

Л.А.Витавецкая, к.ф.-м.н., Ю.Г.Чернякова, к.ф.-м.н., Ю.В.Дубровская, к.ф.-м.н.
И.А. Андронович, студ.

Одесский государственный экологический университет

СОБСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ВКЛАД В ЛЭМБОВСКИЙ СДВИГ: АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИИ МОРА НА СЛУЧАЙ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Предложена новая численная аппроксимация аналога функции Мора в задаче вычисления радиационных поправок (собственно-энергетический вклад в лэмбовский сдвиг) для многоэлектронных атомных систем.

Ключевые слова: радиационные эффекты, собственно-энергетический сдвиг

Введение. Оценка величин радиационных поправок к энергии релятивистских атомных систем, включая так называемую собственно-энергетическую часть лэмбовского сдвига, а также поправку на поляризацию вакуума кулоновским полем ядра, по-прежнему остается актуальной фундаментальной проблемой современной теории атома и квантовой теории поля [1-15]. Подавляющее большинство современных подходов к определению собственно-энергетического вклада в лэмбовский сдвиг основываются на использовании разложений по физическим параметрам $1/Z, \alpha Z$, где Z – заряд ядра, α – постоянная тонкой структуры. Принципиально важно подчеркнуть, что любое из искомым разложений по физическим параметрам $1/Z, \alpha Z$ становится некорректным и тех или иных конкретных физических задачах. В принципе в случае тяжелых и сверхтяжелых ионов искомые разложения вообще перестают быть корректными. В этом смысле перспективным представляется направление, связанное с моделированием собственно-энергетического вклада, без использования искомым разложений и базирующееся на идее Иванова и др. [8-10]. Подавляющее количество работ по расчету лэмбовского сдвига выполнено для атома водорода и H-подобных ионов, а в последнее время, и для двух-электронных систем (He, He-подобные ионы), трех электронных систем, в то время как для существенно многоэлектронных атомов и ионов ситуация выглядит во многом неопределенной. Исключение составляют лишь несколько многоэлектронных ионов, в частности, Li-подобный ион урана U^{89+} , Na-подобные ион Pt и др., для которых были проведены прецизионные экспериментальные измерения лэмбовского сдвига и проведено несколько расчетов на основе теорий [5-12]. Отметим, что массовых расчетов для многоэлектронных ионов до сих пор не проведено. Наиболее актуальными задачами современной КЭД теории многоэлектронных атомных систем являются [5]: во-первых, создание вычислительной процедуры, по возможности избегающей разложений по параметрам $1/Z, \alpha Z$, во-вторых, развитие экономного метода расчета собственно энергетического сдвига для протяженного ядра, и, разумеется, дальнейшее развитие теории одновременного прецизионного учета релятивистских, корреляционных, радиационных, ядерных эффектов в спектрах многоэлектронных атомов [1-16]. В данной работе в рамках формализма Мора [1,2] предложена новая улучшенная численная аппроксимация аналога функции Мора в задаче вычисления собственно-энергетического вклада в лэмбовский сдвиг для многоэлектронных систем без использования традиционных разложений по параметрам $1/Z, \alpha Z$. Планируемые объекты исследования – тяжелые Be-, B-, O-, F- подобные ионы.

Теория. Начнем с краткого изложения исходных положений теории [1-5]. Напомним, что вклад в секулярный оператор от собственной массы электрона в низшем порядке по α распадается на собственно массовый оператор Σ_W (диаграммы, описывающие собственно-энергетический вклад) и так называемый головастиковый вклад Σ_T , представляющий собою фактически вклад поляризации вакуума. С учетом соответствующих контр-членов в явном виде диагональный матричный элемент Σ_{WR} определяется известным выражением

$$\Sigma_{WR} = \left(e^2 / 2\pi i \right) \int dE \int d^3x_2 d^3x_1 \bar{\psi}(x_2) \gamma_\alpha S_U(E, x_2, x_1) \times \times \gamma_\beta \psi(x_1) D^{\alpha\beta}(E - \epsilon, x_2 - x_1) - \delta m \int d^3x \bar{\psi}(x) \psi(x). \quad (1)$$

Здесь $\psi(x)$ – волновая функция электрона в рассматриваемом состоянии, ϵ – его энергия, $D^{\alpha\beta}$ – фотонный пропагатор (в фейнмановской калибровке). Вычисление (1) обычно основывается на представлении пропагатора электрона S_U в виде суммы парциальных пропагаторов с заданным квантовым числом k . Каждый парциальный пропагатор имеет известную угловую часть, а радиальная часть его является функцией Грина радиального уравнения Дирака [4,5]. Разумеется, известен механизм устранения так называемых ультрафиолетовых расходимостей. Выражение (1) в целом является конечным, однако, это достигается сокращением ультрафиолетовых расходимостей основного члена и контрчлена, при чем стандартно обеспечивается одинаковая регуляризация расходящихся выражений в (1) в области больших импульсов. Следствием являются известные трудности при вычислении (1). Обычные расчёты δm , как правило, используют ковариантное обрезание, напр., ограничением промежуточных импульсов интегрирования k условием $|k^2| < \Lambda^2$ после евклидова разворота контура интегрирования к чисто мнимым k_0 . В первом же члене (1) провести подобное обрезание не представляется возможным, поскольку S_U не ковариантно. Естественная регуляция первого члена заключается в обрезании на больших E , напр., условием $|E| < \Lambda$, и, очевидно, нековариантна. Подобная схема вычислений обладает известным недостатком, связанным с тем, что при нековариантном обрезании как δm , так и первый член в (1) расходятся линейно. Здесь необходимо рассчитывать численно интеграл от разности двух выражений, каждое из которых, вообще, не убывает при $E \rightarrow \infty$, что ведет к большой потере точности. В известной схеме Брауна-Лангера-Шаефера (см.[1,3]) предпринималось преобразование (1) с целью улучшения поведения подынтегрального выражения как функции E при $|E| \rightarrow \infty$. Если из (1) вычесть его значение при нулевом внешнем поле, то нетрудно записать

$$\Sigma_{WR} = \left(e^2 / 2\pi i \right) \int dE \int d^3x_2 d^3x_1 \bar{\psi}(x_2) \gamma_\alpha [S_U(E, x_2, x_1) - S(E, x_2 - x_1)] \times \times \gamma_\beta \psi(x_1) D^{\alpha\beta}(E - \epsilon, x_2 - x_1) + \Sigma_R - (1 - Z_2) \int d^3x \bar{\psi}(x) S^{-1} \psi(x). \quad (2)$$

В (2) Σ_R есть среднее значение в состоянии электрона с волновой функцией $\psi(x)$ от оператора перенормированной собственной массы для свободного электрона (известная и конечная величина). Контрчлен с множителем $1 - Z_2$ расходится. Эти расходимости компенсируют расходимости первого члена. Можно представить $1 - Z_2$ в виде интеграла по E в пределах $|E| < \Lambda$. Тогда $1 - Z_2$ расходится логарифмически. Представив первый и третий члены (2) в виде интеграла по E в пределах $|E| < \Lambda$ видно, что каждый из двух членов в подынтегральном выражении ведет себя при $E \rightarrow \infty$ как

$1/E$, а разность их убывает быстрее, так что интеграл существует при $\Lambda \rightarrow \infty$. В рамках формализм Мора [1,2] удается все ультрафиолетовые расходимости сократить в явном виде, причем отсутствует проблема взаимной компенсации плохо убывающих членов и следующей отсюда потери точности. Здесь использовано разбиение пропагатора S_U , при котором выделяется выражение, асимптотически в ультрафиолетовой области совпадающее с двумя первыми членами разложения по внешнему полю и представимое в замкнутом виде через радиальные функции Грина свободного уравнения Дирака. Искомое разбиение в терминах резольвенты оператора Дирака в кулоновском поле R_U , связанной с пропагатором, имеет вид

$$S_U(E, x, y)\beta = \langle x | R_U(E) | y \rangle, \quad (3)$$

$$R_U(E) = (H_{DU} - E)^{-1} = (\tilde{\alpha}p + \beta m + eU_0 - E)^{-1}. \quad (4)$$

Далее возможно представление

$$R_U(E) = R(E) - VR_K(E) - 2E(\beta + E)VR_K^2(E) + \tilde{R}(E) \equiv R_1(E) + \tilde{R}(E) \quad (5)$$

где R – свободная резольвента оператор Дирака, а $V = eU_0$, а R_K связано с уравнением Клейна – Гордона

$$R_K(E) = (p^2 + 1 - E^2)^{-1}. \quad (6)$$

Можно показать, что выделенный член R_1 асимптотически в ультрафиолетовой области совпадает с двумя первыми членами разложения R_U в ряд по eU_0 и поэтому при подстановке в (1) концентрирует все ультрафиолетовые расходимости. В фактических вычислениях Мора [1] используется ковариантная регуляция заменой обычного пропагатора фотона D на регуляризованный

$$D_{\Lambda}^{\alpha\beta}(k) = g^{\alpha\beta} \left[1/k^2 - 1/(k^2 - \Lambda^2) \right]. \quad (7)$$

Такой выбор обрезания позволяет применить его и в присутствии внешнего поля в интегральном члене (1) и обойтись тем самым без нековариантных вычислений расходящихся констант. При регуляризации величина $\delta m(\Lambda)$:

$$\delta m = (\alpha/\pi) \left(\frac{3}{4} \ln \Lambda^2 + \frac{3}{8} \right). \quad (8)$$

До разделения резольвенты R_U на $R_I + \tilde{R}$ фейнмановский контур интегрирования по E в формуле (1) разворачивается вдоль мнимой оси и далее из него выделяется конечная область интегрирования по E (областью низких энергий), вклад от которой вычисляется отдельно. Деформированный контур интегрирования разделен на две части: низкоэнергетическую C_L и высокоэнергетическую C_H . Ультрафиолетовые расходимости связаны с интегрированием по C_H , поэтому разделение R_U на части $R_I + \tilde{R}$ производится только в интеграле по C_H . В итоге вклад Σ_{WR} :

$$\Sigma_{WR} = \Sigma_L + \Sigma_1 + \tilde{\Sigma} - \delta m \langle \beta \rangle. \quad (9)$$

Здесь части, помеченные индексами L , I и тильдой, относятся к интегрированию по C_L , интегрированию по C_H с резольвентой R_I и интегрированию по C_H с резольвентой \tilde{R} соответственно. Последний член – это контрчлен перенормировки массы. Проводя интегрирование по k по методу Фейнмана, объединением знаменателей с помощью интегрирования по вспомогательному параметру, можно получить для вклада Σ_1 [1,4]

$$\Sigma_1 = (\alpha/\pi) \left[\left(3/4 \ln \Lambda^2 - 9/8 \right) \langle \beta \rangle - 7/6 \langle V \rangle + \gamma^4 f_1(\gamma) \right] \quad (10)$$

где

$$f_1(\gamma) = f_1^{(1)}(\gamma) + \sum_{i=1}^4 h_i(\gamma).$$

Вычисление вкладов Σ_L и $\tilde{\Sigma}$ производится в координатном пространстве с использованием упоминавшегося представления пропагатора R_U или \tilde{R} в виде суммы по k от парциальных вкладов с известными угловыми и радиальными частями. Окончательно полный вклад Σ_{WR} в сдвиг уровня имеет вид

$$Re E_{WR} = (\alpha/\pi) \gamma^4 F(\gamma), \quad (11)$$

$$F = f_1 + \sum_{i=1}^4 h_i + f_L + \tilde{f}. \quad (12)$$

Функция $F(Z\alpha)$ рассчитана для состояния электрона $1s_{1/2}$ (и др.) и затабулирована в виде таблицы в диапазоне значений $Z=10-100$ [2]. Далее для удобства перепишем выражение Мора в виде

$$E_{WR}(H|Z, nlj) = 0.027148 \frac{Z^4}{n^3} F(H|Z, nlj). \quad (13)$$

Улучшенная аппроксимация функции Мора вклада в лэмбовский сдвиг для многоэлектронных систем может быть получена по следующей схеме. Предполагается, что для произвольного многоэлектронного иона с электроном в состоянии nlj над остовом замкнутых электронных оболочек искомая величина - собственно энергетический сдвиг, при фиксированных nlj может быть представлен в виде

$$E_{WR}(Z, nlj) = 0.027148 \frac{\xi^4}{n^3} f(\xi, nlj). \quad (14)$$

Параметр $\xi = (E_{nlj}^{Rel})^{1/4}$ выражается через величину $E_R = E_{nlj}^{Rel}$ - релятивистскую часть энергии связи электрона в состоянии nlj . Параметр ξ играет роль эффективного заряда ядра для описания релятивистских эффектов. Функция E_{nlj}^{Rel} - универсальна в том смысле, что не зависит от формы ядра и наличия остова замкнутых оболочек [9,10,17]. Численная процедура, обобщающая результаты работ [8-10], включает следующие этапы: 1) расчет значений E_R и ξ для состояний nlj H -подобных ионов с точечным ядром; 2) построение аппроксимирующей функции $f(\xi, nlj)$ для опорных значений Z и соответствующей функции F ; 3). расчет значений E_R и ξ для состояний nlj многоэлектронных ионов с конечным ядром; 4). расчет значений E_{WR} для искомым состояний. Вычисление энергий многоэлектронной системы (ионов изоэлектронной серии) производится дважды с реальным значением константы тонкой структуры $\alpha \approx 1/137$ и с $\alpha=0$, что позволяет отделить значения E_R и ξ . Наилучшая численная интерполяция для ионов серии, скажем, с $Z=10-100$, достигается в случае, если для различных интервалов Z использовать внутри лежащие опорные точки. Тогда искомые функции могут быть аппроксимированы полиномами вида

$$E_{nlj}^{SE}(\xi) = \xi^4 (A_{nlj} + B_{nlj} \xi + C_{nlj} \xi^2). \quad (15)$$

Параметры ξ определяются для разных состояний многоэлектронных ионов и далее по интерполяционным формулам типа (15) рассчитываются сдвиги E_{nlj}^{SE} .

В заключение авторы выражают глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за полезные советы и замечания.

Список литературы

1. *Mohr P.J.*, Quantum Electrodynamics Calculations in few-Electron Systems// Phys. Scripta.-1993.-Vol.46,N1.-P.44-52;
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. *Браун М.А., Гурчумелия А.Д., Сафронова У.И.*, Релятивистская теория атома.- М.: Наука, 1984.-268С.
4. *Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б.* Квантовая электродинамика.- М.: Физматгиз, 1981.-452С.
5. *Глушков А.В.*, Релятивистские и корреляционные эффекты в спектрах атомных систем.- Одесса: Астропринт, 2006.- 450С.
6. *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.
7. *Drake G.W.F.*, High precision calculations and QED effects for two-and three-electron atoms// Phys. Scripta T.-1993.-Vol.T46.-P.116-124.
8. *Дрикер М.Н.,Иванова Е.П., Иванов Л.Н.*, Прецизионный расчет энергий тяжелых водородоподобных ионов// Опт.Спектр.-1983.-Т.55.-С.224-229.
9. *Ivanova E.P., Ivanov L.N., Aglitsky E.V.*, Modern Trends in Spectroscopy of Multicharged Ions// Physics Rep.-1988.-Vol.166.-P.315-390.
10. *Glushkov A.V., Ivanov L.N.* Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions // Phys. Lett.A.-1992.-Vol.170,N1.-P.33-37.
11. *Quiney H.M., Grant I.P.*, Partial-wave mass renormalization in atomic QED calculation// Phys. Scripta T.-1993.-Vol.T46.-P.132-138.
12. *Persson H., Lindgren L., Salomonson S.*, A new approach to the electron self-energy calculation// Phys.Scripta.-1993.-Vol.T46.-P.125-131
13. *Indelicato P.*, Relativistic effects in few-electron heavy atoms. Ab initio evaluation of levels energy and transition probabilities//Phys. Scripta T.-1996.-Vol.T65.-P.57-62.
14. *Yerokhin V.A., Artemyev A.N., Shabaev V.M.*, QED treatment of electron correlation in Li-like ions//Phys.Rev.A.-2007.-Vol.75.-P.062501.
15. *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.
16. *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.
17. *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.- C.321-326.

Власне-енергетичний внесок у лембівський зсув: апроксимація функції Мора на випадок багатоелектронних систем. Вітавецька Л.А., Чернякова Ю.Г., Дубровська Ю.В., Андронович І.А.

Запропонована нова чисельна апроксимація аналога функції Мора у задачі обчислення радіаційних поправок (власне-енергетичний внесок у лембівський зсув) для багатоелектронних атомних систем.

Ключові слова: радіаційні поправки, власне-енергетичний зсув.

Self-energy contribution to Lamb shift: approximation of the Mohr function on a case of multi-electron systems. Vitavetskaya L.A., Chernyakova Yu.G., Dubrovskaya Yu.V., Andronovich I.A.

A new numerical approximation of the Mohr function analog in the task of definition of the radiative corrections (self-energy contribution to the Lamb shift) for multielectron atomic systems is proposed.

Keywords: radiative effects, self-energy shift.