УДК 539.184

ПОЛЯРИЗАЦИЯ АТОМА В ГЕЛИЕПОДОБНЫХ ИОНАХ

П. Г. Бодашко и *С. А. Запрягаев*

В первом порядке теории возмущений по корреляционному взаимодействию вычислены сдвиги уровней энергии He-подобных ионов конфигурации $1snl$ $(1 \leqslant n \leqslant 6)$. Расчеты проведены в низшем порядке по α.

Введение

Исследование спектральных характеристик многозарядных ионов указывает на важность радиационных поправок типа собственной массы электрона и поляризации вакуума [1], имеющих для S-состояний порядок величины $\alpha(\alpha Z)^4 mc^2$ (α — постоянная тонкой структуры, Z — заряд ядра). Поляризация вакуума в сильном кулоновском поле являлась предметом исследований большого числа работ [2-5]. Как известно, в случае точечного заряда явление поляризации вакуума приводит к возникновению потенциала Юлинга [3] (которому в низшем порядке теории возмущений соответствует матричный элемент, определяемый графиком Фейнмана (рис. 1)), имеющему с учетом низших членов разложения по (αZ) вид

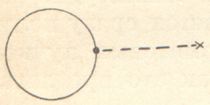

Рис. 1.

$$\varphi(r) = -\frac{e}{r}\frac{\alpha Z}{3\pi}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{\lambda\!\!\!^{-}}(y^2+1)^{1/2}}\frac{y^2(3+2y^2)}{(y^2+1)^{5/2}}\,dy, \tag{1}$$

где $\lambda\!\!\!^{-}=\hbar/mc$. В результате поправка к уровням энергии N-электронного атома за счет поляризации вакуума определяется в низшем порядке теории возмущений выражением

$$\Delta E_k = \left\langle \Psi_k \left| \sum_{i=1}^{N} e\varphi(r_i) \right| \Psi_k \right\rangle, \tag{2}$$

где Ψ_k — точная N-электронная волновая функция состояния k. Учитывая, что выражение (1) определяет потенциал Юлинга в низшем порядке по αZ, при использовании формулы (2) волновые функции должны быть вычислены в нерелятивистском приближении. Используя теорию возмущений, запишем Ψ_k в первом порядке по межэлектронному взаимодействию W в виде

$$\Psi_k \simeq \Phi_k - GW\Phi_k, \tag{3}$$

где G — N-электронная функция Грина уравнения Шредингера, а Φ_k — электронная волновая функция в приближении невзаимодействующих электронов. Нерелятивистский анализ радиационных поправок к основному состоянию He-подобного атома выполнен в работе [6].

Общие формулы

Подставляя (3) в (2), в случае двухэлектронного атома (конфигурация $n_1l_1n_2l_2$) для сдвига уровня находим

$$\Delta E_{\mathrm{He}} = \Delta E_{\mathrm{H}}(n_1l_1) + \Delta E_{\mathrm{H}}(n_2l_2) - 2\Delta\varepsilon_{\text{корр}}, \tag{4}$$

где $\Delta E_{\text{H}}(nl)$ — сдвиг уровня nl за счет поляризации вакуума в атоме водорода $\Delta E_{\text{H}}(nl) = \langle nl\,|\,e\varphi\,|\,n,\ l\rangle$, а $\Delta\varepsilon_{\text{корр}}$ определяется матричными элементами

$$\Delta\varepsilon_{\text{корр}} = \sum_{k\neq n_1} \frac{1}{\mathrm{E}_k - \mathrm{E}_{n_1}} \left[\langle n_1|V|k\rangle\langle kn_2|W|n_1n_2\rangle \pm \langle n_1|V|k\rangle\langle kn_2|W|n_2n_1\rangle\right] + \sum_{k\neq n_2} \frac{1}{\mathrm{E}_k - \mathrm{E}_{n_2}} \left[\langle n_2|V|k\rangle\langle kn_1|W|n_2n_1\rangle \pm \langle n_2|V|k\rangle\langle kn_1|W|n_1n_2\rangle\right], \qquad (5)$$

где $V = e\varphi$, $W = e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, E_n — уровни энергии водородоподобного атома; верхний знак относится к синглетным, а нижний — к триплетным термам. Ма-

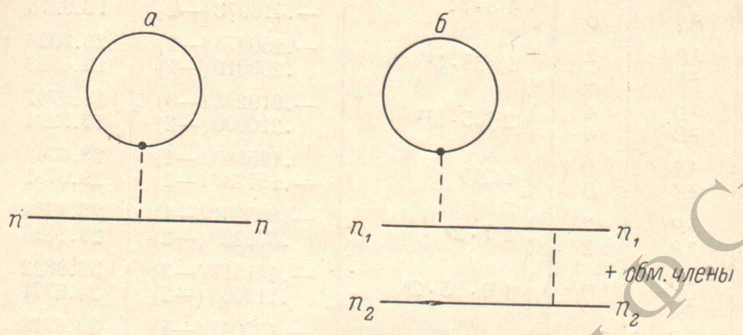

Рис. 2.

тричным элементам $\Delta E_{\text{H}}(nl)$ и $\Delta\varepsilon_{\text{корр}}$ соответствуют диаграммы Фейнмана (рис. 2, *а*, соответственно).

Непосредственное вычисление $\Delta E_{\text{H}}(nl)$ приводит к следующему результату:

$$\Delta E_{\text{H}}(nl) = -\frac{\alpha}{2\pi}\left(\frac{2\alpha Z}{n}\right)^{4+2l} \frac{(n+l)!\,l!\,(l+2)!\,(l+2)}{(2l+1)!\,(2l+5)!\,(n-l-1)!}\,mc^2. \qquad (6)$$

В частных случаях значения орбитального момента выражение (6) упрощается например,

$$\Delta E_{\text{H}}(ns) = -\frac{4}{15}\frac{\alpha}{\pi}(\alpha Z)^4 \frac{1}{n^3}\,mc^2,$$

$$\Delta E_{\text{H}}(np) = -\frac{2}{105}\frac{\alpha}{\pi}(\alpha Z)^6 \frac{n^2-1}{n^5}\,mc^2,$$

$$\Delta E_{\text{H}}(nd) = -\frac{2}{2835}\frac{\alpha}{\pi}(\alpha Z)^8 \frac{(n^2-4)(n^2-1)}{n^7}\,mc^2.$$

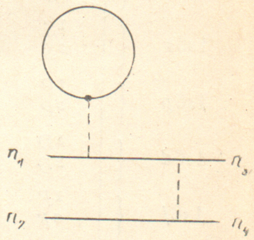

Рис. 3.

При больших значениях n $\Delta E_{\text{H}}(nl) \sim n^{-3}$.

Для вычисления $\Delta\varepsilon_{\text{корр}}$ введем в рассмотрение вспомогательный матричный элемент $\Lambda_L(n_1l_1,\ n_2l_2;\ n_3l_3,\ n_4l_4)$, которому соответствует график Фейнмана рис. 3. По определению имеем

$$\Lambda_L(n_1l_1,\ n_2l_2;\ n_3l_3,\ n_4l_4) = \sum_{m\neq n_1} \frac{1}{\varepsilon_m - \varepsilon_{n_1}} \langle n_1|V|k\rangle\langle kn_2|W|n_1n_2\rangle = \sum_k \Phi_k(n_1l_1,\ n_2l_2;\ n_3l_3,\ n_4l_4)\, S_k^L(l_1m_1,\ l_2m_2;\ l_3m_3,\ l_4m_4), \qquad (7)$$

где $\Phi_k(n_1l_1,\ n_2l_2;\ n_3l_3,\ n_4l_4)$ — радиальный интеграл

$$\Phi_k = \left\langle R_{n_1l_1}(1)\, V(1)\, g_{l_1}^{\varepsilon_{n_1}}(1,\ 2)\, R_{n_2l_2}(3)\, \frac{e^2 r_<^k}{r_>^{k+1}}\, R_{n_3l_3}(2)\, R_{n_4l_4}(3)\right\rangle, \qquad (8)$$

R_{nl} — водородные волновые функции состояния nl, $g_l^{\varepsilon_n}$ — редуцированная кулоновская функция Грина уравнения Шредингера [7], а S_k^L — угловой коэффициент

$$S_k^L = \sum_{\substack{m_1m_2\\ m_3m_4q}} C^{LM}_{l_1m_1l_2m_2} C^{LM}_{l_3m_3l_4m_4} \frac{4\pi}{2k+1} \langle Y_{l_1m_1}|Y_{kq}|Y_{l_3m_3}\rangle \langle Y_{l_2m_2}|Y^*_{kq}|Y_{l_4m_4}\rangle.$$

Сдвиги уровней энергии для атома He (формула (9))

Конфигурация	Терм	$2l$	ΔE_{nl}	Δ_{1s}	Δ_{nl}	$-\Delta E_{\text{He}} \cdot 10^6$
$(1s)^2$	^1S	0	4/15	1.235278	1.235278	.701562
$1s2s$	^1S	0	$1/30$	.144786	7.93539	.587496
	^3S	0		—.188488 (—1)	8.35582	.646114
$1s2p$	^1P	2	$1/35 \cdot 16$	—.218452 (—1)	8.80230	1.06695
	^3P	2		.859509 (—1)	6.36290	1.01006
$1s3s$	^1S	0	$4/5 \cdot 81$	.401199 (—1)	13.2277	.814238
	^3S	0		—.416073 (—2)	13.9276	.824498
$1s3p$	^1P	2	$16/35 \cdot 3^6$	—.150978 (—2)	23.7026	1.05621
	^3P	2		.209016 (—1)	12.4368	1.04439
$1s3d$	^1D	4	$2^6/35 \cdot 3^{11}$	—.919283 (—3)	18.6787	1.05591
	^3D	4		.216090 (—2)	17.9294	1.05428
$1s4s$	^1S	0	$1/240$	.165563 (—1)	28.6348	.827069
	^3S	0		—.157237 (—2)	29.9731	.825601
$1s4p$	^1P	2	$1/7 \cdot 2^9$	—.805261 (—4)	28.4759	1.05550
	^3P	2		.830228 (—2)	26.8488	1.05104
$1s4d$	^1D	4	$1/9 \cdot 35 \cdot 2^9$	—.441517 (—3)	38.6822	1.05566
	^3D	4		.113033 (—2)	24.6771	1.05448
$1s4f$	^1F	6	$1/693 \cdot 2^{15}$	—.120047 (—4)	32.6918	1.05543
	^3F	6		.247985 (—4)	32.3866	1.05541
$1s5s$	^1S	0	$4/3 \cdot 5^4$	.839256 (—2)	41.3391	.884917
	^3S	0		—.763847 (—3)	42.1229	.886440
$1s5p$	^1P	2	$16/7 \cdot 5^6$	.784268 (—4)	50.2021	1.05538
	^3P	2		.413944 (—2)	42.3428	1.05324
$1s5d$	^1D	4	$64/9 \cdot 5^9$	—.233789 (—3)	46.6672	1.05554
	^3D	4		.624060 (—3)	45.9286	1.05509
$1s5f$	^1F	6	$2^5/693 \cdot 5^{10}$	—.933305 (—5)	457.806	1.05543
	^3F	6		.198006 (—4)	333.500	1.05541
$1s5g$	^1G	8	$2^9/39 \cdot 77 \cdot 5^{13}$	—.869852 (—7)	50.7440	1.05542
	^3G	8		.166436 (—6)	50.5652	1.05542
$1s6s$	^1S	0	$1/10 \cdot 3^4$	.482919 (—2)	65.0120	.898930
	^3S	0		—.430980 (—3)	66.8415	.897236
$1s6p$	^1P	2	$1/16 \cdot 3^6$	.809789 (—4)	64.4182	1.05538
	^3P	2		.236165 (—2)	62.9681	1.05418
$1s6d$	^1D	4	$2/5 \cdot 3^{12}$	—.137145 (—3)	14.5137	1.05549
	^3D	4		.374429 (—3)	12.5628	1.05522
$1s6f$	^1F	6	$1/8 \cdot 77 \cdot 3^{10}$	—.643673 (—5)	8.58746	1.05543
	^3F	6		.138307 (—4)	8.54814	1.05542
$1s6g$	^1G	8	$1/308 \cdot 13 \cdot 3^{13}$	—.895868 (—7)	79.8827	1.05542
	^3G	8		.180970 (—6)	62.8082	1.05542
$1s6h$	^1H	10	$1/143 \cdot 160 \cdot 3^{17}$	—.850236 (—10)	77.5304	1.05542
	^3H	10		.106255 (—8)	67.9113	1.05542

Здесь $C^{LM}_{lml'm'}$ — коэффициенты Клебша—Гордана, Y_{lm} — сферические функции. Используя стандартные методы алгебры угловых моментов [8], после суммирования по магнитным квантовым числам находим

$$S^L_k = \sqrt{(2l_3+1)(2l_4+1)}\,(-1)^{L+l_2+l_3}\,C^{l_1 0}_{l_3 0 k 0}\,C^{l_2 0}_{l_4 0 k 0} \begin{Bmatrix} k & l_1 & l_3 \\ L & l_4 & l_2 \end{Bmatrix},$$

где $\begin{Bmatrix} k & l_1 & l_3 \\ L & l_4 & l_2 \end{Bmatrix}$ — $6j$-символ Вигнера.

В результате сдвиг уровня конфигурации неэквивалентных электронов $n_1 l_1$, $n_2 l_2$ определяется выражением

$$\Delta E_{\mathrm{He}} = \Delta E_{\mathrm{H}}(n_1 l_1) + \Delta E_{\mathrm{H}}(n_2 l_2) - 2[\Lambda_L(n_1 l_1, n_2 l_2; n_1 l_1, n_2 l_2) \pm \Lambda_L(n_1 l_1, n_2 l_2; n_2 l_2 n_1 l_1) + \Lambda_L(n_2 l_2, n_1 l_1; n_2 l_2, n_1 l_1) \pm \Lambda_L(n_2 l_2, n_1 l_1; n_1 l_1, n_2 l_2)].$$

Соответственно в случае эквивалентных электронов $(nl)^2$ имеем

$$\Delta E_{\mathrm{He}} = 2[\Delta E_{\mathrm{H}}(nl) - \Lambda_L(nl, nl; nl, nl)].$$

Вычисление радиальных интегралов проводится в аналитическом виде и приводит к быстросходящимся рядам гипергеометрического типа, которые легко могут быть рассчитаны на ЭВМ.

Результаты вычислений

В работе проведены вычисления ΔE_{He} для конфигурации $1snl$ $(1 \leqslant n \leqslant 6)$. Для удобства использования найденных результатов применительно к ионам с произвольным значением Z запишем сдвиг в следующем виде:

$$\Delta E_{\mathrm{He}} = -\frac{2\alpha^3 Z^4}{\pi}\left[\Delta\varepsilon_{1s}\left(1 - \frac{\Delta_{1s}}{Z}\right) + (\alpha Z)^{2l}\Delta\varepsilon_{nl}\left(1 - \frac{\Delta_{nl}}{Z}\right)\right] Ry, \quad (9)$$

в котором выделена вся зависимость от значения заряда ядра Z. Значения коэффициентов $\Delta\varepsilon_{1s}$, $\Delta\varepsilon_{nl}$, Δ_{1s}, Δ_{nl}, а также ΔE_{nl} в атоме He $(Z=2)$ приведены в таблице.

Литература

[1] R. Murrus. Beam—Foil Spectroscopy, 209. Ed. by S. Bashkin. 1976.
[2] R. Serber. Phys. Rev., *48*, 49, 1935; E. A. Vehling. Phys. Rev., *48*, 55, 1935.
[3] E. H. Wichman, N. M. Kroll. Phys. Rev., *101*, 843, 1956.
[4] L. S. Brown, R. N. Cohn, L. D. Melerren. Phys. Rev., *D12*, 581, 1975.
[5] Я. И. Грановский. ЖЭТФ, *70*, 2035, 1976.
[6] P. K. Kabir, E. E. Salpeter. Phys. Rev., *108*, 1256, 1957.
[7] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков. Теория многофотонных процессов в атомах. Атомиздат, М., 1978.
[8] Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. Квантовая теория углового момента. Наука, Л., 1975.

Поступило в Редакцию 19 июня 1981 г.