

Поляризация вакуума кулоновским полем: асимптотика потенциала

Н.Л. Манаков, А.А. Некипелов

Воронежский государственный университет

Стендовый доклад на Всероссийском совещании
по прецизионной физике и фундаментальным физическим
константам,
Дубна, 1-4 дек. 2009г.

В настоящем сообщении мы используем полученную нами ранее асимптотику поляризационного потенциала (справедливую вплоть до $\alpha Z \sim 1$) [1] при расчете однопетлевых поправок для энергии водородоподобных ионов с ядром конечных размеров. Результаты полностью согласуются с данными работы [2], в которой рассчитаны также поляризационные поправки для ионов, изоэлектронных атомам щелочных металлов. Показано, что использование предлагаемого нами способа учета поляризационного потенциала является эффективным и в этом случае.

1 Введение

Вклад эффектов поляризации вакуума сильным кулоновским полем при расчете спектров многозарядных ионов с учетом фейнмановских диаграмм различных порядков рассматривался рядом авторов (ссылки см. в обзоре [3]). Одной из техниче-

ских трудностей таких расчетов является проблема вычисления поляризационного потенциала при больших расстояниях r от ядра. Как известно, при малых r члены парциального разложения поляризационного потенциала достаточно быстро ($\sim k^{-8}$) убывают с ростом квантового числа $k = j + 1/2$ ($j = 1/2, 3/2, \dots$), в то время как при больших r эти слагаемые вначале растут с увеличением k (до значений k порядка $r/3$)¹ и лишь затем начинают убывать (см. табл. 1). Это создает проблемы с численным суммированием парциального ряда. В частности, в работе [2] вначале рассчитывались отдельные слагаемые парциального разложения для поляризационных поправок в энергии, а затем выполнялось численное суммирование парциального ряда.

2 Плотность и потенциал индуцированного заряда

Плотность распределения индуцированного заряда, обусловленного поляризацией вакуума полем атомного ядра, может быть представлена в виде:

$$\begin{aligned}\rho(r) &= \rho^{(1)}(r) + \rho^{(3)}(r) + \rho^{(5)}(r) + \dots = \\ &= \rho^{(1)}(r) + \rho^{(3+)}(r), \quad e\rho^{(n)} \sim \alpha(\alpha Z)^n, \quad (1)\end{aligned}$$

Здесь $\rho^{(1)}(r)$, линейная по αZ часть плотности, соответствует потенциалу Юлинга. Нелинейная по αZ величина $\rho^{(3+)}(r)$ (обусловленные ею поправки в спектры называются также поправками Вичмана - Кролла) представляется как сумма

¹везде используются релятивистские единицы $\hbar = c = m_e = 1$

парциальных слагаемых

$$\rho^{(3+)}(r) = \sum_{k=1}^{\infty} \rho_k^{(3+)}(r), \quad \text{где} \quad k = j + 1/2 \quad (2)$$

Парциальные слагаемые, в свою очередь, выражаются через радиальную часть парциального разложения функции Грина уравнения Дирака $G_{jl}(E; r, r')$ следующим образом:

$$\rho_k^{(3+)}(r) = -\frac{ek}{4\pi^2 r^3} \int_0^{\infty} g_k^{reg}(\omega, r) d\omega \quad (3)$$

$$g_k(\omega, r) = \sum_{l=j\pm 1/2} \text{Sp} [G_{jl}(i\omega; r, r) + G_{jl}(-i\omega; r, r)], \quad k = j + 1/2 \quad (4)$$

Здесь g_k^{reg} получается из g_k вычитанием из последней линейной по αZ части:

$$g_k^{reg}(r) = g_k(r) - Z \left[\frac{dg_k}{dZ} \right] \Big|_{Z=0} \quad (5)$$

Это вычитание соответствует вычитанию из $\rho(r)$ вклада, соответствующего потенциалу Юлинга, тем самым решается проблема перенормировки.

С учетом равенства нулю полного индуцированного заряда

$$Q = 4\pi \int_0^{\infty} \rho(r) r^2 dr = 0, \quad (6)$$

выражение для потенциала, соответствующего плотности (1) имеет вид:

$$V_{pol}(r) = 4\pi e \int_r^{\infty} r' \left(\frac{r'}{r} - 1 \right) \rho(r') dr'. \quad (7)$$

Аналогично (1), этот потенциал можно представить в виде

$$V(r) = V_{nuc}(r) + V_{pol}(r), \quad \text{где} \quad (8)$$

$$V_{pol} = V^{(1)}(r) + V^{(3)}(r) + V^{(5)}(r) + \dots = V^{(1)}(r) + V^{(3+)}(r) \quad (9)$$

Здесь $V^{(1)}(r)$ — потенциал Юлинга, линейный по Z , $V^{(3+)}(r)$ — содержит нелинейные по Z слагаемые, $V_{nuc}(r)$ — потенциал атомного ядра.

3 Асимптотики плотности и потенциала

Ранее в [4, 1] нами были получены аналитические разложения в асимптотические ряды величин $g_k^{reg}(\omega, r)$, $\rho_k^{(3+)}(r)$, $\rho^{(3+)}(r)$ и $V^{(3+)}(r)$. Первые члены асимптотики для $\rho_k^{(3+)}(r)$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \rho_k^{(3+)}(r) = & \frac{e(\alpha Z)^3}{4\pi^2} \frac{1}{rR^8} \left\{ \frac{16}{15} + \left(64p^2 - \frac{688}{21}p - \frac{64}{35} \right) \frac{1}{R^2} + \right. \\ & \left. + \left[\frac{142}{35} - \frac{5464}{105}p + \frac{37072}{15}p^2 - \frac{130048}{15}p^3 + 7168p^4 + \frac{64}{21}(\alpha Z)^2 \right] \frac{1}{R^4} + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $R^2 = r^2 + k^2 - 1/4 = r^2 + j(j+1)$, $p = r^2/R^2$.

Выражение (10) можно аналитически просуммировать по k с помощью формулы Эйлера-Маклорена. Полученная таким образом асимптотика потенциала имеет вид

$$V^{(3+)}(r) = \frac{\alpha(\alpha Z)^3}{\pi} \left[\frac{2}{225r^5} + \frac{59}{1323r^7} + \frac{1977 + 20(\alpha Z)^2}{4725r^9} + \dots \right]. \quad (11)$$

(Отметим, что в [4] в одном из коэффициентов асимптотики для $V^{(3+)}(r)$ была допущена опечатка, исправленная затем в [1]).

Отметим следующие полезные свойства полученных асимптотик

$g_k^{reg}(\omega, r)$, $\rho_k^{(3+)}(r)$, $\rho^{(3+)}(r)$ и $V^{(3+)}(r)$:

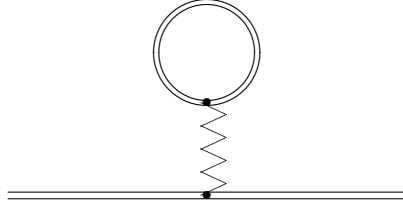
- Асимптотика (10) является разложением по параметру $1/R$, т.е. она справедлива при $r^2 + j(j+1) \gg 1$.
- Параметр αZ не предполагается малым.
- Все асимптотики применимы и в случае ядра конечных размеров. Численный расчет показывает, что относительный вклад конечных размеров при $r \gg R_{nuc}$ в плотность и потенциал исчезает экспоненциально с ростом r .
- Поскольку указанные разложения представляют собой асимптотические ряды, их погрешность, как показывает и численный расчет, примерно равна последнему отброшенному слагаемому, и, т.к. число суммируемых слагаемых растет с ростом r (или R), эта погрешность экспоненциально убывает с ростом r (или R).

k	$r=5\lambda_e$	$r=10\lambda_e$	$r=15\lambda_e$
1	0.26758	0.06270	0.02717
2	0.30665	0.11047	0.05144
3	0.20762	0.13528	0.07057
4	0.11110	0.13801	0.08330
5	0.05415	0.12530	0.08949
6	0.02592	0.10500	0.08992
7	0.01264	0.08323	0.08587
8	0.00638	0.06351	0.07882
9	0.00336	0.04726	0.07013
10	0.00184	0.03463	0.06087
11	0.00104	0.02516	0.05182
12	0.00062	0.01822	0.04346
13	0.00037	0.01320	0.03603
14	0.00023	0.00960	0.02962
15	0.00015	0.00701	0.02420

Таблица 1: Относительные вклады парциальных слагаемых $\rho_k^{(3+)}(r)/\rho^{(3+)}(r)$, для водородоподобного иона $Z=92$. Жирным шрифтом выделены максимальные значения в колонках. $\lambda_e = \hbar/mc \approx 386\text{фм}$

4 Поляризационные поправки к энергиям

Нами были рассчитаны однопетлевые поправки к энергиям водородоподобных ионов, обусловленные ядром конечных размеров с использованием полученных асимптотик. Заряд ядра выбирался равномерно распределенным по сфере радиуса $R_{rms} = \sqrt{3/5}R_{nuc}$. На рисунке представлена соответствующая диаграмма для поправки к энергии ΔE_{nlj} ,



$$\Delta E_{nlj} = \langle nlj | V^{(3+)} | nlj \rangle. \quad (12)$$

Результаты отображены в таблице 2, где представлены коэффициенты $H_{nlj}^{(3+)}$, связанные с энергией соотношением

$$\Delta E_{nlj} = \frac{\alpha(\alpha Z)^4}{\pi n^3} H_{nlj}^{(3+)} mc^2. \quad (13)$$

Полученные результаты практически совпадают с результатами, полученными в работе [2]. Отличаются лишь некоторые значения в последней (третьей) цифре. Это отличие может быть обусловлено как различием моделей ядра (в [2] использовалось фермиевское распределение заряда), так различием R_{rms} . Как уже отмечалось, в [2] суммирование всех парциальных слагаемых потенциала не было выполнено из-за технических сложностей. Поэтому в [2] вычислялись сначала парциальные вклады в поправки к энергиям, а лишь затем эти вклады суммировались.

В [2] вычислены также поправки к уровням энергий многоэлектронных Li-, Na- и Cu- подобных ионов. При этом к фермиевски-распределенному заряду ядра добавлялась эффективная электронная плотность внутренних оболочек. Можно ожидать, что и в этом случае полученные нами асимптотики могут оказаться полезными.

	Z	92	100	110	120	130	137
	R_{rms}, fm	5.751	5.886	5.950	6.125	6.291	6.402
$1s_{1/2}$	P.N.	0.0224	0.0303	0.0464	0.0803	0.1939	6.157
	F.S.	0.0207	0.0270	0.0386	0.0569	0.0880	0.1231
$2s_{1/2}$	P.N.	0.0298	0.0430	0.0730	0.1435	0.4148	17.15
	F.S.	0.0273	0.0378	0.0589	0.0957	0.1626	0.2391
$2p_{1/2}$	P.N.	0.0072	0.0128	0.0278	0.0704	0.2695	16.61
	F.S.	0.0068	0.0118	0.0245	0.0540	0.1327	0.2696
$3s_{1/2}$	P.N.	0.0295	0.0424	0.0715	0.1387	0.3898	14.78
	F.S.	0.0270	0.0372	0.0575	0.0920	0.1523	0.2174
$3p_{1/2}$	P.N.	0.0082	0.0144	0.0307	0.0754	0.2735	14.43
	F.S.	0.0077	0.0133	0.0268	0.0570	0.1303	0.2394
$4s_{1/2}$	P.N.	0.0288	0.0411	0.0684	0.1305	0.3553	12.48
	F.S.	0.0263	0.0360	0.0550	0.0866	0.1399	0.1951
$4p_{1/2}$	P.N.	0.0083	0.0144	0.0304	0.0729	0.2542	12.21
	F.S.	0.0079	0.0133	0.0265	0.0549	0.1206	0.2118
$5s_{1/2}$	P.N.	0.0282	0.0400	0.0660	0.1242	0.3308	11.05
	F.S.	0.0257	0.0350	0.0531	0.0826	0.1311	0.1800
$5p_{1/2}$	P.N.	0.0083	0.0143	0.0298	0.0703	0.2385	10.81
	F.S.	0.0078	0.0132	0.0259	0.0528	0.1132	0.1938

Таблица 2: Значения коэффициентов $H_{nlj}^{(3+)}$, определяющих поляризационную поправку ΔE_{nlj} в водородоподобных ионах для ядра конечных размеров (F.S.) и точечного ядра (P.N.)

Список литературы

- [1] A.G. Fainstein, N.L. Manakov and A.A. Nekipelov,
- [2] J. Sapirstein and K.T. Cheng, Phys. Rev. A**68**, 042111 (2003).
- [3] Шабает В.М., УФН **178**, 1220 (2008).
- [4] Н. Л. Манаков, А. А. Некипелов, А. Г. Файнштейн, ЖЭТФ **95**, 1167 (1989). J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. **23**, 559 (1990).