{12} + i|\omega|r_{12}).$$

После интегрирования по временам (переход к невременным диаграммам) пунктирной линии соответствует "оператор" межэлектронного взаимодействия

$$\frac{e^2}{4\pi r} \exp(i|\omega|r_{12}) (1 - \alpha_1 \alpha_2), \quad (3)$$

где α_1 – матрицы Дирака. Второй член в (3) описывает брейтовское взаимодействие; экспонента учитывает запаздывание взаимодействия. Диаграмма второго порядка содержит только один электронный пропагатор. Вклад в $\text{Im } \Sigma$ дает $\sum_{s \leq F}$ (если активная частица-электрон) или $\sum_{s > F}$ (частица-вакансия). Соответственно этот вклад представляется в виде [2]

$$\text{Im } E_\alpha(B_1) = \sum \text{Im } E(\alpha - s | B_1), \quad (4)$$

т.е. суммой парциальных вкладов переходов из начального состояния $|\alpha\rangle$ в конечное состояние $|s\rangle$. Эти вклады выражаются через произведение одноэлектронных матричных элементов [1]. Информация об остове содержится только в потенциале уравнения Дирака для состояний α, s ; при этом обеспечивается ограничение пределов суммирования по s . Такие матричные элементы не должны зависеть от калибровки электромагнитного поля. Итак, во втором порядке $\text{Im } E$ является функционалом плотности, однако не зависит от калибровки. Диаграммы 4-го порядка учитывают влияние многочастичных корреляционных эффектов и их вклад фактически зависит от калибровки фотонного пропагатора. Базис будет оптимизированным, если уже в первом неисчезающем приближении провести минимизацию неинвариантного вклада. Фактически минимизируется вклад коллективных эффектов в матричные элементы определенного типа, что соответствует общему принципу построения базиса естественных орбиталей. Запишем фотонный пропагатор в следующем виде [7]:

$$D = D_T + C \cdot D_L \quad (5)$$

$$D_T = \frac{\delta_{\mu\nu}}{k_0^2 - k^2}, \quad (6)$$

$$D_L = \frac{k_\mu k_\nu}{k_0^2 - k^2}, \quad (7)$$

где D_T представляет обмен электронов поперечными фотонами, D_L — продольными фотонами, C — калибровочная константа. Далее можно рассчитать вклад диаграмм A_d, A_{ex} , связанный с продольной частью пропагатора в $\text{Im } E_{ninv}(\alpha-s|A)$. Эта величина — функционал электронной плотности ρ_c . Оптимизация ρ_c сводится к минимизации искомого энергетического функционала. При $D=D_T$ вклад диаграммы 2 порядка в парциальную ширину уровня α равен [2]

$$-\frac{e^2}{8\pi} \iint dr_1 dr_2 \psi_\alpha^+(r_1) \psi_s^+(r_2) D_T(r_1 r_2) \psi_\alpha(r_2) \psi_s(r_1), \quad (8)$$

а при $D=D_L$ -

$$-\frac{e^2}{8\pi} \iint dr_1 dr_2 \psi_\alpha^+(r_1) \psi_s^+(r_2) D_L(r_1 r_2) \psi_\alpha(r_2) \psi_s(r_1). \quad (9)$$

Здесь

$$D_T(r_1 r_2) = (1 - \alpha_1 \alpha_2) \sin \omega_{\alpha_s} r_{12} / r_{12}, \quad (10)$$

$$D_L(r_1 r_2) = [1 - (\alpha_1 n_{12})(\alpha_2 n_{12})] \sin \omega_{\alpha_s} r_{12} + \omega_{\alpha_s} [1 + (\alpha_1 n_{12})(\alpha_2 n_{12})] \cos \omega_{\alpha_s} r_{12}. \quad (11)$$

Вклад $D_{\mu\nu}$, согласно известной теореме Гранта, равен 0, если одноквазичастичные функции Φ_α, Φ_s удовлетворяют одному и тому же уравнению Дирака. Он может быть не равен нулю, например, если использовать приближение возмущенных волн [5]. Достаточно громоздкие вычисления для вклада A_d дают следующее выражение [2]

$$\begin{aligned} \text{Im} E_{ninv}(\alpha - s | A_d) = & -C \frac{e^2}{4\pi} \iiint \int dr_1 dr_2 dr_3 dr_4 \sum \left(\frac{1}{\omega_{mn} + \omega_{\alpha_s}} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\omega_{mn} - \omega_{\alpha_s}} \right) \Psi_\alpha^+(r_1) \Psi_m^+(r_2) \Psi_s^+(r_3) \Psi_n^+(r_4) (1 - \alpha_1 \alpha_2) / r_{12} \cdot \\ & \cdot \{ [(\alpha_3 \alpha_4 - (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34})) / r_{34} \cdot \sin[\omega_{\alpha_n}(r_{12} + r_{34}) + \omega_{\alpha_n} \cdot \\ & \cdot \cos[\omega_{\alpha_n}(r_{12} + r_{34})] (1 + (\alpha_3 n_{34})(\alpha_4 n_{34}))] \} \Psi_m(r_3) \Psi_\alpha(r_4) \Psi_n(r_2) \Psi_s(r_1). \end{aligned} \quad (12)$$

При этом D представлено в виде $D_T + CD_L$ и оставлен только линейный по C член. Можно показать, что выражение (12) представляется в виде слагаемых

$$\sum \langle \alpha m | W_1 | ns \rangle \langle sn | W_2 | m \alpha \rangle / (\omega_{mn} \pm \omega_{\alpha_s}) \quad (13)$$

с четырьмя различными комбинациями операторов W_1 и W_2 . Сумму можно вычислить методом дифференциальных уравнений [8,9]. Индекс m дает конечное число состояний, занятых в остове системы, и состояния отрицательного континуума. Связанная с континуумом часть описывает поляризацию вакуума электронного поля, в неперенормируемой теории к расходящимся интегралам. Ее вклад, однако, по отношению к основному вкладу имеет дополнительный порядок малости (αZ^2). Из расчетов энергий во 2 порядке известно, что численно поправка на поляризацию вакуума в реальных системах очень мала. Опуская часть суммы с $\omega_m < 0$ приходим к конечной системе дифференциальных уравнений. При заполнении остова вычислительная процедура быстро усложняется. Вклад поляризационных диаграмм определяется поляризуемостью остова, которая, согласно теореме Кона-Шэма, связана с плотностью. Считаем в соответствии с приближением Томаса - Ферми, что электроны остова представляют собой однородный электронный газ. Тогда сумма $\sum_{n>f, m<f}$

вычисляется аналитически: значение однозначно определяется уровнем Ферми остова, т.е. ρ_c .

Аппроксимации в рамках теории ФП. Согласно [2], интеграл (12) аппроксимируется матричным элементом оператора поляризационного взаимодействия. Далее процедура минимизации ФП $\text{Im} E_{ninv}$ реализуется стандартным образом при условии

$$\int dr r^2 \rho_c(r) = 1$$

и сводится к цепочки вариаций

$$\delta \rho_c \rightarrow \delta V_c \rightarrow \delta \{f_\alpha, f_s, g_\alpha, g_s\} \rightarrow \delta X, \delta Y \rightarrow \delta Y_i \rightarrow \delta Z_i \rightarrow \delta I \rightarrow \delta E. \quad (14)$$

Здесь f, g — решения уравнения Дирака с $V_N + V_C$ (V_N — ядерный потенциал). Стандартный обменный потенциал Кона-Шэма (КШ) определяется в виде [4]

$$V_X^{KS}(r) = -(e^2 / \pi) [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3}. \quad (15)$$

В приближении локальной плотности обменный потенциал [4]

$$V_X[\rho(r), r] = \frac{\delta E_X[\rho(r)]}{\delta \rho(r)}, \quad (16)$$

где $E_X[\rho(r)]$ - обменная энергия многоэлектронной системы, соответствующая однородной плотности $\rho(r)$, которая выводится из гамильтониана, содержащего поперечный векторный потенциал фотонов. Соответственно, релятивистский обменный потенциал записывается в виде [10]

$$V_X[\rho(r), r] = V_X^{KS}(r) \cdot \left\{ \frac{3}{2} \ln \frac{[\beta + (\beta^2 + 1)^{1/2}]}{\beta(\beta^2 + 1)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right\}, \quad (17)$$

где $\beta = 3\pi^2 \rho(r)]^{1/3} / c$, c - скорость света. В качестве корреляционного потенциала в дальнейшем будем использовать обобщенный потенциал Гуннарсона-Лундквиста (ГЛ)

$$V_C[\rho(r), r] = -0.0333 \cdot b \cdot \ln[1 + 18.3768 \cdot \rho(r)^{1/3}], \quad (18)$$

где b - параметр оптимизации [2]. Далее первое звено цепочки вариаций реализуется с помощью

$$\delta V_C(r) = \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 \delta \rho_c(r') + \int_r^\infty dr' r' \delta \rho_c(r') + XF[\rho_c] \delta \rho_c(r), \quad (19)$$

где последнее слагаемое обусловлено учетом обменно-корреляционных эффектов в приближении КШ-ГЛ. Это ключевой момент нашего подхода (использование релятивистских ФП). Для реализации 2-го звена надо найти поправку первого порядка по δV_C к функциям $f_\alpha, f_s, g_\alpha, g_s$ - решениям уравнения Дирака с потенциалом $V_N + V_C$. Искомая поправка - биспинор

$$\Phi_{\mu m} = \sum_{n_i} \Psi_{n_i \mu_i m_i} \langle n_i \mu_i m_i | V | n \mu m \rangle / (\varepsilon_{n_i \mu_i m_i} - \varepsilon), \quad (20)$$

где $(n \mu m)$ - квантовые числа одноэлектронных состояний, ε - энергетический параметр. Задача расчета биспинора типа (20) хорошо известна в теории взаимодействия атомных систем с лазерным полем [11]. Компоненты (20) удовлетворяют системе уравнений типа Дирака (в кулоновских единицах) [1]:

$$G' / \alpha Z + (1 - \mu) G / \alpha Z r + A_+ F = \delta V_C f_{n_i \mu_i}, \quad (21)$$

$$- F' / \alpha Z + (1 + \mu_i) F / \alpha Z r + A_- G = \delta V_C g_{n_i \mu_i},$$

где α - постоянная тонкой структуры, Z - заряд ядра, а функции A_\pm определяются выражением

$$A_\pm = V_C(r) \pm 1 / (\alpha Z)^2 - \varepsilon.$$

Численная реализация. Решения системы (21) далее стандартно представляются в форме квадратур и содержат пары фундаментальных решений (21) без правых частей. В результате вклад (12) представляется суммой радиальных интегралов типа

$$I = \iiint dr_1 dr_2 dr_3 X(r_1) Y(r_2) Z(r_3) L(r_1 r_3) M(r_2 r_3), \quad (22)$$

где использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \{L_1, M_1\} &= Z_\lambda^{(1)} r^p, \{L_2, M_2\} = Z_\lambda^{(2)} r^q, \\ \{X, Y\} &= \{f_\alpha f_s r^t; g_\alpha g_s r^t; f_\alpha g_s r^u; g_\alpha f_s r^u\}, \\ Z(r) &= \rho_C^{1/3}(r) r^v, \end{aligned} \quad (23)$$

где $\lambda=0,1$; p, q, t, u, v - некоторые целые числа; f, g – радиальные части двухкомпонентных функций состояния квазичастицы.

В (22) под знаком трехкратного интегрирования стоят известные функции: Бесселя, радиальные компоненты функций одноквазичастичных состояний (решения уравнения Дирака) и степени переменных $r_1 r_2 r_3$. Полное выражение (12) содержит несколько радиальных интегралов типа (22) с достаточно громоздкими коэффициентами, содержащими $6j$ - символы Рака и $9j$ - символы Фано. С помощью несложных компьютерных программ (подпрограммы типа “Angleco” в комплексе программ “Superatom” [1,12-17]) вычисление Cj - символов – обычная процедура. Функции Z и Y – билинейные комбинации радиальных функций; их вариации вычисляются просто. Вариации функций Y_i, Z_i находятся по их дифференциальным уравнениям:

$$\begin{aligned} y_1' &= XL_1, y_2' = YM_1, \\ y_3' &= ZL_1 M_1, \\ y_4' &= YM_2 y_3 + ZL_1 M_1 y_2, \\ y_5' &= XL_2 y_3 + ZL_1 M_1 y_1, \\ Z_2' &= XL_2 y_4, Z_3' = YM_2 y_5, \end{aligned} \quad (24)$$

$$I = \lim_{r \rightarrow \infty} \{Z_1(r) + Z_2(r) + Z_3(r)\}.$$

Итак, реализация вариационного принципа приводит в результате к системе дифференциальных уравнений (система обыкновенных дифференциальных уравнений Дирака для радиальных компонент, уравнений Бесселя, уравнений для интегралов второго порядка ТВ и т.д.).

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

Список литературы

1. Глушков А.В. Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.- Одесса: Астропринт, 2008.- 800С.
2. 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.
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. Kohn W., Sham L.J. Quantum density oscillations in an inhomogeneous electron gas//Phys. Rev. A.-1964.-Vol.140.-P.1133-1142.
5. Dietz K., Hess B.A. Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics// Phys.Scripta.-1989.-Vol.39.-P.682-688.
6. Ivanova E.P., Ivanov L.N. Modern Trends in Spectroscopy of Multicharged Ions// Physics Rep.-1991.-Vol.166, N6.-P.315-390.

7. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика.-М.: Наука, 1989.-725С.
8. Glushkov A.V. Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions// Low Energy Antiproton Phys.-2005.-Vol.796.-P.206-210.
9. Glushkov A.V., Rusov V.D., 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 and F.Hanappe, Singapore : World Scientific.-2003.-P.146-162.
10. Das M.P., Ramana M.V., Rajagopal A.K. Self-consistent relativistic density-functional theory: Application to neutral U atom and some ions of Li isoelectronic sequence// Phys.Rev.A.-1980.-Vol.22.-P.9-13.
11. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A. QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Springer).-2008.-Vol.18.-P.541-558.
12. Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E. High order corrections in relativistic perturbation theory with model zero Approximation// Physica Scripta.-1985.-V.32,N4.-P.512-524.
13. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Gurnitskaya E.P., Loboda A.V., Florko T.A. 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.505-552.
14. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S., Dubrovskaya Yu.V., Vitavetskaya L.A. Quantum calculation of cooperative muon-nuclear processes // Recent Advances in Theory of Phys. and Chem. Systems (Springer).-2006.-Vol.15.-P.301-328.
15. 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.
16. 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.
17. 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.

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 baseses of relativistic bi-spinors in the zeroth order.

Keywords: perturbation theory, vacuum polarization, new approach.