

УЧЕТ ПОЛЯРИЗАЦИИ ВАКУУМА В СПЕКТРАХ ТЯЖЕЛЫХ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ ИОНОВ

М. Н. Дриккер, Е. П. Иванова и Л. Н. Иванов

1. Известно, что поляризацию вакуума в атомных спектрах с точностью до членов, пропорциональных α , можно учесть модификацией потенциала ядра. Дополнительный (к кулонову) потенциал имеет вид [1]

$$U = -\frac{2\alpha}{3\pi} \frac{1}{r} \int_1^{\infty} e^{-2rt/\alpha z} \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{t^2} dt. \quad (1)$$

В (1), кроме α , входит еще один параметр αz , где Z — заряд ядра. Мы пользуемся кулоновыми единицами (к. е.). Для энергии 1 к. е. $\approx 219\,476 Z^2 \text{ см}^{-1}$. Поляризационный потенциал (1) называют потенциалом Ойленга. Обычно поляризационный вклад в энергию Π представляют в виде разложения в ряд по αZ . В [2] получены несколько членов этого разложения для состояния $1s^{1/2}$. Первый член имеет порядок $\alpha (\alpha Z)^4$, последний учтенный в [2] член имеет порядок $\alpha (\alpha Z)^7$. При $Z \approx 100$ все эти члены имеют один и тот же порядок и в значительной мере компенсируют друг друга. В [3] по формуле из [2] рассчитан сдвиг Π для состояний $1s^{1/2}$ при $Z=1 \div 100$. Для состояний $ns^{1/2}$, $n > 1$ предлагается приближенная формула

$$\Pi (ns^{1/2}) \approx \Pi (1s^{1/2})/n^3. \quad (2)$$

В [4] сообщается о расчете $\Pi (ns^{1/2})$ как матричного элемента $\langle ns^{1/2} | U | ns^{1/2} \rangle$, $n=1, 2$. Однако результаты расчета Π в [4] не приведены.

Здесь мы поступили несколько иначе. Потенциал U был включен наряду с кулоновым потенциалом в одноэлектронное релятивистское уравнение Дирака. Затем была решена задача на собственные значения с потенциалом

$$V(r) = -(1/r) + \bar{U}(r). \quad (3)$$

Из уравнения Дирака находятся как энергетические сдвиги, так и поправки к функции состояния. При этом учитываются все релятивистские эффекты, кроме поправки Лэмба. Метод удобен при решении многоэлектронной задачи, поскольку включение потенциала U в многоэлектронное релятивистское уравнение не приводит к усложнению вычислительной процедуры. Это связано со специальным приемом, примененном при расчете $U(r)$.

2. Описанию технических деталей расчета предположим исследование асимптотического поведения потенциала $U(r)$. Подынтегральное выражение в (1) можно разложить в ряд по $1/t$ ($t > 1$)

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) \frac{\sqrt{t^2 - 1}}{t^2} &= \frac{1}{t} \frac{3}{2\Gamma(-1/2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n - 3/2)(n-1)}{n! t^{2n}} = \\ &= \frac{1}{t} \left(1 - \frac{3}{8t^4} - \frac{1}{8t^6} - \frac{9}{128t^8} - \dots\right). \end{aligned} \quad (4)$$

Ряд (4) мажорируется числовым рядом $1/n^{1.5}$ и, следовательно, сходится абсолютно и равномерно. Такой ряд можно почленно интегрировать

$$U(r) = -\frac{\alpha}{\pi\Gamma(-1/2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n - 3/2)(n-1)}{n!} \varphi_n(r)/r^2, \quad (5)$$

$$\varphi_n(r) = r^{2n+1} \int_r^{\infty} dt e^{-2t/\alpha z} \frac{1}{t^{2n+1}}. \quad (5')$$

Для исследования асимптотического разложения $\varphi_n(r)$ при $r \rightarrow 0$ воспользуемся формулой интегрирования по частям

$$\int v_1(t) v_2(t) dt = v_2(t) \int v_1(t) dt - \int dt v_2'(t) \int dt v_1(t) dt, \quad (6)$$

$$v_1(t) = 1/t^{2n+1}, \quad v_2(t) = e^{-2t/\alpha Z}. \quad (7)$$

Последовательное применение формул (6), (7) дает полное разложение. Оказалось, что при $r \rightarrow 0$ ведущий член асимптотики связан с $\varphi_0(r)$

$$U(r) \rightarrow \varphi_0(r) \sim \ln r e^{-2r/\alpha Z} \text{ при } r \rightarrow 0. \quad (8)$$

Это совпадает с асимптотикой, приведенной в [5]. Для нахождения асимптотики при $r \rightarrow \infty$ воспользуемся формулой интегрирования по частям (6), полагая теперь

$$v_1 = e^{-2t/\alpha Z}, \quad v_2 = 1/t^{2n+1}. \quad (7')$$

Все члены разложения (5) имеют одно и то же асимптотическое поведение при $r \rightarrow \infty$

$$r^2 \varphi_n(r) \rightarrow \frac{3}{2\Gamma(-1/2)} \frac{\Gamma(n-3/2)(n-1)}{n!} \frac{\tilde{\alpha}}{2} \frac{1}{r^2} e^{-2r/\alpha Z} \text{ при } t \rightarrow \infty. \quad (9)$$

В силу равномерной сходимости ряда (4), то же асимптотическое поведение имеет и полный ряд

$$U(r) \sim e^{-2r/\alpha Z} \frac{1}{r^2}. \quad (10)$$

В [5] получен другой результат

$$U(r) \sim e^{-2r/\alpha Z} \frac{1}{r^{3/2}}. \quad (11)$$

Мы исследовали причину расхождения результатов. В [5] при вычислении асимптотики применен прием, эквивалентный следующей процедуре. Разложим подынтегральное выражение в (1) в ряд в окрестности точки $t=1$

$$\begin{aligned} & \int_1^{\infty} e^{-2rt/\alpha Z} \left(1 + \frac{1}{2t^2}\right) \frac{\sqrt{t^2-1}}{t^2} dt = \\ & = e^{-2r/\alpha Z} \int_0^{\infty} dt \sqrt{t} \left(\frac{3\sqrt{2}}{2} + a_1 t + a_2 t + \dots\right) e^{-2rt/\alpha Z}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$a_m = (-1)^m \sum_{p=0}^m \frac{\Gamma(p+3/2)}{\Gamma(3/2) p!}, \quad m > 0.$$

Проинтегрировав первый член в (12), получим асимптотику $U(r)$ в виде (11). Однако легко видеть, что ряд (12) расходится при $t > 1$, и его нельзя почленно интегрировать.

3. Переходим к описанию вычислительной процедуры. Любая из функций φ_n в разложении (5) удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\varphi_n' = [(2n+1)\varphi_n/r] + e^{-2t/\alpha Z} \quad (13)$$

с граничными условиями

$$\varphi_0(r_0) = -r_0 \ln(2r_0/\alpha Z) - Cr_0, \quad \varphi_n(r_0) = r_0/2n \text{ при } n > 0, \quad (14)$$

$C \approx 0.577215$, r_0 — начальная точка интегрирования.

Дифференциальные уравнения (13) можно объединить в одну систему с дифференциальными уравнениями Дирака для функции состояния. В эту же систему удобно включить дифференциальное уравнение для экспоненты $l^{-2t/\alpha Z}$ в (13), что приводит к заметному сокращению машинного времени. Удерживая в (5) конечное число членов φ_n , сводим задачу к решению конечной системы обыкновенных дифференциальных уравне-

Таблица 1

Поляризационный энергетический сдвиг ΠS для ns -состояний водородоподобных ионов (см^{-1})

Z	$-\Pi (1s^{1/2})$	$-\Pi (2s^{1/2})$	$-\Pi (3s^{1/2})$	$-\Pi (1s^{1/2}) [^\circ]$
10	66	8.2	2.4	68
20	1021	130	38.6	1051
30	5140	666	198	5249
40	16530	2197	653	16500
50	4204	5785	1720	50400
60	93070	13380	3975	81940
70	189180	28670	8518	147800
80	366070	59080	17545	240500
90	694000	120850	35810	357400
100	1328200	252850	74750	485600

ний с определенными граничными условиями. Отбор нужного решения уравнения Дирака проводится по числу узлов большой компоненты радиальной функции. Отметим серьезную вычислительную трудность, встречающуюся на этом пути. Общее решение уравнения (13) представляется в виде

$$\varphi_n(r) + r^{2n+1}. \quad (15)$$

Нас интересует решение с $N=0$. Для того чтобы отобрать такое решение, граничные условия для $\varphi_n(r)$ нужно задавать с точностью до членов $\sim r^{2n+1}$. Более удобным оказался другой путь. Потенциал Ойленга мы представили в виде

$$U(r) = -\left[\frac{2\alpha}{3\pi} \varphi_0(r)/r^2\right] + Ae^{-Br} (1 + Dr^2 + \dots). \quad (16)$$

Первый член в (16) совпадает с первым членом в разложении (5). Второй член в (16) аппроксимирует остаточную часть суммы (5). Коэффициенты $A, B, D \dots$ в (16) выбираются так, чтобы разложения в ряд по r для остаточной части суммы совпало бы с истинным при $r \rightarrow 0$. Последовательное уточнение разложения (16) не приводит к заметному усложнению процедуры. Окончательно был принят следующий вид поляризационного потенциала:

$$U(r) = -[0.00154854\varphi_0/r^2] + 0.00021705e^{-2.540935r/\alpha Z} [1 + 0.338706(r/\alpha Z)^2]. \quad (17)$$

Таблица 2

Поляризационный энергетический сдвиг Π для np -состояний водородоподобных ионов (см^{-1})

Z	$-\Pi (2p^{1/2})$	$-\Pi (2p^{3/2})$	$-\Pi (3p^{1/2})$	$-\Pi (3p^{3/2})$
10	0.4	0	0	0
20	1.0	0	0.5	0.3
30	10	2	4	1
40	55	9	20	3
50	231	28	82	10
60	800	78	282	29
70	2480	190	866	69
80	7070	400	2463	154
90	19490	820	6750	320
100	54150	1550	18580	610

Результаты расчета поляризационной поправки приведены в табл. 1,2. Отметим значительное расхождение наших результатов и результатов

из [3] для состояния $1s^{1/2}$ при $Z > 50$. Это связано с отмеченной выше компенсацией при больших Z отдельных членов (αZ) -разложения, использованного в [3].

Литература

- [1] E. A. Uehling. Phys. Rev., 48, 55, 1935.
 [2] P. J. Mohr. Phys. Rev. Lett., 34, 16, 1050, 1975.
 [3] У. И. Сафронова, А. Ф. Шестаков. Препринт ИСАН СССР, № 7, 1976.
 [4] G. Hose, U. Kalbder. J. Phys. B, 12, № 23, 1979.
 [5] Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Релятивистская квантовая теория, ч. 2. ГИФМЛ, М., 1971.

Поступило в Редакцию 5 июня 1980 г.

УДК 535.56 : 548.0

ОПТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ, ОБУСЛОВЛЕННАЯ ДИСПЕРСИЕЙ ЭКСИТОНОВ

Ю. Г. Пашкевич и А. Д. Петренко

Известная теория естественной оптической активности кристаллов [1, 2] основана на выделении линейных по волновому вектору k членов непосредственно из тензора диэлектрической проницаемости, вычисленного в рамках микроскопического подхода. При этом выражение для соответствующего тензора гирации оказывается весьма громоздким и определяется он производными по k от волновых функций и частот экситонов. Тем самым экситонные состояния кристалла предполагаются известными, в то время как их вычисление представляет собой самостоятельную трудоемкую задачу. Поэтому формулы, полученные в [1] являются весьма сложными для применения к расчету конкретных кристаллических структур.

Цель настоящего сообщения состоит в вычислении экситонной части тензора гирации молекулярного кристалла в рамках метода действующего поля, где наиболее эффективно выделяются особенности оптических явлений, связанные с конденсированным состоянием среды [3].

Следуя [3], тензор диэлектрической проницаемости кристалла запишем в виде

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} + \frac{4\pi}{v} \sum_{\alpha j_1} \alpha_{j_1}^{\alpha}(\omega) A_{j_1 j}^{\alpha}(\omega, \mathbf{k}). \quad (1)$$

Здесь $\alpha_{ij}^{\alpha}(\omega)$ — тензор поляризуемости α -й молекулы, v — объем элементарной ячейки, $A_{ij}^{\alpha}(\omega, \mathbf{k})$ — тензор действующего поля, определяемый из системы уравнений

$$A_{ij}^{\alpha}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{ij} - \frac{4\pi}{v} \sum_{j_1 j_2 \beta} Q_{ij_1}^{\alpha \beta}(\mathbf{k}) a_{j_1 j_2}^{\beta}(\omega) A_{j_2 j}^{\beta}(\omega, \mathbf{k}), \quad (2)$$

где $Q_{ij}^{\alpha \beta}(\mathbf{k})$ — коэффициенты внутреннего поля [3].

Тензор гирации $g_{mn}(\omega)$ введем с помощью известных соотношений

$$\varepsilon_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon_{ij}(\omega) + i \sum_n k_n \gamma_{ijn}(\omega), \quad g_{mn}(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{ij} e_{ijm} \gamma_{ijn}(\omega), \quad (3)$$

где e_{ijn} — тензор Леви—Чивита. Тогда из формулы (1) имеем