Итоговый отчет по гранту No 18-32-00294
«Квантовоэлектродинамические расчеты поправок на отдачу ядра к уровням энергии многозарядных ионов»
Руководитель: Малышев Алексей Владимирович

Реферат

Разработана квантовоэлектродинамическая теория эффекта отдачи ядра для уровней энергии за рамками приближения независимых электронов. Развитый полностью релятивистский формализм позволяет выполнять непертурбативные по alpha*Z расчеты поправки на межэлектронное взаимодействие первого порядка по 1/Z к эффекту отдачи для энергий связи и энергий переходов в атомах и ионах. С применением разработанных методов проведены расчеты эффекта отдачи ядра для 1s^2 состояния в гелиеподобных ионах и состояний 1s^2 2s и 1s^2 2p_{1/2} в литиеподобных ионах в широком диапазоне значений заряда ядра Z=5-100. Рассмотрен также массовый сдвиг энергии перехода 2p_{1/2}-2s в литиеподобных ионах. Для всех состояний выделен нетривиальный КЭД вклад и проанализировано его поведение с ростом Z. Корреляционные эффекты второго и более высоких порядков рассчитаны в рамках брейтовского приближения. В результате получены наиболее точные теоретические предсказания для массового сдвига энергий связи и энергий переходов в гелие- и литиеподобных ионах. Полученные результаты дополняют необходимую теоретическую базу для анализа новых высокоточных экспериментов. Сравнение теоретических предсказаний и экспериментальных данных предоставит возможность для тестирования непертурбативных методов квантовой электродинамики связанных состояний. Выполненные прецизионные расчеты массового сдвига могут быть использованы для определения ядерных параметров в измерениях изотопических сдвигов.

Введение

Интерес к многозарядным ионам вызван прежде всего тем, что на отдельные электроны в данных системах действует очень сильное электрическое поле. В отличие от легких атомов, в многозарядных ионах параметр alpha*Z (alpha - постоянная тонкой структуры, Z - заряд ядра) не является малым. Таким образом, все расчеты в многозарядных ионах следует выполнять непертурбативно по данному параметру. С другой стороны, относительно небольшое количество электронов в подобных системах позволяет достаточно точно учитывать корреляционные эффекты. Таким образом, многозарядные ионы предоставляют уникальную возможность для тестирования новых непертурбативных по alpha*Z методов расчета связанных состояний на основе квантовой электродинамики (КЭД).

Высокоточные расчеты уровней энергии многозарядных ионов должны включать вклады за рамками приближения внешнего поля, согласно которому ядро рассматривается как неподвижный источник электрического поля. В первую очередь, это означает, что должны быть приняты во внимание эффекты, связанные с отдачей ядра. Помимо

непосредственного вклада данных эффектов в лэмбовский сдвиг уровней энергий многозарядных ионов, они играет важную роль также для изотопических сдвигов. Изотопические сдвиги возникают из комбинации эффектов, связанных с конечным размером и конечной массой ядер, что приводит к полевому и массовому сдвигам, соответственно. Прецизионные измерения изотопического сдвига в литиеподобном неодиме [Brandau et al., Phys. Rev. Lett. 100, 073201 (2008)] позволили определить разницу среднеквадратичных радиусов для двух изотопов. В рамках международного проекта FAIR [Facility for Antiproton and Ion Research, URL: http://www.fair-center.eu/], который в данный момент реализуется в Дармштадте в Германии при участии России, запланированы эксперименты по измерению изотопических сдвигов между тяжелыми радиоактивными изотопами. Для ионов в области малых и средних Z массовый сдвиг доминирует над полевым. Современные прецизионные эксперименты по измерению изотопических сдвигов в многозарядных ионах в области средних Z имеют точность на уровне релятивистских вкладов в эффект отдачи ядра. Высокоточное измерение изотопического сдвига в бороподобном аргоне, выполненное в работе [Orts et al., Phys. Rev. Lett. 97, 103002 (2006)], явило собой первый тест релятивистской теории эффекта отдачи ядра в многозарядных ионах. В ближайшее время следует ожидать дальнейшего увеличения точности измерения уровней энергии и изотопических сдвигов в новых экспериментах, планируемых в MPIK в Гейдельберге. Поскольку данные эксперименты главным образом имеют в качестве своего объекта ионы, у которых число электронов N не является значительно меньшим, чем заряд ядра Z (например, для бороподобного аргона Z=18 и N=5), то наряду с учетом вкладов в КЭД эффект отдачи ядра существенным является также учет влияния межэлектронного взаимодействия на эти эффекты. В связи со всем вышесказанным, строгое рассмотрение КЭД эффектов отдачи для уровней энергии многозарядных ионов за рамками приближения независимых электронов, на которое нацелен данный исследовательский проект, представляет собой актуальную и востребованную задачу.

Основная часть отчета о НИР

Квантовоэлектродинамическая теория эффекта отдачи ядра для уровней энергии в атомах и ионах в первом порядке по отношению масс электрона и ядра m/M и во всех порядках по alpha*Z (alpha - постоянная тонкой структуры, Z - заряд ядра) была сформулирована в работах [Шабаев, Теор. Мат. Физ 63, 394 (1985); Шабаев, Яд. Физ. 47, 107 (1988)], см. также [Pachucki and Grotch, Phys. Rev. A 51, 1854 (1995); Adkins, Phys. Rev. A 76, 042508 (2007)]. Однако, все предыдущие расчеты нетривиального КЭД вклада в эффект отдачи ядра были ограничены приближением независимых электронов, то есть нулевым порядком по 1/Z. Вклады более высокого порядка по 1/Z учитывались в низшем релятивистском приближении при помощи эффективного оператора массового сдвига H_M. Данный проект посвящен развитию КЭД теории эффекта отдачи ядра за рамками приближения независимых электронов, что является востребованной задачей ввиду все возрастающей точности экспериментов по измерению уровней энергии и изотопических сдвигов в многозарядных ионах.

Эффект отдачи для уровней энергии может быть учтен путем включения дополнительного члена в стандартный гамильтониан электрон-позитронного поля,

взаимодействующего с квантованным электромагнитным полем и классическим кулоновским полем ядра [Shabaev, Phys. Rev. A 57, 59 (1998)]. Данная процедура приводит к появлению новых вершин и линий в диаграммной технике. В приближении независимых электронов эффект отдачи описывается суммой одноэлектронной и двухэлектронной диаграмм. Одноэлектронная диаграмма по своей структуре сходна с диаграммой собственной энергии. Двухэлектронная диаграмма похожа на диаграмму однофотонного обмена. В первом порядке по 1/Z необходимо дополнить эти диаграммы одним фотонным пропагатором, переносящим взаимодействие между электронами. При этом возникают диаграммы аналогичные диаграммам экранированной собственной энергии и двухфотонного обмена, которые никогда не рассматривались ранее в рамках строгого КЭД подхода. В ходе работы над проектом нами был разработан КЭД формализм для расчета вклада этих диаграмм без разложения по alpha*Z. Формальные выражения КЭД теории возмущений были получены методом двухвременной функции Грина [Shabaev, Phys. Rep. 356, 119 (2002)]. Как известно, одноэлектронная (нормальный массовый сдвиг) и двухэлектронная (специфический массовый сдвиг) части оператора массового сдвига H_M могут быть получены из соответствующих КЭД диаграмм нулевого порядка по 1/Z при переходе к брейтовскому приближению. Нами было показано, что в низшем релятивистском приближении полученные нами строгие КЭД выражения сводятся к поправке первого порядка на межэлектронное взаимодействие к оператору H_M.

На основе выведенных формальных выражений для поправки первого порядка по 1/Z к эффекту отдачи нами были подготовлены численные процедуры. Эти процедуры были применены к расчетам соответствующего вклада в энергии основного состояния 1s^2 гелиеподобных ионов, а также состояний 1s^2 2s и 1s^2 2p_{1/2} в литиеподобных ионах в широком диапазоне значений Z=5-100. Мы выполнили сравнение полученных результатов с результатами расчетов в низшем релятивистском приближении на основе оператора H_M и проанализировали поведение нетривиального КЭД вклада с ростом Z. Было обнаружено, что расчеты с применением оператора массового сдвига приводят к недооценке эффекта отдачи при увеличении Z.

КЭД расчеты эффекта отдачи до первого порядка по 1/Z были дополнены вкладами старших порядков, а также поправкой на конечный размер ядра к оператору массового сдвига [Aleksandrov et al., JPB 48, 144044 (2005)]. Вклады второго и более высоких порядков по 1/Z были рассчитаны в брейтовском приближении двумя методами: рекурсивной теорией возмущений [Glazov et al., NIMB 408, 46 (2017)] и методом конфигурационного взаимодействия [Tupitsyn et al., Phys. Rev. A 68, 022511 (2003)]. Результаты двух независимых подходов находятся в прекрасном согласии друг с другом. В итоге нами были получены самые точные теоретические предсказания для вклада эффекта отдачи ядра в энергии связи в гелие- и литиеподобных ионах. Полученные результаты для состояний 1s^2 2s и 1s^2 2p_{1/2} могут быть использованы также для определения вклада эффекта отдачи ядра в энергию перехода 2p_{1/2}-2s в литиеподобных ионах. Данная величина была исследована ранее, например, в работах [Kozhedub et al., Phys. Rev. A 81, 042513 (2010); Zubova et al., Phys. Rev. A 90, 062512 (2014)]. Методы, использованные в этих работах, совмещали расчеты эффекта отдачи в брейтовском приближении во всех порядках по 1/Z на основе оператора массового сдвига и КЭД вклады, рассчитанные в приближении независимых электронов. Результаты были представлены в терминах коэффициента K массового сдвига, определенного согласно

формуле: E_rec = K / M. В области средних Z вклад массового сдвига в изотопические сдвиги более важен. Для цинка (Z=30), например, в работе [Zubova et al., Phys. Rev. A 90, 062512 (2014)] было получено K=-0.9533(16) eV*amu. На основе проведенных нами расчетов было найдено, что K=-0.95068(32) eV*amu. Таким образом, теоретическая погрешность была уменьшена.

Кроме того, мы выполнили КЭД расчеты эффекта отдачи ядра до первого порядка по 1/Z для энергии связи основного состояния бороподобных ионов 1s^2 2s^2 2p_{1/2}. Результаты расчетов и сравнение с результатами, полученными в брейтовском приближении на основе оператора H_M, представлены в Таблице 1. Все значения приведены в терминах безразмерной функции F, определенной согласно E_rec = (m/M)*(alpha*Z)^2*F*mc^2. Вклад нулевого порядка по 1/Z обозначен через A, поправка первого порядка - B/Z. Таким образом, F=A+B/Z+..., где многоточие обозначает вклад второго и более высоких порядков по 1/Z. Одноэлектронная и двухэлектронная части эффекта отдачи показаны отдельно. Из Таблицы 1 видно, что нетривиальный КЭД вклад в эффект отдач играет существенную роль.

Таблица 1. Эффект отдачи ядра до первого порядка по 1/Z для энергии связи состояния 1s^2 2s^2 2p_{1/2} в терминах функции F: E_rec = (m/M)*(alpha*Z)^2*F*mc^2, где F=A+B/Z+..., при этом A - вклад нулевого порядка по 1/Z, B/Z - вклад первого порядка по 1/Z. QED - расчет в рамках КЭД, MS - расчет на основе эффективного оператора массового сдвига.

Z	**Method**	**One-electron**		**Two-electron**		**Total**
		A	**B/Z**	**A**	**B/Z**	**A+B/Z**
10	QED	1.37657	-0.23482	-0.07783	0.06052	1.12444
	H_M	1.37549	-0.23464	-0.07783	0.06050	1.12352
50	QED	1.49265	-0.05688	-0.07282	0.01388	1.37683
	H_M	1.38452	-0.05279	-0.07147	0.01322	1.27349
92	QED	2.36078	-0.06632	-0.05793	0.01127	2.24780
	H_M	1.29020	-0.03543	-0.03143	0.00550	1.22884

Подробное описание разработанного метода, а также результаты расчетов представлены в двух статьях:

1) A. V. Malyshev, I. S. Anisimova, D. V. Mironova, V. M. Shabaev, and G. Plunien, "QED theory of the specific mass shift in few-electron atoms", Phys. Rev. A 100, 012510 (2019).

2) A. V. Malyshev, I. S. Anisimova, D. A. Glazov, M. Y. Kaygorodov, D. V. Mironova, G. Plunien, and V. M. Shabaev, "QED theory of the normal mass shift in few-electron atoms", статья представлены в журнал Phys. Rev. A. Препринт статьи доступен по ссылке https://arxiv.org/abs/2003.10858

Заключение

Все полученные результаты соответствуют мировому уровню, а в ряде случаев определяют этот уровень. Полностью релятивистские расчеты поправки на межэлектронное взаимодействие к эффекту отдачи ядра для уровней энергии никогда не предпринимались ранее. Разработанный формализм представляет собой существенное развитие квантовоэлектродинамической теории эффекта отдачи ядра для уровней энергии многозарядных ионов.

Развит ab initio метод для расчета без разложения по параметру alpha*Z вклада эффекта отдачи ядра в уровни энергии многозарядных ионов за рамками приближения независимых электронов. В течение первого года разработан КЭД формализм для учета поправки первого порядка по 1/Z к двухэлектронной части эффекта отдачи ядра. В ходе второго года разработан формализм для учета соответствующего вклада в одноэлектронную часть.

Проведены систематические КЭД расчеты эффекта отдачи ядра до первого порядка по 1/Z для энергий связи основного состояния гелиеподобных ионов, а также состояний 1s^2 2s и 1s^2 2p_{1/2} литиеподобных ионов в широком диапазоне Z=5-100. Обнаружено, что расчеты на основе эффективного оператора массового сдвига, справедливого до порядка m/M*(alpha*Z)^4*mc^2, приводят к недооценке данного эффекта. Строгое КЭД рассмотрение до первого порядка по 1/Z дополнено учетом старших корреляционных вкладов, рассчитанных в низшем релятивистском приближении. Аналогичные расчеты выполнены также для основного состояния бороподобных ионов 1s^2 2s^2 2p_{1/2}.

Получены наиболее точные теоретические предсказания для вклада эффекта отдачи ядра в энергии связи и энергии переходов в гелие- и литиеподобных многозарядных ионах. Результаты позволяют определить величину массового сдвига в изотопические сдвиги уровней энергии в рассмотренных системах. Сравнение полученных данных с результатами высокоточных экспериментов, которые запланированы в ближайшем будущем, с одной стороны позволит протестировать развитые непертурбативные методы квантовой электродинамики за рамками картины Фарри, а с другой стороны даст возможность для извлечения из экспериментальных данных значений параметров ядер.