

Санкт-Петербургский Государственный Университет
Физический факультет
Кафедра квантовой механики



**КВАНТОВОЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ ПОПРАВКИ НА
МЕЖЭЛЕКТРОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ
МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНАХ И КВАЗИМОЛЕКУЛАХ**

Бакалаврская работа студента
дневного отделения
Владимировой Анастасии Владимировны

Научный руководитель:
к. ф.- м. н. Глазов Д.А.

Рецензент:
д. ф.- м. н. Ульянов С.В.

Санкт-Петербург
2018

Содержание

1	Введение	2
2	Квазимолекулы	2
3	Корреляционные эффекты	4
3.1	Релятивистское одноэлектронное приближение	4
3.2	Метод двухвременной функции Грина	5
3.3	Однофотонный обмен	6
3.4	Двухфотонный обмен	7
3.5	Брейтовское приближение	10
4	Численный расчет	10
4.1	Двухэлектронные системы	10
4.2	Трехэлектронные системы	11
5	Заключение	13
6	Ссылки	14
7	Приложения	15
7.1	Обозначения	15
7.2	Аналитические преобразования	15
7.3	Расчет матричных элементов оператора взаимодействия	16

1 Введение

В многозарядных ионах на электроны действует очень сильное кулоновское поле ядра, что обуславливает специфические особенности этих систем. С ростом заряда ядра (Z) существенно увеличивается влияние релятивистских и радиационных эффектов на свойства многозарядных ионов, так же параметр αZ ($\alpha = 1/137$ - постоянная тонкой структуры) перестает быть малым, а значит, расчеты по данному параметру для данных систем нельзя провести с помощью теории возмущений. В то же время, с помощью изучения многозарядных тяжелых ионов можно проверить теорию квантовой электродинамики в сильных электрических полях.

В настоящий момент проводится множество экспериментов с такими системами, проведены измерения высокой точности энергий связи и переходов во многозарядных ионах [10] - [12]. Кроме того эксперименты с многозарядными ионами позволяют уточнять значения фундаментальных констант [13].

Подробное изучение спектральных характеристик многозарядных ионов очень важно для исследования целого ряда физических проблем: изучение высокотемпературной плазмы, разработка новых методов диагностики в рентген астрономии и астрофизике, создание оборудования для управляемого термоядерного синтеза и др.

2 Квазимолекулы

Двухъядерная квазимолекула (молекулярный ион) является простейшей неустойчивой системой, состоящей из 2 атомов(ионов), сближающихся и отдаляющихся, в связи с чем электроны в системе имеют переменные волновые функции, зависящие от межъядерного расстояния. Впервые квазимолекулу удалось увидеть как характерное непрерывное (что отличает его от дискретного при обычных столкновениях атомов, так как энергии квантов зависят от расстояния между ядрами непрерывно) рентген излучение (впоследствии названное молекулярное орбитальное излучение) при столкновении тяжелых ионов в 1972 году [9].

Наибольший интерес представляет изучение сверхтяжелых квазимолекул с ядрами $Z\alpha > 1$. При увеличении заряда ядра до критического значения энергия нижних уровней уменьшается, и связанное состояние $1s$ исчезает из-за погружения $E_{1s} < -2/m_e c^2$ в отрицательный континуум Дирака (уровни, находящиеся выше $1s$, расположены на конечном расстоянии от "моря Дирака" и не имеют особенностей при $Z = Z_c$). При наличии вакансий на K -оболочке такой системы возможно рождение позитронов [5].

Описанный выше механизм рождения электрон-позитронных пар не зависит от скорости сталкивающихся частиц. Но сам процесс перехода границы континуума возможен только при сближении ядер до расстояния $R \leq R_c$.

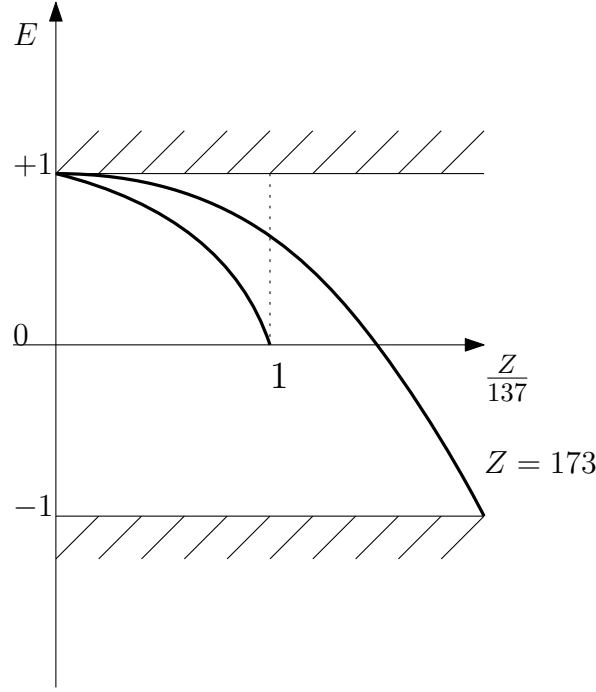


Рис. 1: Погружение энергетических уровней в континуум Дирака

В общем случае на электрон в поле двух ядер действует потенциал вида:

$$V(Z_1, Z_2, \vec{r}) = -\frac{\alpha Z_1}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} - \frac{\alpha Z_2}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} \quad (1)$$

Данный двухцентровой потенциал можно представить в виде мультипольного разложения с полиномами Лежандра:

$$V(Z_1, Z_2, \vec{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n(r) P_n(\cos(\theta)) \quad (2)$$

$$V_n = \frac{2n+1}{2} \int_0^{\pi} d\theta \sin(\theta) V(Z_1, Z_2, \vec{r}) P_n(\cos(\theta)) \quad (3)$$

Очевидно, что задача с точным потенциалом сложна для решения даже численными методами, в связи с чем рационально воспользоваться монопольным приближением и рассмотреть только нулевой сферически симметричный член данного ряда. Его явный вид для сферической модели ядра в системе с началом координат в центре масс ядер:

$$V_{\text{mono}}(r, R) = \begin{cases} -\frac{Z}{2Rr} & \text{if } r \geq R_+ \\ -\frac{Z}{2Rr} \left(r + R_- - \frac{r-R_-}{2R_{\text{nucl}}} (r-R_+) \right) & \text{if } r \in [R_-; R_+] \\ -\frac{Z}{R} & \text{if } r \leq R_- \end{cases} \quad (4)$$

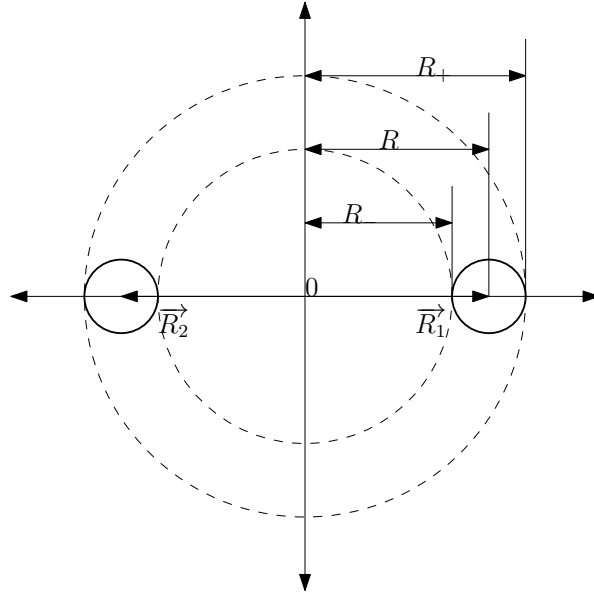


Рис. 2: Монопольный потенциал со сферической моделью ядер

3 Корреляционные эффекты

Рассмотрим квазимолекулу, состоящую из двух ядер урана и двух электронов. В такой системе взаимодействие двух электронов в поле ядер можно рассматривать в рамках релятивистской квантовой электродинамики. Энергия взаимодействия электронов будет определяться поправками на однофотонный, двухфотонный и т. д. обмен. Точные предсказания для уровней энергии таких систем позволят более точно интерпретировать данные о молекулярном орбитальном излучении, содержащем всю информацию о сталкивающейся системе.

3.1 Релятивистское одноэлектронное приближение

В многозарядных ионах число электронов N много меньше заряда ядра Z , поэтому межэлектронное взаимодействие и взаимодействие электрона с квантованным электромагнитным полем будут намного слабее, чем взаимодействие типа "электрон - ядро". Поэтому хорошим нулевым приближением описания многозарядных ионов будет картина Фарри [1]. Для одиночного невырожденного уровня энергии a волновая функция в нулевом приближении - детерминант Слейтера:

$$u_a(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \psi_{P_{a_1}}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{P_{a_N}}(\mathbf{x}_N) \quad (5)$$

$$E_a^{(0)} = \sum_{k_i}^N \varepsilon_{k_i} \quad (6)$$

здесь P оператор перестановки, ψ_n решения стационарного уравнения Дирака в поле ядра:

$$(\beta m - i\alpha \cdot \nabla + V_{\text{nuc}}(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (7)$$

Межэлектронное взаимодействие и КЭД - эффекты можно описать с помощью теории возмущений.

В работе использована релятивистская система единиц: $\hbar = c = m_e = 1$

3.2 Метод двухвременной функции Грина

На данный момент в КЭД - теории существует 3 метода, описывающих корреляционные эффекты: адиабатический метод Гелл-Мана - Лоу [2], метод оператора эволюции на конечном интервале времени [3] и метод двухвременной функции Грина [4], который используется в данной работе.

Перечислим основные положения метода двухвременной функции Грина. Для N -электронного атома или иона функция Грина в представлении Гейзенберга имеет вид:

$$G(x'_1, \dots, x'_N, x_1, \dots, x_N) = \langle 0|T\psi(x'_1)\dots\psi(x'_N)\bar{\psi}(x_N)\dots\bar{\psi}(x_1)|0\rangle \quad (8)$$

Редуцируем ее до двухвременной функции Грина и введем для нее преобразование Фурье:

$$\tilde{G}(t', t) \equiv G(t'_1 = t'_2 = \dots = t'_N \equiv t', t_1 = t_2 = \dots = t_N \equiv t) \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(E; \mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N; \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\delta(E - E') &= \frac{1}{2\pi i N!} \int_{-\infty}^{\infty} dx^0 dx'^0 \exp iE' x'^0 - iE x^0 \\ &\times \langle 0|T\psi(x'^0, \mathbf{x}'_1)\dots\psi(x'^0, \mathbf{x}'_N)\bar{\psi}(x^0, \mathbf{x}_N)\dots\bar{\psi}(x^0, \mathbf{x}_1)|0\rangle \end{aligned} \quad (10)$$

Выражение (6) определяет \mathcal{G} как вещественную функцию, можно показать, что при аналитическом продолжении в комплексную плоскость и после некоторых преобразований она будет иметь вид:

$$\mathcal{G}(E) = \int_{E_{min}^{(+)}}^{\infty} dE' \frac{A(E')}{E - E'} - (-1)^N \int_{E_{min}^{(-)}}^{\infty} dE' \frac{B(E')}{E + E'} \quad (11)$$

здесь $E_{min}^{(+)}$ — минимальная энергия состояния с суммарным зарядом eN , $E_{min}^{(-)}$ - с зарядом $-eN$; A и B — некоторые регулярные функции. Тогда связным состояниям системы из N электронов соответствуют изолированные полюса $\mathcal{G}(E)$, расположенные на положительной вещественной полуоси комплексной плоскости. Здесь подразумевается, что разрезы от всех связных состояний, включая основное, направлены вниз, а для отделения разрезов, соответствующих рассматриваемым состояниям введена ненулевая масса фотона μ . Конечные выражения теории возмущений будут регулярны при $\mu \rightarrow 0$, а значит, для них можно положить $\mu = 0$.

Далее введем $g_{aa}(E) = \langle u_a | \mathcal{G}(E) \gamma_1^0 \dots \gamma_N^0 | u_a \rangle$, её спектральное разложение имеет вид:

$$g_{aa}(E) = \frac{A_a}{E - E_a} + \text{terms that are regular at } E \sim E_a \quad (12)$$

$$A_a = \frac{1}{N!} \int d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N d\mathbf{x}'_1 \dots d\mathbf{x}'_N \mathbf{u}_a^\dagger(\mathbf{x}'_1, \dots, \mathbf{x}'_N) \langle 0 | \psi(0, \mathbf{x}'_1) \dots \psi(0, \mathbf{x}'_N) | a \rangle \\ \times \langle a | \psi^\dagger(0, \mathbf{x}_1) \dots \psi^\dagger(0, \mathbf{x}_N) | 0 \rangle u_a(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (13)$$

В нулевом приближении для нее справедливо тождество:

$$g_{aa}^{(0)} = \frac{1}{E - E_a^{(0)}}; \quad \Delta g_{aa} = g_{aa} - g_{aa}^{(0)} \quad (14)$$

Тогда, если выбрать контур интегрирования так, чтобы он обходил только 1 уровень энергии дискретного спектра (против часовой стрелки), сдвиг энергии можно записать в следующем виде:

$$\Delta E_a = \frac{\frac{1}{2\pi i} \oint_{E_a^{(0)}} dE (E - E_a^{(0)}) \Delta g_{aa}(E)}{1 + \frac{1}{2\pi i} \oint_{E_a^{(0)}} dE \Delta g_{aa}(E)} \quad (15)$$

Далее можно вычислять функцию Грина по теории возмущений с малым параметром — постоянной тонкой структуры α : $\Delta g_{aa}(E) = g_{aa}^{(1)}(E) + g_{aa}^{(2)}(E) + \dots$, тогда для сдвига энергии уровня a получим:

$$\Delta E_a(E) = E_a^{(1)}(E) + E_a^{(2)}(E) + \dots; \quad \Delta E \equiv E - E_a^{(0)} \quad (16)$$

$$E_a^{(1)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{E_a^{(0)}} dE \Delta E \Delta g_{aa}^{(1)}(E) \quad (17)$$

$$\Delta E_a^{(2)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{E_a^{(0)}} dE \Delta E \Delta g_{aa}^{(2)}(E) - \left(\frac{1}{2\pi i} \oint_{E_a^{(0)}} dE \Delta E \Delta g_{aa}^{(1)}(E) \right) \left(\frac{1}{2\pi i} \oint_{E_a^{(0)}} dE \Delta g_{aa}^{(1)}(E) \right) \quad (18)$$

3.3 Однофотонный обмен

Рассмотрим поправку к энергии для одиночного невырожденного уровня $E_n^{(0)}$ для двухэлектронного атома, соответствующая диаграмма имеет вид:

В соответствии с правилами диаграммной техники Фейнмана для $\Delta g_{nn}^{(1)}$ получим:

$$\Delta g_{nn}^{(1)} = \left(\frac{i}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 dp_1'^0 \sum_P (-1)^P \frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} \frac{1}{E - p_1'^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \\ \times \frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \langle P_a P_b | I(p_1'^0 - p_1^0) | ab \rangle \quad (19)$$

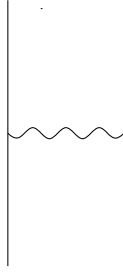


Рис. 3: Диаграмма однофотонного обмена

Тогда $\Delta E_n^{(1)}$ будет иметь вид:

$$\Delta E_n^{(1)} = \frac{1}{2\pi i} \oint dE \Delta E \left(\frac{i}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 dp_1'^0 \sum_P (-1)^P \frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} \frac{1}{E - p_1'^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \\ \times \frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \langle P_a P_b | I(p_1'^0 - p_1^0) | ab \rangle \quad (20)$$

После некоторых преобразований (Приложение 1) получим простую формулу:

$$\Delta E_n^{(1)} = \sum_P (-1)^{(P)} \langle P_a P_b | I(\varepsilon_{P_a} - \varepsilon_a) | ab \rangle \quad (21)$$

3.4 Двухфотонный обмен

Получим выражение для поправок второго порядка на взаимодействие электронов для основного состояния. Им соответствуют следующие диаграммы:

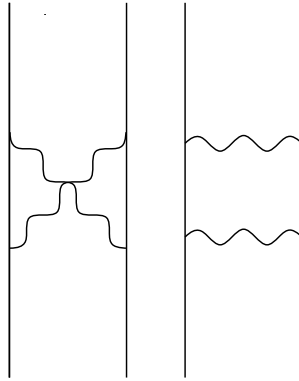


Рис. 4: Диаграммы двухфотонного обмена: перекрестная и лестничная

Рассмотрим вклад лестничной диаграммы в первое слагаемое формулы (18), разделим его на 2 части: $\Delta E_{lad}^{(2)} = \Delta E_{lad}^{(2)irred} + \Delta E_{lad}^{(2)red}$, где индекс *red* обозначает

вклад от приводимых диаграмм ($\varepsilon_{n_1} + \varepsilon_{n_2} = \varepsilon_a + \varepsilon_b$), *irred* - неприводимых ($\varepsilon_{n_1} + \varepsilon_{n_2} \neq \varepsilon_a + \varepsilon_b$). Далее, используя правила Фейнмана для функции Грина и тождества аналогичные (35),(36) (Приложение 1), получим для неприводимой части:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint dE \Delta E \Delta g_{11}^{(2)\text{irred}}(E) &= \frac{1}{2\pi i} \oint dE \frac{1}{\Delta E} \sum_P (-1)^P \left(\frac{i}{2\pi}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 dp_1'^0 d\omega \\ &\times \sum'_{n_1, n_2} \langle PaPb | I(p_1'^0 - \omega) | n_1 n_2 \rangle \langle n_1 n_2 | I(\omega - p_1^0) | ab \rangle \times \left(\frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} + \frac{1}{E - p_1'^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \right) \\ &\times \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon_{n_1}(1 - i0)} \frac{1}{E - \omega - \varepsilon_{n_2}(1 - i0)} \right) \left(\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_a + i0} + \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_b + i0} \right) \quad (22) \end{aligned}$$

Интегрируем по импульсам, используя равенства (39), затем берем внешний интеграл. Учитывая, что под ним функция регулярная по E внутри выбранного контура, окончательно получим:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{lad}}^{(2)\text{irred}} &= \sum_P (-1)^P \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum'_{n_1, n_2} \langle PaPb | I(\varepsilon_{P_a} - \omega) | n_1 n_2 \rangle \\ &\times \langle n_1 n_2 | I(\omega - \varepsilon_a) | ab \rangle \frac{1}{\omega - \varepsilon_{n_1}(1 - i0)} \frac{1}{E_1^{(0)} - \omega - \varepsilon_{n_2}(1 - i0)} \quad (23) \end{aligned}$$

Для неприводимого вклада получим:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint dE \Delta E \Delta g_{11}^{(2)\text{red}}(E) &= \frac{1}{2\pi i} \oint dE \frac{1}{(\Delta E)^2} \sum_P (-1)^P \left(\frac{i}{2\pi}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 dp_1'^0 d\omega \\ &\times \sum'_{n_1, n_2} \langle PaPb | I(p_1'^0 - \omega) | n_1 n_2 \rangle \langle n_1 n_2 | I(\omega - p_1^0) | ab \rangle \times \left(\frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} + \frac{1}{E - p_1'^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \right) \\ &\times \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon_{n_1} + i0} + \frac{1}{E - \omega - \varepsilon_{n_2} + i0} \right) \left(\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_a + i0} + \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_b + i0} \right) \quad (24) \end{aligned}$$

Учитывая, что $\varepsilon_a = \varepsilon_b$ и под интегралом по энергиям у нас стоит регулярная функция в области, ограниченной контуром, получим:

$$\frac{1}{2\pi i} \oint dE \Delta E \Delta g_{11}^{(2)\text{red}}(E) = -\frac{i}{2\pi} \sum_P (-1)^P \sum'_{n_1, n_2} \int_{-\infty}^{\infty} dp_1'^0 \langle PaPb | I(p_1'^0 - \varepsilon_a) | n_1 n_2 \rangle$$

$$\begin{aligned}
& \times \langle n_1 n_2 | I(0) | ab \rangle \times \left(\frac{1}{(\varepsilon_a - p_1^0 + i0)^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 \langle PaPb | I(0) | n_1 n_2 \rangle \right. \\
& \quad \times \langle n_1 n_2 | I(\varepsilon_a - p_1^0) | ab \rangle \times \frac{1}{(\varepsilon_a - p_1^0 + i0)^2} \\
& \left. + \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle PaPb | I(\varepsilon_a - \omega) | n_1 n_2 \rangle \langle n_1 n_2 | I(\omega - \varepsilon_a) | ab \rangle \frac{1}{(\varepsilon_a - \omega + i0)^2} \right) \quad (25)
\end{aligned}$$

Далее можно показать, что интегралы по переменным $dp_1^0 dp_1^{0'}$ в последнем выражении сократятся, если учесть второе слагаемое в формуле (18), тогда для неприводимого вклада получим:

$$\begin{aligned}
\Delta E_{\text{lad}}^{(2)\text{red}} &= \frac{1}{2\pi i} \oint dE \Delta E \Delta g_{11}^{(2)\text{red}}(E) - \frac{1}{2\pi i} \oint dE \Delta E \Delta g_{11}^{(1)}(E) \times \frac{1}{2\pi i} \oint dE \Delta g_{11}^{(1)}(E) \\
&= - \sum_P (-1)^P \sum_{n_1, n_2} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle PaPb | I(\omega - \varepsilon_a) | n_1 n_2 \rangle \langle n_1 n_2 | I(\omega - \varepsilon_a) | ab \rangle \frac{1}{(\omega - \varepsilon_a + i0)^2} \quad (26)
\end{aligned}$$

Теперь рассмотрим вклад от перекрестной (обозначение cr) диаграммы. Проводя аналогичные вышеописанным преобразования, получим:

$$\begin{aligned}
g_{11}^{(2)\text{cr}}(E) &= \frac{1}{\Delta E^2} \sum_P (-1)^P \left(\frac{i}{2\pi} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 dp_1^{0'} d\omega \sum_{n_1, n_2} \langle Pan_2 | I(p_1^0 - \omega) | n_1 b \rangle \langle n_1 Pb | I(\omega - p_1^0) | an_2 \rangle \\
& \quad \times \left(\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} + \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \right) \\
& \quad \times \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon_{n_1}(1 - i0)} \frac{1}{E - \omega - \varepsilon_{n_2}(1 - i0)} \right) \left(\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_a + i0} + \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_b + i0} \right) \quad (27)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta E_{\text{cr}}^{(2)} &= \sum_P (-1)^P \sum_{n_1, n_2} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle Pan_2 | I(\omega - \varepsilon_a) | n_1 b \rangle \langle n_1 Pb | I(\omega - \varepsilon_a) | an_2 \rangle \\
& \quad \times \frac{1}{(\omega - \varepsilon_{n_1}(1 - i0))} \frac{1}{(\omega - \varepsilon_{n_2}(1 - i0))} \quad (28)
\end{aligned}$$

Слагаемые вклада от $\Delta E_{\text{lad}}^{(2)\text{red}}$, содержащие инфракрасные расходимости, сокращаются составляющими ряда (28) с $\varepsilon_{n_1} = \varepsilon_{n_2} = \varepsilon_a$, подробнее в [6]. Вывод всех вышеописанных формул в рамках различных методов, а также численные расчёты были выполнены в работах [14] - [17].

3.5 Брейтовское приближение

В общем случае в двухкомпонентной записи оператор взаимодействия электронов в поле ядра имеет следующий вид:

$$\hat{V} = \hat{V}_C + \hat{V}_t \quad (29)$$

Здесь $\hat{V}_C = e^2/r_{12}$ — Кулоновское взаимодействие электронов (обмен скалярным фотоном), \hat{V}_t — Брейтовское взаимодействие электронов (обмен поперечным фотоном), явный вид которого в общем случае получить невозможно [7],[8]. В нерелятивистском пределе для атомных электронов $(\varepsilon_a - \varepsilon_b) \sim m(\alpha Z)^2$ можем воспользоваться Брейтовским приближением и вместо \hat{V}_{Bt} рассмотреть оператор Брейта:

$$\hat{V}_B = -\frac{e^2}{2} \left[\frac{\alpha_1 \alpha_2}{r_{12}} + \frac{(\alpha_1 \mathbf{r}_{12})(\alpha_2 \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^3} \right] \quad (30)$$

Чтобы перейти к приближению Брейта, рассмотрим оператор $I(\omega)$ при $\omega = 0$, тогда интеграл по этой переменной можно взять по теореме Коши. Для одно- и двух- фотонного обмена соответственно получим:

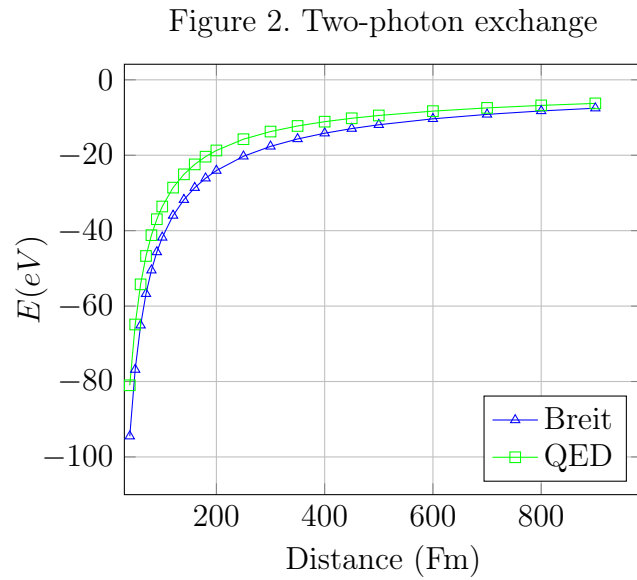
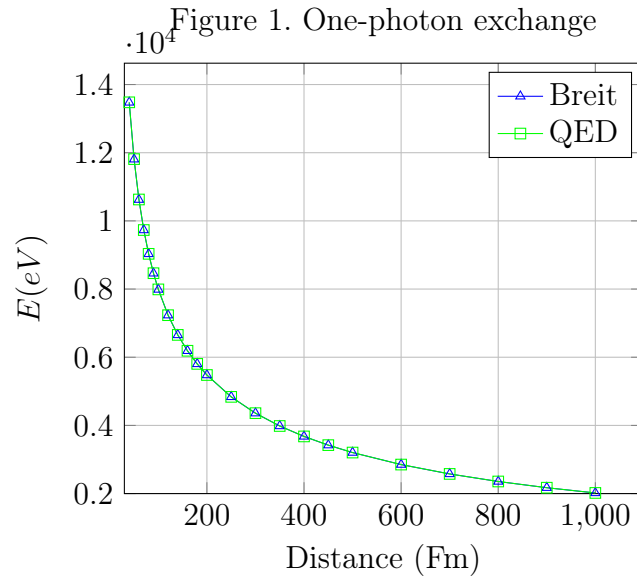
$$\Delta E^{1\text{ph}} = \langle ab|I(0)|ab\rangle - \langle ba|I(0)|ab\rangle \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{Breit}}^{2\text{ph}} &= \sum_{n_1, n_2} (\langle ab|I(0)|n_1 n_2\rangle - \langle ba|I(0)|n_1 n_2\rangle) \\ &\quad \times \frac{\langle n_1 n_2|I(0)|ab\rangle}{\varepsilon_a + \varepsilon_b - \varepsilon_{n_1} - \varepsilon_{n_2}} \end{aligned} \quad (32)$$

4 Численный расчет

4.1 Двухэлектронные системы

С помощью программ, разработанных ранее для одноцентровых систем, были выполнены расчёты для квазимолекулы, состоящей из двух ядер урана и двух электронов. Ниже на графиках представлены результаты для монополярного приближения со сферической моделью ядер для однофотонного и двухфотонного обмена в приближении Брейта и в рамках КЭД теории. Как видно из графиков для $\Delta E_{1\text{ph}}$ данные полученные с помощью приближения почти совпадают с точными расчетами, для $\Delta E_{2\text{ph}}$ отклонение составляет порядка 20%: для $40fm$ абсолютное отклонение превышает $13 eV$.



4.2 Трёхэлектронные системы

Для более полного описания возможных процессов при столкновениях тяжёлых ионов необходимы высокоточные теоретические предсказания энергий не только основного, но и возбуждённых состояний. В данной работе были получены поправки на однофотонный обмен для состояний $(1s)^22s$, $(1s)^22p_{1/2}$ и $(1s)^22p_{3/2}$ литиеподобных (трёхэлектронных) систем. Данные приведены в таблице 2, рисунок 3. Расчёты для возбуждённых состояний двухэлектронных систем будут выполнены в рамках дальнейшей работы.

Таблица 1: $\Delta E_{1\text{ph}}$ и $\Delta E_{2\text{ph}}$ для основного состояния квазимолекулы урана

Dist (fm)	$\Delta E_{1\text{ph}}\text{Breit}$ (eV)	$\Delta E_{2\text{ph}}\text{Breit}$ (eV)	$\Delta E_{1\text{ph}}\text{QED}$ (eV)	$\Delta E_{2\text{ph}}\text{QED}$ (eV)
40	13475,6442	-94,5031	13478,3462	-80,9975
50	11807,3192	-76,8365	11812,7101	-64,8783
60	10623,4329	-65,0836	10627,5961	-54,2327
70	9731,6636	-56,7260	9731,6001	-46,7124
80	9031,2269	-50,4934	9033,3406	-41,1921
90	8461,9253	-45,6616	8465,2360	-36,9580
100	7986,7721	-41,7912	7989,9984	-33,5920
120	7232,8880	-35,9791	7233,7811	-28,5851
140	6653,3170	-31,7913	6655,1160	-25,0604
160	6188,2831	-28,6101	6189,8570	-22,4230
180	5803,4338	-26,1003	5805,0277	-20,3742
200	5477,4089	-24,0616	5478,6889	-18,7304
250	4836,7836	-20,2776	4837,6451	-15,7449
300	4358,4290	-17,6439	4359,6146	-13,7213
350	3982,4693	-15,6841	3982,8839	-12,2379
400	3676,3456	-14,1580	3676,8581	-11,0993
450	3420,7010	-12,9293	3421,6866	-10,1966
500	3203,2288	-11,9177	3203,6675	-9,4523
600	2850,7846	-10,3400	2851,2611	-8,3012
700	2575,9544	-9,1642	2576,4365	-7,4453
800	2354,5962	-8,2520	2354,9649	-6,7785
900	2171,9752	-7,5241	2172,2584	-6,2471
1000	2018,3252	-6,9295	2018,6511	-5,8104

Figure 3. One-photon exchange

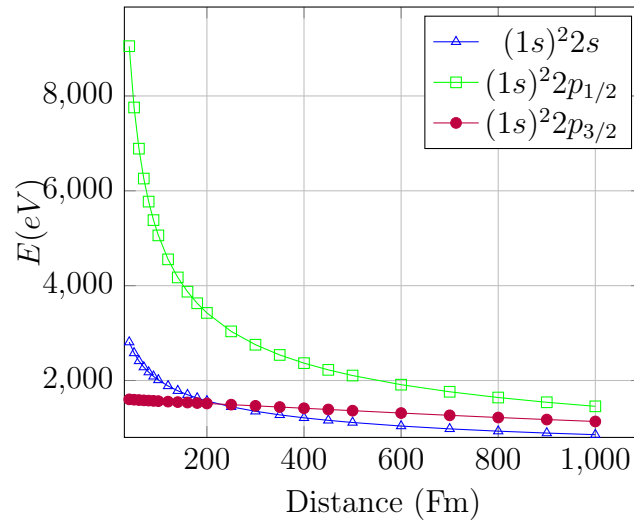


Таблица 2: ΔE_{1ph} для возбужденных состояний гомоядерной двухэлектронной квазимолекулы урана в монопольном приближении

Dist (fm)	$\Delta E_{(1s)^2 2s}$ (eV)	$\Delta E_{(1s)^2 2p_{1/2}}$ (eV)	$\Delta E_{(1s)^2 2p_{3/2}}$ (eV)
40	2809,3755	9049,7258	1602,4559
50	2579,8736	7757,0911	1594,8391
60	2412,2570	6888,2251	1588,0679
70	2282,5382	6258,5110	1581,9081
80	2176,8258	5772,4828	1576,1322
90	2087,9380	5382,3879	1570,6211
100	2011,4208	5060,0331	1565,2920
120	1885,2037	4554,6107	1555,0043
140	1784,2040	4173,3966	1545,0145
160	1700,6038	3873,0120	1535,1676
180	1629,7167	3628,7368	1525,3740
200	1568,5380	3425,1950	1515,5884
250	1445,4990	3035,9357	1490,9467
300	1351,1726	2754,5247	1465,9256
350	1275,6115	2538,7990	1440,5777
400	1213,0959	2366,3803	1415,0199
450	1160,1980	2224,3760	1389,4285
500	1114,6698	2104,6648	1363,9651
600	1039,7667	1912,1348	1313,9198
700	980,3866	1762,4507	1265,7399
800	931,9494	1641,4639	1219,9130
900	891,6921	1540,9532	1176,6921
1000	857,7421	1455,6453	1136,1460

5 Заключение

В данной работе в рамках строгого КЭД формализма и в приближении Брейта были рассмотрены поправки на межэлектронное взаимодействие первого и второго порядков теории возмущений для основного состояния гомоядерной двухэлектронной квазимолекулы урана в монопольном приближении для различных межъядерных расстояний. Показано, что учёт квантовоэлектродинамических эффектов очень важен для рассматриваемых систем.

6 Ссылки

Список литературы

- [1] W. H. Furry, Phys. Rev. **81**, 115 (1951).
- [2] M. Gell-Mann and F. Low, Phys. Rev. **84**, 350 (1951)
- [3] С. А. Запрягаев, Н. Л. Манаков, В. Г. Пальчиков, Теория многозарядных ионов с одним и двумя электронами, Энергоатомиздат, Москва, 1985
- [4] V. M. Shabaev, Phys. Rep. **356**, 119 (2002).
- [5] Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, УФН. **403**, 105 (1971)
- [6] V. M. Shabaev, I. G. Fokeeva, Phys. Rev. A **49** (1994) 4489
- [7] Л. Н. Лабзовский, Квантовая электродинамика электронных оболочек и процессов излучения (1996)
- [8] В.Ю. Лазур, С. И. Мигалина, А. К. Рейтий, К квантово - электродинамической проблеме двух электронов, Теоретическая математика и физика, 158 (2009)
- [9] F. w. Saris, W. F. Van Der Weg, H. Tawara, R. Laubert, Phys. Rev. Lett. **28**, 717 (1972)
- [10] J. Schweppe, A. Belkacem, L. Blumenfeld, Nelson Claytor, B. Feinberg, Harvey Gould, V. E. Kostroun, L. Levy, S. Misawa, J. R. Mowat, M. H. Prior, Phys. Rev. Lett. **66**, 1434 (1991)
- [11] P. Beiersdorfer, A. L. Osterheld, S. R. Elliott, Phys. Rev. A **58**, 1944 (1998)
- [12] Ph. Bosselmann, U. Staude, D. Horn, K.H. Schartner, F. Folkmann, A. E. Livingston, P. H. Mokler, Phys. Rev. A **59**, 1874 (1999)
- [13] D. DeMille, S. Sainis, J. Sage, T. Bergeman, S. Kotochigova, E. Tiesinga Phys. Rev. Lett. **100**, 043202 (2008)
- [14] P. J. Mohr and J. Sapirstein, Phys. Rev. A **62**, 052501 (2000)
- [15] V. A. Yerokhin, A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, M. M. Sysak, O. M. Zherebtsov, and G. Soff, Phys. Rev. A **64**, 032109 (2001).
- [16] O. Yu. Andreev, L. N. Labzowsky, G. Plunien, and G. Soff, Phys. Rev. A **64**, 042513 (2001)
- [17] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, M. M. Sysak, V. A. Yerokhin, T. Beier, G. Plunien, and G. Soff, Phys. Rev. A **67**, 062506 (2003)

[18] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, V. A. Yerokhin, G. Plunien, and G. Soff, Phys. Rev. A **71**, 062104 (2005).

7 Приложения

7.1 Обозначения

Введем следующие обозначения:

$$I(\omega) = e^2 \alpha^\rho \alpha^\sigma D_{\rho\sigma}(\omega) \quad (33)$$

Здесь $\alpha^\rho = \gamma^0 \gamma^\rho$ — Матрицы Дирака, $D_{\rho\sigma}(\omega)$ - фотонный пропагатор, в силу симметрии которого справедливы тождества:

$$I(\omega) = I(-\omega), \quad \frac{dI(\omega)}{d\omega} = -\frac{dI(-\omega)}{d\omega} \quad (34)$$

7.2 Аналитические преобразования

Разложим дроби в формуле (20) на простейшие:

$$\frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} \frac{1}{E - p_1'^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} = \frac{1}{\Delta E} \left(\frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} + \frac{1}{E - p_1'^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \right) \quad (35)$$

$$\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_a + i0} \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_b + i0} = \frac{1}{\Delta E} \left(\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_a + i0} + \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_b + i0} \right) \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= \frac{1}{2\pi i} \oint dE \frac{1}{\Delta E} \left(\frac{i}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 dp_1'^0 \sum_P (-1)^P \left(\frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} + \frac{1}{E - p_1'^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \right) \\ &\quad \times \left(\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} + \frac{1}{E - p_1^0 - \varepsilon_{P_b} + i0} \right) \langle P_a P_b | I(p_1'^0 - p_1^0) | ab \rangle \end{aligned} \quad (37)$$

Под внешним интегралом стоит функция регулярная по E в пределах рассматриваемого контура, значит, можем рассчитать его по вычету в точке $E = E_n^{(0)}$:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= \left(\frac{i}{2\pi} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dp_1^0 dp_1'^0 \sum_P (-1)^P \left(\frac{1}{p_1'^0 - \varepsilon_{P_a} + i0} + \frac{1}{-p_1'^0 + \varepsilon_{P_b} + i0} \right) \\ &\quad \times \left(\frac{1}{p_1^0 - \varepsilon_a + i0} + \frac{1}{-p_1^0 + \varepsilon_b + i0} \right) \langle P_a P_b | I(p_1'^0 - p_1^0) | ab \rangle \end{aligned} \quad (38)$$

Далее, воспользовавшись формулой Сохоцкого — Плёмеля, получим:

$$\frac{i}{2\pi} \left(\frac{1}{x + i0} + \frac{1}{-x + i0} \right) = \delta(x) \quad (39)$$

$$\Delta E_n^{(1)} = \sum_P (-1)^{(P)} \langle P_a P_b | I(\varepsilon_{P_a} - \varepsilon_a) | ab \rangle \quad (40)$$

7.3 Расчет матричных элементов оператора взаимодействия

В калибровке Фейнмана оператор взаимодействия имеет вид:

$$I_F(\omega) = \alpha \frac{1 - \alpha_1 \cdot \alpha_2}{r_{12}} \exp(i|\omega|r_{12}) \quad (41)$$

Разложим его по сферическим гармоникам:

$$\frac{1}{r_{12}} \exp(i\omega r_{12}) = 4\pi \sum_{lm} \frac{1}{2l+1} g_l(\omega, r_1, r_2) Y_{lm}^*(\vec{n}_2) Y_{lm}(\vec{n}_1), \quad (42)$$

Здесь g_l выражается через сферические функции Бесселя (j_l) и Ханкеля (h_l):

$$g_l(\omega, r_1, r_2) = i\omega(2l+1)j_l(\omega r_{<})h_l^{(1)}(\omega r_{>}) \quad (43)$$

$$g_l(0, r_1, r_2) = \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}}. \quad (44)$$

Тогда матричный элемент $\langle ab|I|cd\rangle$, где a, b, c, d - произвольные энергетические состояния электрона примет вид:

$$\begin{aligned} \langle ab|\frac{1}{r_{12}}|cd\rangle &= \sum_{l,m} (-1)^{j_a - M_a} \begin{pmatrix} j_a & l & j_c \\ -M_a & -m & M_c \end{pmatrix} (-1)^{j_b - M_b} \begin{pmatrix} j_b & l & j_d \\ -M_b & -m & M_d \end{pmatrix} (-1)^{2l-m} \\ &\times G_l(\kappa_a, \kappa_c) G_l(\kappa_b, \kappa_d) \int_0^\infty dr_1 dr_2 \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \\ &\times (G_a(r_1)G_c(r_1) + F_a(r_1)F_c(r_1))(G_b(r_2)G_d(r_2) + F_b(r_2)F_d(r_2)) \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \langle ab|-\frac{\alpha_1 \cdot \alpha_2}{r_{12}}|cd\rangle &= \sum_{x,\xi} \sum_{l,m} (-1)^{j_a - M_a} \begin{pmatrix} j_a & x & j_c \\ -M_a & -\xi & M_c \end{pmatrix} (-1)^{j_b - M_b} \begin{pmatrix} j_b & x & j_d \\ -M_b & -\xi & M_d \end{pmatrix} \\ &\times (-1)^{l+1} (2x+1) \int_0^\infty dr_1 dr_2 \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \\ &\times (G_a(r_1)F_c(r_1)H_l^x(\kappa_a, -\kappa_c) - F_a(r_1)G_c(r_1)H_l^x(-\kappa_a, \kappa_c)) \\ &\times (G_b(r_2)F_d(r_2)H_l^x(\kappa_b, -\kappa_d) - F_b(r_2)G_d(r_2)H_l^x(-\kappa_b, \kappa_d)) \end{aligned} \quad (46)$$

Где $G(r) = rg(r)$, $F(r) = rf(r)$, $f(r), g(r)$ - радиальные составляющие решения уравнения Дирака для свободного электрона, и введены обозначения:

$$G_l(\kappa_a, \kappa_b) = \sqrt{(2j_a+1)(2j_b+1)(2l_a+1)(2l_b+1)} \begin{pmatrix} l_a & l & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} j_a & l & j_b \\ l_b & 1/2 & l_a \end{matrix} \right\} (-1)^{j_b+1/2} \quad (47)$$

$$H_l^x(\kappa_a, \kappa_b) = \sqrt{6(2j_a + 1)(2j_b + 1)(2l_a + 1)(2l_b + 1)} \begin{pmatrix} l_a & l & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_a & 1/2 & l_a \\ x & 1 & l \\ j_b & 1/2 & l_b \end{Bmatrix} (-1)^{l_a} \quad (48)$$