МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

Роенко Артём Александрович

Магнитные эффекты квантовой электродинамики в системах с критическим и закритическим зарядом

01.04.02 – Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
д. ф.-м. н., профессор
Свешников Константин Алексеевич

Москва – 2019

Оглавление

Введение

Актуальность темы исследования.

Впервые решение уравнения Дирака для электрона в поле протяжённого ядра было получено Померанчуком и Смородинским [1], где было показано, что, в отличие от случая точечного источника гамильтониан системы сохраняет самосопряжённость при $Z > 137$, и для некоторого заряда ядра, названного критическим Z_{cr}, энергия нижнего дискретного уровня достигает порога отрицательного континуума $-mc^2$. Дальнейший анализ, восходящий к пионерским работам Герштейна и Зельдовича [2; 3], а также Пипера и Грайнера [4], показал, что в закритической области $Z > Z_{cr} \simeq 170$, которая может быть достигнута в столкновениях тяжёлых ионов [2; 5; 6], должна происходить непертурбативная перестройка вакуума, сопровождающаяся целым рядом нетривиальных эффектов. В частности, вследствие опускания дискретных уровней в область нижнего континуума $E < -mc^2$ квантовая электродинамика предсказывает рождение вакуумных позитронов, при этом возникает ненулевой вакуумный заряд [6—13]. Однако многолетние эксперименты [14—21] на установках GSI (Дармштадт, Германия) и Аргоннской национальной лаборатории (США) так и не привели к однозначному выводу о статусе закритической области, что придаёт особое значение дальнейшим её исследованиям, особенно посвящённым вопросу о роли непертурбативности в эффектах квантовой электродинамики при $Z > Z_{cr}$. В частности, последние существенно непертурбативные вычисления энергии поляризации вакуума E_{VP} показывают, что в глубоко закритической области её поведение принципиально отличается от результатов теории возмущений, а при определённых условиях E_{VP} даже может конкурировать с классической энергией кулоновского отталкивания источников [22—26]. В связи с этим возникает вопрос о возможности компенсации непертурбативных эффектов за счёт фермионных петель другими КЭД-эффектами, обусловленными в том числе процессами с испусканием виртуальных фотонов.

Взаимодействие аномального магнитного момента электрона с внешним кулоновским полем ΔU_{AMM} является лишь одной из составляющих эффективного взаимодействия, возникающего за счёт собственно-энергетического вклада в полный радиационный сдвиг электронных уровней, однако занимает выделенное положение, так как описывается локальным оператором, который сохраняет все необходимые для картины Фарри свойства одночастичного уравнения Дирака. Кроме того, ΔU_{AMM} допускает детальный непертуртурбативный анализ и сравнение с предсказаниями теории возмущений, из-за чего исследование данного взаимодействия представляет отдельный интерес. Сдвиг электронных уровней в водородоподобном ионе за счёт ΔU_{AMM} исследовался в [27—30] только для потенциала в виде оператора Дирака-Паули

$$\Delta U^{(0)}_{AMM} = \frac{\Delta g_{free}}{2} \frac{e}{4m} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \,, \tag{1}$$

что справедливо лишь в статическом пределе малых значений переданного импульса [31], либо при наличии аномального магнитного момента неэлектромагнитной природы. Взаимодействие аномалии магнитного момента дираковского фермиона с кулоновским полем точечного источника также ранее инстенсивно исследовалось в [32—37] с целью изучения возможности возникновения резонансов в системах типа e^+e^- за счёт возможного возрастания магнитных эффектов на предельно малых расстояниях, характерного для потенциала (1) в случае точечного источника; в работе [38] исследовалось подавление процессов рождения пар e^+e^- за счёт аномального магнитного момента электрона в сильных магнитных полях. Однако, детальное исследование сдвигов уровней, обусловленных эффективным взаимодействием ΔU_{AMM}, когда учитывается полная зависимость электронного формфактора $F_2(q^2)$ от переданного импульса q^2, которая приводит к динамической экранировке аномального магнитного момента электрона [39] и принципиальна для сверхсильных $(Z\alpha > 1)$ кулоновских полей, ранее не проводилось, тем более в закритической области.

В свете планируемых экспериментов [40—43] по столкновению тяжёлых ионов на ускорительных центрах FAIR (Дармштадт, Германия), HIAF (Китай) и NICA (Дубна) является актуальным анализ положения электронных уровней и различных вкладов в их радиационный сдвиг для более близких к эксперименту двухядерных конфигураций кулоновских источников, детальное исследование процессов погружения дискретных электронных уровней в область нижнего континуума, а также вычисление критических расстояний между сталкивающимися ядрами. Об этом также свидетельствует большое количество опубликованных в последнее время работ, посвящённых изучению параметров резонансов, возникающих в системах с $Z > Z_{cr}$ [44—48], влиянию сильного магнитного поля на величину критического заряда ядра [49—53], вычислению характеристик (предполагаемого) испускания вакуумных позитронов при низкоэнергетических столновениях тяжёлых ионов (в т.ч. позитронных спектров, вероятностей ионизации оболочек, критических расстояний и т.д.) [54—63], разработке методов определения сдвигов электронных уровней при больших Z [64—68], расчётам эффектов поляризации вакуума в закритическом случае [22—26; 69; 70], и др. Следует отметить, что до тех пор, пока ядра находятся на большом расстоянии друг от друга, различные КЭД-поправки к энергии электронных уровней хорошо описываются теорией возмущений [71—73], однако по мере их приближения друг к другу происходит переход в закритическую область, когда дискретные уровни начинают погружаться в область нижнего континуума, и вопрос о применимости теории возмущений остаётся открытым. Таким образом, также представляет большой интерес разработка методов решения двухцентрового уравнения Дирака, допускающих непертурбативный учёт дополнительных потенциалов эффективного взаимодействия типа ΔU_{AMM}.

Цели и задачи диссертационной работы:

Основная цель работы заключается в проведении на примере ΔU_{AMM} непертурбативного анализа сдвигов электронных уровней, обусловленных КЭД-процессами с обменом виртуальными фотонами, в системах с критическим и закритическим зарядом источников. При этом данный анализ будет включать в себя сравнение пертурбативных и непертурбативных (как по $Z\alpha$, так и по α/π) подходов, а также рассмотрение одноядерных (водородоподобный ион) и двухядерных (ядерная квазимолекула) систем кулоновских источников.

Для реализации данной программы были поставлены и решены следующие задачи:

- С учётом динамической экранировки аномального магнитного момента (АММ) электрона получить выражение для потенциала эффективного взаимодействия АММ с кулоновским полем протяжённого ядра. Провести сравнение пертурбативных и непертурбативных результатов для сдвигов уровней, обусловленных ΔU_{AMM}.

- Исследовать поведение величины сдвига ряда электронных уровней в водородоподобном ионе в зависимости от заряда ядра Z, а также определить значения сдвигов уровней вблизи границы нижнего континуума.

- Разработать метод решения двухцентрового уравнения Дирака, позволяющий непертурбативным образом учитывать эффективное взаимодействие динамически экранированного аномального момента электрона с кулоновским полем сталкивающихся ядер. Вычислить критические расстояния в системе двух сталкивающихся тяжёлых ядер и исследовать поведение сдвигов электронных уровней за счёт ΔU_{AMM} в зависимости от заряда ядер и расстояния между ними.

Научная новизна.

В диссертации впервые был выполнен подробный анализ взаимодействия динамически экранированного аномального магнитного момента электрона с кулоновским полем сверхтяжёлых ядер, включающий в себя сравнение пертурбативных и непертурбативных методов. При этом выполненный впервые учёт динамической экранировки аномального магнитного момента оказывается принципиальным. Был разработан и реализован оригинальный способ решения двухцентрового уравнения Дирака с использованием мультипольного разложения кулоновского потенциала, сочетающий в себе как аналитические, так и численные методы, позволяющий находить энергию электронных уровней в компактных ядерных квазимолекулах с высокой точностью (не хуже 10^{-6}, при этом в некоторых случаях учитывались мультипольные моменты потенциала вплоть до $l_{max} \sim 100$). Полученные в работе значения R_{cr} для нижнего чётного $1\sigma_g$ и нечётного $1\sigma_u$ уровней, а также зависимости энергии нижних электронных уровней от межъядерного расстояния в компактных ядерных квазимолекулах, существенно уточняют значения, полученные ранее либо в рамках монопольного приближения [74; 75], либо с использованием нескольких первых мультипольных моментов [46]. Кроме того, данная техника допускает также учёт эффективного взаимодействия ΔU_{AMM}, что позволило выполнить оригинальные непертурбативные вычисления сдвигов, обусловленных этим взаимодействием, а также исследовать их зависимость от заряда ядер и межъядерного расстояния в такой системе.

С использованием разработанных методов впервые было исследовано поведение сдвигов электронных уровней, обусловленных ΔU_{AMM}, в одноядерных и двухядерных системах с критическим и закритическим зарядом кулоновских источников. Проведённые оригинальные непертурбативные исследования данного вклада в собственно-энергетический сдвиг уровней ΔE_{SE} позволяют сделать вывод о качественном поведении полного сдвига ΔE_{SE} в закритическом режиме $Z > Z_{cr}$, а тем самым и других радиационных КЭД-эффектов с обменом виртуальными фотонами. И если вне рамок теории возмущений поведение вакуумной энергии, в которой основную роль играет вклад от фермионных петель, ранее исследовалось в закритической области $Z > Z_{cr}$, то анализ радиационных КЭД-процессов с обменом виртуальными фотонами для той же области, пусть и частично, выполнен впервые.

Теоретическая и практическая значимость.

Результаты, изложенные в диссертации, дают заметный вклад в развитие квантовой электродинамики сверхсильных (критических и закритических) кулоновских полей и в понимание поведения радиационных КЭД-эффектов в закритическом режиме $Z > Z_{cr}$. В частности, они позволяют сделать обоснованное предположение о том, что полной компенсации существенно нелинейного поведения энергии вакуума в глубоко закритической области $Z \gg Z_{cr}$ за счёт процессов с испусканием виртуальных фотонов ожидать не следует, а значит, в этой области возможно проявление новых вакуумных эффектов. Кроме того, полученные результаты могут быть использованы при планировании новых экспериментов в физике тяжёлых ионов на строящихся и вводимых в эксплуатацию в ближайшее время ускорительных комплексах FAIR (Дармштадт, Германия), HIAF (Китай) и NICA (Дубна). Разработанный и реализованный оригинальный метод решения двухцентрового уравнения Дирака также может быть использован для исследования процессов погружения дискретных электронных уровней в область нижнего континуума при низкоэнергетических столкновениях тяжёлых ионов и определения критических расстояний между сталкивающимися ионами для более сложных моделей распределения заряда в ядрах.

Положения, выносимые на защиту:

1. Явное аналитическое выражение для потенциала ΔU_{AMM} эффективного взаимодействия динамически экранированного аномального магнитного момента электрона с кулоновским полем протяжённого ядра имеет вид (2.16), где функция $c(r)$ определена в соответствии с (2.31).

2. При наличии динамической экранировки АММ пертурбативный и непертурбативный способы вычисления сдвигов электронных уровней в водородоподобном ионе за счёт ΔU_{AMM} дают практически совпадающие (в пределах $\sim 0.5\%$) результаты.

3. Разработанный метод решения двухцентрового уравнения Дирака, осно-

ванный на использовании разложения электронной волновой функции по сферическим гармоникам, а также мультипольного разложения кулоновского потенциала и дополнительного эффективного взаимодействия ΔU_{AMM}, позволяет вычислять как положение электронных уровней, так и величину их сдвига за счёт ΔU_{AMM} в компактных ядерных квазимолекулах ($d \lesssim 100$ фм) с точностью не хуже 10^{-6}.

4. Критические расстояния R_{cr} в симметричных ядерных квазимолекулах $\mathrm{A}_2^{(2\mathrm{Z}-1)+}$ для электронных уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ в диапазоне $Z \sim 87-100$ имеют значения, представленные в таб. 3.5.

5. Для рассмотренных систем с критическим и закритическим зарядом кулоновских источников сдвиг электронных уровней за счёт ΔU_{AMM} вблизи границы нижнего континуума убывает с увеличением как заряда ядер, так и размеров системы кулоновских источников.

Степень достоверности и обоснованности результатов.

Представленные в диссертации результаты получены с использованием широко применяемых в квантовой теории поля аналитических и численных методов. Окончательные результаты основаны на решении одночастичного уравнения Дирака методом стрельбы, который является эффективным методом численного решения спектральных задач. Уравнение Дирака используется для описания фермионов в различных теориях поля, а справедливость его предсказаний многократно подтверждалась экспериментально. Необходимые расчёты были выполнены на компьютерном кластере кафедры квантовой теории и физики высоких энергий физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова, на всех этапах вычислений выполнялся необходимый контроль точности. Все полученные в диссертации результаты в частных случаях хорошо согласуются с результатами других исследований.

Об обоснованности используемого в данной работе подхода к решению двухцентрового уравнения Дирака с использованием мультипольного разложения потенциала свидетельствует близость результатов вычислений R_{cr} на основе монопольного приближения [74; 75], а также полученных в работе результатов, к результатам, полученным другими методами [11; 54; 58; 76—79].

Апробация результатов.

Основные результаты диссертации были представлены на следующих конференциях:

1. XXV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2018», секция «Физика», МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия, 9-13 апреля 2018 г.;

2. The XXII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2018), Joint Institute for Nuclear Research, Дубна, Россия, 23-27 апреля 2018 г.;

3. VIII Международная школа-конференция молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики - 2018», Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь, 13-15 июня 2018 г.;

4. 19th International Conferences on the Physics of Highly Charged Ions (HCI 2018), FCT NOVA, Лиссабон, Португалия, 3-7 сентября 2018 г.;

5. Молодёжная конференция по теоретической и экспериментальной физике (МКТЭФ-2018), НИЦ «Курчатовский институт» – ИТЭФ, Москва, Россия, 26-29 ноября 2018 г.;

Результаты работы также были доложены 10 мая 2018 года на семинаре Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова Объединённого Института Ядерных Исследований, 18 октября 2018 года на семинаре кафедры квантовой теории и физики высоких энергий физического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова.

Публикации.

Основные результаты диссертации опубликованы в 4 статьях в рецензируемых журналах, индексируемых в базах Scopus, Web of Science и RSCI [80—83]:

1. *Roenko A. A., Sveshnikov K. A.* Perturbativity vs non-perturbativity in QED-effects for H-like atoms with $Z\alpha > 1$ // International Journal of Modern Physics A. – 2017. – Т. 32, № 22. – С. 1750130. – arXiv: 1608.04322. – DOI: 10.1142/S0217751X17501305.

2. *Roenko A. A., Sveshnikov K. A.* Estimating the radiative part of QED effects in superheavy nuclear quasimolecules // Physical Review A. – 2018. – Т. 97., № 1. – С. 012113. – arXiv: 1710.08494. – DOI: 10.1103/PhysRevA.97.012113.

3. *Роенко А. А., Свешников К. А.* Динамическая экранировка АММ и КЭД эффекты для водородоподобных атомов при больших Z // Письма в журнал "Физика элементарных частиц и атомного ядра". – 2018. – Т. 15, № 1. – С. 25-38.

   Roenko A., Sveshnikov K. Dynamical screening of AMM and QED effects for large-Z Hydrogen-like atoms // Physics of Particles and Nuclei Letters. – 2018. – Vol. 15, №. 1. – P. 20-28. – DOI: 10.1134/S1547477118010156.

4. *Роенко А. А., Свешников К. А.* Пертурбативные и непертурбативные аспекты взаимодействия АММ дираковской частицы с кулоновским полем сверхтяжелого ядра // Письма в журнал "Физика элементарных частиц и атомного ядра". – 2018. – Т. 15, № 1. – С. 39-60.

   Roenko A., Sveshnikov K. Interaction of Dirac particle AMM with coulomb field of a superheavy nucleus: perturbative and nonperturbative aspects // Physics of Particles and Nuclei Letters. – 2018. – Vol. 15, №. 1. – P. 29-42. – DOI: 10.1134/S1547477118010168.

а также в тезисах докладов:

1. *Роенко А. А.* Оценка величины радиационных КЭД-эффектов в системах с закритическим зарядом источников // XXV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных по фундаментальным наукам Ломоносов-2018. Секция Физика. – Подсекции: Атомная и ядерная физика, Теоретическая физика. – Физический факультет МГУ, Москва, 2018. – С. 194-196.

2. *Роенко А. А., Свешников К. А.* Вычисление критических расстояний в сверхтяжёлых ядерных квазимолекулах за рамками монопольного приближения // VIII Международная школа-конференция молодых учёных и специалистов «Современные проблемы физики». – Институт физики НАН Беларуси, Минск, 2018. – С. 50-54.

3. *Roenko A., Sveshnikov K.* Shift of electronic levels due to dynamically screened electron magnetic anomaly for systems with supercritical charge // 19th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions. – Caparica-Lisboa, Portugal, 2018. – P. 137-137.

4. *Roenko A., Sveshnikov K.* Two-center Dirac equation beyond the monopole approximation: critical distances for lower electronic levels // 19th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions. – Caparica-Lisboa, Portugal, 2018. – P. 205-205.

5. *Роенко А. А., Свешников К. А.* Расчёт критических расстояний в системе двух сталкивающихся тяжёлых ядер за рамками монопольного приближения // Сборник аннотаций докладов Молодежной конференции по теоретической и экспериментальной физике МКТЭФ-2018. – НИЦ «Курчатовский институт» - ИТЭФ, Москва, 2018. – С. 88-88.

Личный вклад автора.

Содержание работы и основные результаты отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Все представленные в работе результаты получены лично автором.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, списка литературы и 2 приложений. Общий объем работы составляет 105 страниц, включая 15 рисунков и 23 таблицы (из них 12 в приложении). Библиография включает 138 наименований на 16 страницах.

Глава 1

Критический заряд в квантовой электродинамике

1.1. Спектр уравнения Дирака и понятие критического заряда в КЭД

При наличии слабого внешнего электромагнитного поля, уравнение Дирака может иметь дискретный спектр в диапазоне $-mc^2 \leq E < mc^2$, соответствующий связанным состояниям электрона для данного потенциала. Так, энергия электронных уровней с квантовыми числами nj в кулоновском поле точечного ядра с зарядом Z даётся формулой Зоммерфельда [84]

$$E_{n,j} = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j+1/2) + \sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{-1/2} . \qquad (1.1)$$

Из (1.1) видно, что при $Z\alpha > |j + 1/2|$ под корнем оказывается отрицательная величина, и данное выражение теряет смысл. Например, для основного состояния энергия электрона $E_{1s_{1/2}} = mc^2\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$ при $Z > 1/\alpha \simeq 137$ становится чисто мнимой, и гамильтониан системы теряет самосопряжённость [10—12]. При этом дираковские волновые функции электрона становятся комплексными и быстро осциллируют при $r \to 0$ [9]. Для перехода к изучению области $Z\alpha > 1$ необходимо построить самосопряжённое расширение исходного гамильтониана, однако такое построение не единственно [85; 86]. Наиболее физически обоснованным подходом к этому вопросу является задание определённых граничных условий при $r \to 0$, что соответствует учёту конечных размеров тяжёлого ядра.

Впервые решение уравнения Дирака в поле протяжённого ядра было получено Померанчуком и Смородинским в 1945 году [1], где было показано, что при $Z > 137$ уровни в водородоподобном ионе продолжают существовать и с ростом Z последовательно достигают порога $-mc^2$. Значение заряда ядра, при котором порога отрицательного континуума достигает первый дискретный уровень $E_{1s_{1/2}} = -mc^2$, получило название критического. Чуть позднее значение критического заряда Z_{cr} было уточнено в работах [87; 88].

Интерес к вопросу о критическом заряде в квантовой электродинамике вернулся на границе 1960-70-х годов, когда независимо в работах Герштейна и Зельдовича [2; 3], а также Пипера и Грайнера [4], было предсказано рождение вакуумных позитронов при погружении в нижний континуум $E < -mc^2$ незаполненного электронного уровня, а также было отмечено, что закритическая область $Z_\Sigma > Z_{cr}$ может быть достигнута при столкновениях тяжёлых ионов.

Следует отметить, что уравнение Дирака для электронного уровня, находящегося ровно на границе нижнего континуума, сильно упрощается, и может быть записано его аналитическое решение в случае потенциала $U(r) = -Z\alpha/R$, $r \leq R$; $U(r) = -Z\alpha/r$, $r > R$, что позволяет получить трансцендентное уравнение непосредственно на величину Z_{cr} из условий сшивки волновых функций на границе ядра [9; 11]. Например, для уровней $ns_{1/2}$ оно имеет вид [9]:

$$2(Z_{cr}\,\alpha)\,\mathrm{ctg}(Z_{cr}\alpha) = \frac{\rho\,K'_{i\nu}(\rho)}{K_{i\nu}(\rho)}, \tag{1.2}$$

где $\rho = \sqrt{8mZ_{cr}\,\alpha R}$, $\nu = 2\sqrt{(Z_{cr}\alpha)^2 - (j+1/2)^2}$, $K_{i\nu}$ – функция Макдональда. При этом дираковские волновые функции для уровней с $E_{nj} = -mc^2$ выражаются через $K_{i\nu}(\rho)$, и при больших r убывают $\sim e^{-\sqrt{r}}$, то есть заметно медленнее, чем волновые функции обычных дискретных уровней в кулоновском поле.

На рис. 1.1 показано поведение дискретных уровней в водородоподобном ионе с ростом Z. Далее приведём качественное описание процессов, происходящих при $Z > Z_{cr}$ в результате погружения дискретных уровней в область непрерывного спектра, которая, в рамках концепции „моря Дирака“, в вакуумном состоянии заполнена электронами.

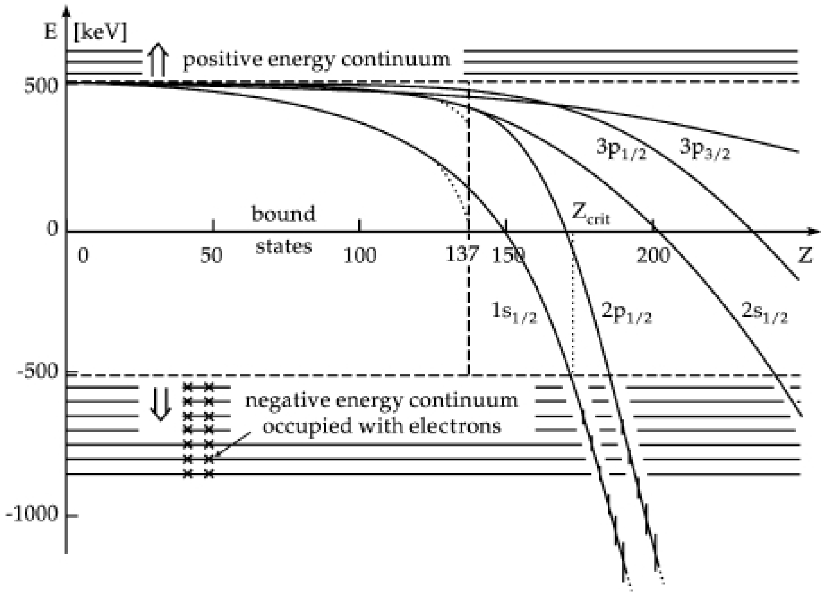


Рис. 1.1. Зависимость энергии нижних дискретных уровней в водородоподобном ионе от заряда ядра Z [9]. Значения, соответствующие формуле Зоммерфельда (1.1) для уровней $1s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ перестают существовать при $Z\alpha = 1$ (пунктир). С учётом конечных размеров ядра все дискретные уровни последовательно достигают порога нижнего континуума $E = -mc^2$ при соответствующих значениях Z_{cr}. [9].

1.2. Рождение позитронов при $Z > Z_{cr}$

Простейшее описание процессов, имеющих место при переходе через Z_{cr}, может быть дано в рамках одночастичной теории с помощью формализма Фано [8; 12; 89—91]. Рассмотрим систему (докритический атом с $Z \lesssim Z_{cr}$) с гамильтонианом H_0. Пусть ϕ_0 – собственная функция H_0, соответствующая дискретному уровню вблизи порога нижнего континуума $E_0 \approx -mc^2$; Ψ_E – состояния непрерывного спектра $-\infty < E < -mc^2$. Для простоты будем считать, что остальные уровни расположены далеко от E_0 и не будем их учитывать. Таким образом,

$$H_0\phi_0 = E_0\phi_0\,, \qquad\qquad H_0\Psi_E = E\Psi_E\,, \tag{1.3}$$

и $\{\phi_0, \Psi_E\}$ образует полный ортонормированный базис (будем считать функции непрерывного спектра нормированными на дельта-функцию). Пусть теперь эта система подвергается некоторому возмущению V, в результате которого дискретный уровень погружается в нижний континуум (например, в результате бета-распада заряд ядра увеличивается на ΔZ, тогда $V \simeq (Z+\Delta Z)U(r) - ZU(r) \propto \Delta Z$). Новый гамильтониан системы $H = H_0 + V$ имеет только непрерывный спектр, и собственные функции $\tilde{\Psi}_E$ возмущенного гамильтониана H (считаем их также нормированными на дельта-функцию) могут быть разложены по собственным функциям $\{\phi_0, \Psi_E\}$ невозмущенного гамильтониана H_0:

$$(H_0 + V)\tilde{\Psi}_E = E\tilde{\Psi}_E\,, \tag{1.4}$$

$$\tilde{\Psi}_E = a(E)\phi_0 + \int dE' b_{E'}(E)\Psi_{E'}\,. \tag{1.5}$$

Если исходно система находилась в состоянии ϕ_0, то в результате рассматриваемого возмущения она перейдёт в одно из состояний $\tilde{\Psi}_E$ с вероятностью $|\langle\tilde{\Psi}_E|\phi_0\rangle|^2 = |a(E)|^2$, которая может быть вычислена и имеет вид [12; 90]

$$|a(E)|^2 = \frac{1}{2\pi}\frac{\Gamma}{(E-E_r)^2 + \Gamma^2/4}\,, \tag{1.6}$$

где $\Gamma = 2\pi|\langle\Psi_E|V|\phi_0\rangle|^2$, $E_r \approx E_0 + \langle\phi_0|V'|\phi_0\rangle$ [12; 90]. Выражение (1.6) имеет резонансное поведение. Причём, если в результате возмущения уровень погружается достаточно глубоко (что имеет место при $\Delta Z \gtrsim 3$), то ширина резонанса $\Gamma \propto \Delta Z^2$, а центр резонанса погружается в нижний континуум почти линейно $E_r \simeq E_0 - \Delta Z\langle\phi_0|U(r)|\phi_0\rangle$ [8; 90]. Таким образом, в результате погружения в область $E < -mc^2$ дискретных уровней при $Z > Z_{cr}$ в нижнем континууме на их месте возникают квазистационарные уровни шириной Γ.

В случае, если изначально дискретный уровень не был заполнен, то распад этого квазистационарного уровня сопровождается заполнением двух (с учётом спина электрона) состояний в нижнем континууме „дырками“, то есть рождением двух позитронов за время $1/\Gamma$, которые затем покидают систему. Также этот процесс может быть интерпретирован как распад нейтрального вакуума на два позитрона и заряженный вакуум [6—8; 90; 91]. Отметим, что при этом возникает ненулевая плотность вакуумного заряда, которая, в рамках формализма

Фано, будет иметь вид [8; 9]

$$\begin{aligned}\Delta\rho_{vac}(r) &= \rho_{vac}(Z > Z_{cr}) - \rho_{vac}(Z \lesssim Z_{cr}) = \\ &= 2e\left(\int dE\tilde{\Psi}_E^\dagger\tilde{\Psi}_E - \int dE\Psi_E^\dagger\Psi_E\right) = 2e|\phi_0(r)|^2\,,\end{aligned} \tag{1.7}$$

то есть по форме и полному заряду имитирует заполненную электронную оболочку.

Конечно, возникающие при $Z > Z_{cr}$ процессы непертурбативной перестройки вакуума, не могут быть полностью описаны в рамках одночастичной теории, тем не менее, изложенный формализм позволяет получить некоторое качественное понимание происходящего. Более аккуратное теоретико-полевое описание процессов рождения вакуумных позитронов представлено в работах [6—8; 10; 92, и др.]. Непертурбативные вычисления плотности вакуумного заряда ρ_{vac} при $Z > Z_{cr}$ в различных системах могут быть выполнены с использованием формализма Вихмана-Кролла [22—26; 69; 70; 93—98], и они показывают, что результат, полученный в рамках формализма Фано (1.7) действительно оказывается неплохим приближением в окрестности Z_{cr}, а погружение в нижний континуум каждого дискретного уровня приводит к увеличению интегрального заряда вакуума $\int d\vec{r}\,\rho_{vac}(r)$ на две единицы (с учётом спина электрона) [22—24].

Вычислению различными методами параметров резонансов, возникающих в нижнем континууме при $Z > Z_{cr}$, а также обсуждению процессов рассеяния позитронов на сверхкритических атомах посвящены работы [44; 47; 48, и цит. лит.].

1.3. Влияние некоторых эффектов на величину Z_{cr}

В связи с большой величиной Z_{cr} по сравнению с зарядом ядер, наблюдаемых в природе, важным является вопрос о том, нет ли каких-либо эффектов, которые могут приводить к заметному изменению величины критического ядра. Так, использование различных моделей распределения заряда внутри ядра, использование более точных формул для связи радиуса с зарядом ядра приводят к изменениям величины критического заряда ядра, не превышающим несколько единиц [8; 11]. Учёт экранирования кулоновского поля ядра внешними электронами, при их наличии, если рассматривается не голое ядро, увеличивает Z_{cr} не более, чем на две единицы [99; 100].

Интересным является вопрос о том, насколько заметным оказывается величина Лэмбовского сдвига при $Z\alpha > 1$, и не может ли он привести к заметному изменению величины Z_{cr}. Однако, пертурбативные оценки величины радиационного сдвига $1s_{1/2}$ уровня в водородоподобном ионе с $Z = 170$ показывают, что учёт КЭД-поправок не приводит к существенному увеличению или уменьшению Z_{cr}. Однопетлевой сдвиг $1s_{1/2}$ уровня за счёт собственно-энергетического вклада составляет $\Delta E_{SE} = +10.99$ кэВ [101; 102], в то время как сдвиг за счёт поляризации вакуума, вычисленный с учётом всех порядков по $Z\alpha$, составляет $\Delta E_{VP} = -10.68$ кэВ [94; 95], и они почти полностью компенсируют друг друга. Тем не менее, окончательная роль непертурбативности в радиационных КЭД-эффектах при $Z\alpha > 1$ до конца не ясна [28; 29], а радиационные сдвиги других электронных уровней (кроме основного $1s_{1/2}$) при $Z\alpha > 1$ почти не исследовались.

В работах [51—53; 103] изучалось влияние сверхсильного магнитного поля на величину критического заряда ядра. В частности, было показано, что учёт экранирования кулоновского потенциала за счёт радиационных поправок [49; 50], приводит к интересному эффекту замерзания основного уровня энергии при сверхсильных магнитных полях (см. рис. 1.2) [51—53], однако необходимые для значительного уменьшения Z_{cr} магнитные поля пока не достижимы в лабораторных условиях.

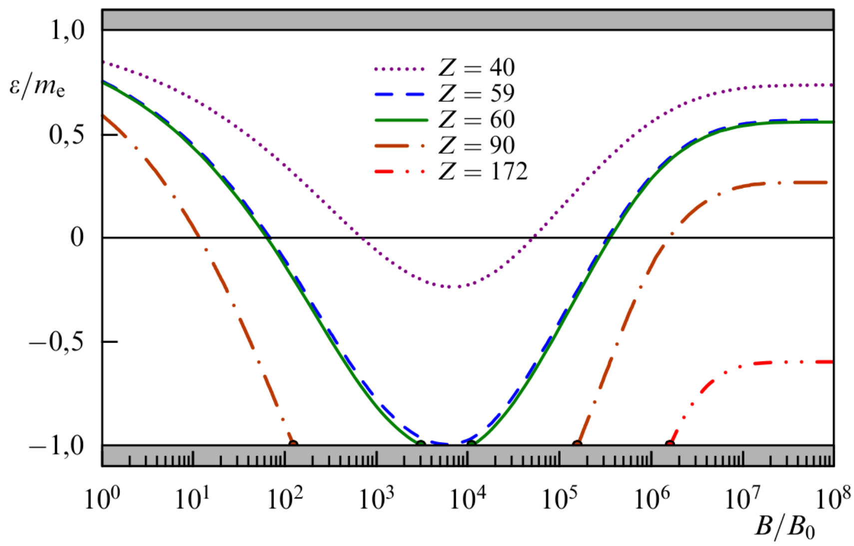


Рис. 1.2. Зависимость энергии основного уровня в водородоподобном ионе в зависимости от внешнего магнитного поля при различных Z [53].

1.4. Эксперименты по столкновению тяжёлых ионов

Другая возможность экспериментального достижения сверхкритических кулоновских полей возникает при сближении на достаточное расстояние двух (или нескольких) тяжёлых ядер с суммарным зарядом $Z_\Sigma > Z_{cr}$ (например, U+U, U+Cf и др.), то есть при столкновениях тяжёлых ионов [2; 5; 6; 91]. Тут следует отметить, что поскольку при этом в первую очередь представляют интерес процессы, обусловленные непертурбативной перестройкой вакуума КЭД (в т. ч. рождение вакуумных позитронов), необходимо производить столкновения с энергией, минимально необходимой для преодоления сил кулоновского отталкивания ядер, чтобы максимально увеличить время существования сверхкритической конфигурации источников. Расстояние R_{cr} между сталкивающимися ядрами, при котором основной электронный уровень в данной двухъядерной системе (квазимолекуле) лежит на границе нижнего континуума, будем называть критическим; по современным оценкам R_{cr} составляет $10 - 50$ фм (в зависимости от заряда ядер в диапазоне $Z_\Sigma \sim 170 - 190$) [11; 58].

На рис. 1.3 схематично показано положение нижних электронных уровней в системе двух сталкивающихся ядер в зависимости от времени. Тут сле-

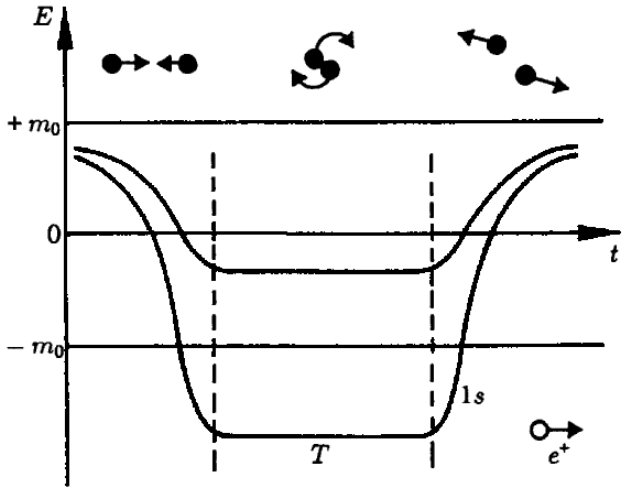


Рис. 1.3. Схематичное положение нижних уровней в ядерной квазимолекуле в зависимости от времени в процессах столкновения тяжёлых ионов [9].

дует заметить, что время жизни квазистационарных уровней, возникающих в нижнем континууме, составляет $\tau_{e+} = 1/\Gamma \sim 10^{-18} - 10^{-19}$ с, в то время как время пролёта тяжёлых ядер на расстоянии, меньшем критического, составляет $\tau_{coll} = 2R_{cr}/v \sim 10^{-20} - 10^{-21}$ с, и процесс рождения вакуумных позитронов становится заметен, если сталкивающиеся ядра „слипаются“ на некоторое достаточное время T, образуя аналог ядра с $Z > Z_{cr}$ [8; 9; 11—13, и цит. лит.]. При этом одной из важных проблем является выделение интересующего эффекта рождения вакуумных позитронов на фоне множества других процессов.

Расчётам характеристик (предполагаемого) испускания вакуумных позитронов при низкоэнергетических столновениях тяжёлых ионов (в т.ч. позитронных спектров, вероятностей ионизации оболочек, критических расстояний и т.д.) посвящен целый ряд статей [76; 77; 92; 104—106, и др.], наиболее свежие результаты в этой области представлены в работах [54—63]. Пример теоретически предсказанных позитронных спектров при столкновениях тяжёлых ионов для различных сталкивающихся ядер приведён на рис. 1.4 (также см. [105]). Из рис. 1.4 видно, что с увеличением времени T число рождающихся позитронов начинает увеличиваться, при этом возникающий пик становится более узким и явно выраженным.

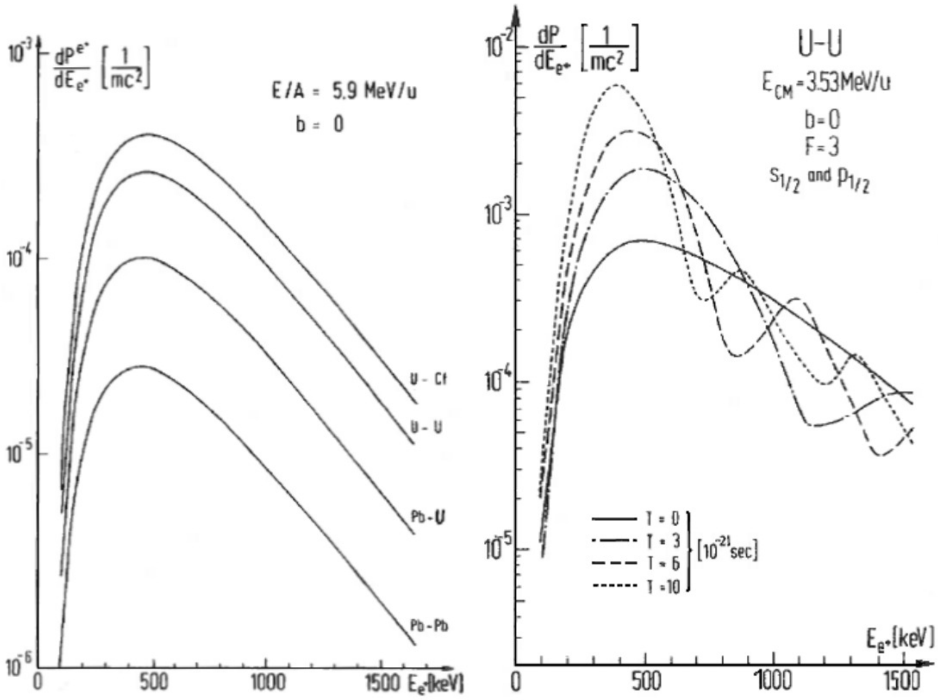


Рис. 1.4. Теоретический спектр рождения позитронов в столкновениях тяжёлых ионов для различных сталкивающихся ядер, а также для системы U+U с учётом слипания ядер на время T [12; 105].

К сожалению, многолетние эксперименты [14—21] на установках GSI (Дармштадт, Германия) и Аргоннской национальной лаборатории (США), начинавшиеся в конце 1970-х годов, так и не привели к однозначному выводу о статусе закритической области. Более подробно история и результаты этих экспериментов изложены в обзорах [8—13]. Кроме того, в связи с планируемыми новыми экспериментами [40—43] по столкновению тяжёлых ионов на строящихся и вводимых в эксплуатацию в ближайшее время ускорительных центрах FAIR (Дармштадт, Германия), HIAF (Китай), NICA (Дубна), дальнейшие исследования в области $Z > Z_{cr}$ представляют большой интерес, о чём также свидетельствует большое количество опубликованных работ, связанных с этой темой [22—26; 44—70, и цит. лит.].

Более подробный обзор публикаций, посвящённых решению уравнения Дирака для электрона в поле двух кулоновских центров, приведён в разделах 3.1, 3.2.

1.5. Эффекты поляризации вакуума при $Z > Z_{cr}$

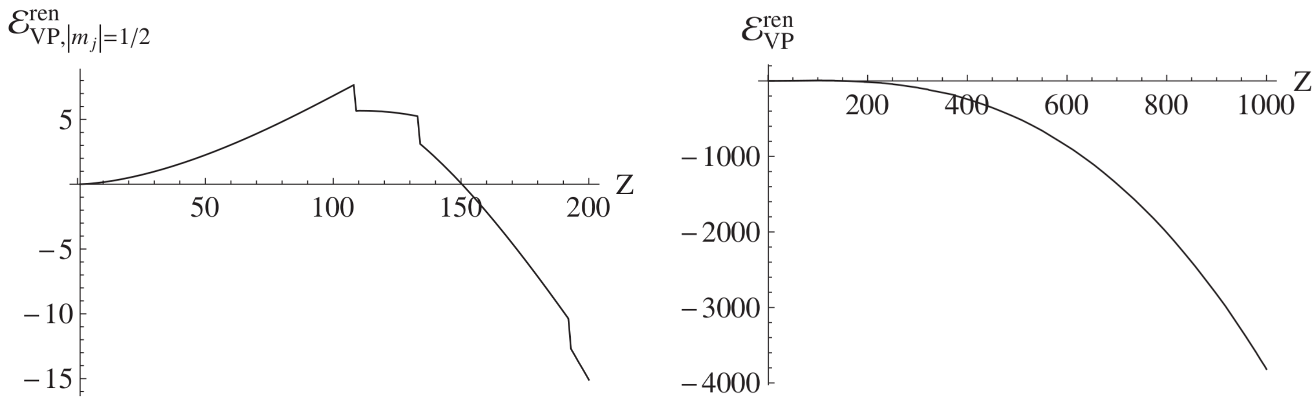
Для сверхкритической области $Z > Z_{cr}$ важной характеристикой является вакуумная плотность заряда ρ_{vac}, целочисленное изменение которой в результате погружения дискретных уровней в нижний континуум сигнализирует о непертурбативной перестройке вакуумного состояния.

Не менее интересным оказывается поведение вакуумной энергии при переходе через Z_{cr}, которое в рамках теории возмущений рассматривалось в [107], а непертурбативные вычисления представлены в работах [22—26; 97; 98]. На рис. 1.5 показано поведение перенормированной вакуумной энергии E^{ren}_{VP} в двумерной системе Дирака-Кулона [26]. Резкие скачки вакуумной энергии при переходе через Z_{cr} имеют величину $2mc^2$ и сигнализируют о непертурбативной перестройке вакуума, при этом излишек энергии уносится из системы двумя позитронами [22]. С увеличением Z, по мере погружения дискретных уровней в нижний континуум, вакуумная энергия начинает быстро убывать, и демонстрирует поведение [23; 26]

$$E^{ren}_{VP} \propto -\eta \, \frac{Z^s}{R} \tag{1.8}$$

где $\eta > 0$, R – радиус кулоновского источника. Оказывается, что степенной показатель s в (1.8) зависит от размерности системы, и в одномерных системах $E^{ren}_{VP,1+1} \propto -\eta \, Z^2/R$, в двумерных $E^{ren}_{VP,2+1} \propto -\eta \, Z^3/R$, а для стандартной 3+1 КЭД предсказывается $E^{ren}_{VP,3+1} \propto -\eta \, Z^4/R$ [22; 23; 26; 98], и с ростом Z вакуумная энергия может даже конкурировать с классической энергией кулоновского отталкивания источников [22—26].

Следует заметить, что поведение вакуумной энергии (1.8) возникает за счёт рассмотрения только фермионных петель, и вопрос о влиянии эффектов с обменом виртуальными фотонами остаётся открытым, равно как и других эффектов, например, магнитного поля.



(*а*) (*б*)

Рис. 1.5. Поведение перенормированной вакуумной энергии E^{ren}_{VP} в двумерной системе Дирака-Кулона с ростом Z [26]. На рис. 1.5, *а* при $Z < Z_{cr}$ имеет место пертурбативный квадратичный рост E^{ren}_{VP}, при дальнейшем увеличении Z вакуумная энергия начинает резко убывать (рис. 1.5, *б*) [26].

1.6. Основные выводы Главы 1

В данной Главе был дан краткий обзор основных явлений и эффектов, предсказываемых квантовой электродинамикой для закритической области $Z > Z_{cr}$, более полно богатая история рассматриваемого вопроса изложена в монографиях и обзорах [8—13; 92]. Тем не менее, в предыдущих разделах были освещены наиболее важные понятия, а также интересные свежие результаты, которые в этих работах не были упомянуты.

Из проведённого анализа может быть сделан вывод о том, что разработка методов решения двухцентрового уравнения Дирака, а также проведение непертурбативного анализа радиационных КЭД-эффектов в одноядерных и двухъядерных системах с критическим и закритическим зарядом источников, определённо представляют интерес. Данный непертурбативный анализ может быть проведён на примере взаимодействия электрона с внешним полем за счёт аномального магнитного момента, о чём и пойдёт речь в последующих разделах.

Глава 2

Динамическая экранировка аномального магнитного момента электрона и КЭД-эффекты в водородоподобных атомах при $Z\alpha > 1$

2.1. Потенциал эффективного взаимодействия за счёт АММ

Взаимодействие аномалии магнитного момента (АММ) дираковской частицы с внешним кулоновским источником всегда вызывало интерес, в частности, в связи с возможным усилением роли магнитных эффектов на предельно малых расстояниях [32; 33; 35; 108], поскольку для точечного кулоновского источника оператор Дирака-Паули [84; 109]

$$\Delta U^{(0)}_{AMM}(\vec{r}) = \frac{\Delta g}{2} \frac{e}{4m} \, \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \, , \tag{2.1}$$

к которому сводится эффективное взаимодействие АММ дираковского фермиона с внешним электромагнитным полем в статическом пределе, обладает максимально допустимой для уравнения Дирака (УД) сингулярностью $\sim 1/r^2$ и доминирует при $r \to 0$. В квантовой электродинамике, однако, аномальный магнитный момент не является исходно присущей дираковской частице характеристикой, а возникает лишь в результате радиационных эффектов, поэтому зависит в том числе и от конфигурации внешнего поля, и его значение вблизи внешнего источника должно отличаться от свободного случая, т.е. $\Delta g \to \Delta g_{free}\, c(r)$, где $c(r)$ описывает подавление магнитных эффектов на малых расстояниях [34; 36]. Непертурбативное вычисление функции $c(r)$ в компактных системах типа e^+e^- сопряжено с большими трудностями, поскольку требует самосогласованного учёта не только конфигурации внешнего поля, но и волновых функций (ВФ) частицы [34; 37], однако вдали от резонансных состояний (в частности, для стационарных состояний атомов) можно ограничиться подходом в рамках теории возмущений (ТВ) и не учитывать влияние волновых функций [36; 39]. В то же время, $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ в виде (2.1) становится актуальным, если АММ дираковского фермиона имеет хотя бы частично неэлектромагнитную природу, поэтому его анализ также представляет интерес. Так, например, при вычислении АММ мюона существенными оказываются адронные вклады, учёта которых всё равно оказывается недостаточно для достижения надёжного согласия предсказаний Стандартной модели с экспериментом [110—112], а значит, даже для мюона нельзя исключать возможности $\Delta g \simeq const$ для отдельных вкладов, поэтому $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ заслуживает отдельного рассмотрения.

Для электрона эффективный потенциал (2.1) справедлив лишь в (статическом) пределе малых значений переданного импульса, когда зависимость электронного формфактора $F_2(q^2)$ от переданного импульса не учитывается, то есть $F_2(q^2) \simeq F_2(0)$. Поскольку однопетлевая поправка к вершинной функции может быть записана через формфакторы электрона $F_1(q^2)$ и $F_2(q^2)$ в виде [31]

$$\Gamma^\mu(q^2) = \gamma^\mu F_1(q^2) + \frac{i}{2m} F_2(q^2) \sigma^{\mu\nu} q_\nu \,, \tag{2.2}$$

то в случае сверхсильных полей (или на предельно малых расстояниях $\ll 1/m$) в качестве эффективного потенциала взаимодействия АММ электрона с кулоновским полем источника вместо (2.1) следует использовать выражение

$$\Delta U_{AMM}(\vec{r}) = \frac{e}{2m}\, \sigma^{\mu\nu} \partial_\mu \mathcal{A}^{(cl)}_\nu(\vec{r}), \tag{2.3}$$

где

$$\mathcal{A}^{(cl)}_\mu(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{q}\; e^{i\vec{q}\,\vec{r}}\, \tilde{A}^{(cl)}_\mu(\vec{q}) F_2(-\vec{q}^{\,2}) \,, \tag{2.4}$$

а $\tilde{A}^{(cl)}_\mu(\vec{q})$ является Фурье-образом потенциала внешнего поля $A^{(cl)}_\mu(\vec{r})$.

Учёт зависимости от переданного импульса приводит к тому, что возникает динамическая экранировка величины аномального магнитного момента в зависимости от расстояния до кулоновского источника. В частности, для точечного источника оператор (2.3) при $r \to 0$ ведёт себя за счет этой экранировки $\sim \log mr$ [39], в то время как в отсутствие экранировки оператор Дирака-Паули (2.1) проявляет максимально допустимую для уравнения Дирака (УД) сингулярность $\sim 1/r^2$.

Следует отметить, что в обоих случаях (2.1) и (2.3) оператор ΔU_{AMM} сохраняет все необходимые для картины Фарри свойства гамильтониана, поэтому допускает детальный непертурбативный анализ (причем не только по $Z\alpha$, но и частично по α/π), а также сравнение результатов с теорией возмущений. Особый интерес такой непертурбативный анализ ΔU_{AMM} представляет для сверхтяжелых ядер при $Z > Z_{cr}$, когда КЭД предсказывает целый ряд нетривиальных эффектов [8; 11—13; 22—24, и цит. лит.]. Одна из причин состоит в том, что для точечного источника оператор (2.1) приводит к тому, что для любых Z волновая функция частицы становится всюду регулярной, имеющей в кулоновской особенности нули бесконечной кратности для обеих компонент биспинора, что в свою очередь приводит к существенному различию между пертурбативными и непертурбативными результатами для сдвигов уровней при больших Z [29]. По этой причине оператор (2.1) одновременно является альтернативным способом регуляризации дираковского гамильтониана для точечного кулоновского источника с зарядом $Z > 137$ [28; 29; 113].

2.2. Уравнение Дирака с ΔU_{AMM} в виде оператора Дирака-Паули

Общий вид уравнения Дирака для частицы в кулоновском поле ядра с учётом дополнительного эффективного взаимодействия за счёт АММ имеет вид ($\hbar = c = m = 1$)

$$\left(\vec{\alpha}\vec{p} + \beta + W(r) + \Delta U_{AMM}\right)\psi = \epsilon\psi \ , \tag{2.5}$$

где $W(r) = e\Phi(r)$ — кулоновский потенциал ядра.

Начнём с рассмотрения $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ в виде (2.1), когда динамическая экранировка АММ по упомянутым выше причинам отсутствует. В приближении $\Delta g = \alpha/\pi \simeq const$ для потенциала эффективного взаимодействия АММ с некоторым внешним кулоновским полем $\Phi(\vec{r})$ получаем следующее выражение

$$\Delta U^{(0)}_{AMM}(\vec{r}) = -i\,\lambda\,\vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{4\pi\Phi(\vec{r})}{e}\right), \tag{2.6}$$

где $\lambda = \alpha^2/4\pi m$, $\alpha = e^2/4\pi$. Заметим, что выражение (2.6) может быть переписано через коммутатор в виде $\lambda\,[\vec{\gamma}\cdot\vec{p}\,, V(\vec{r})]$, где функция $V(\vec{r}\,)$ линейно связана с кулоновским потенциалом источников, а именно $V(\vec{r}\,) = -4\pi\Phi(\vec{r}\,)/e$. Тогда из уравнения (2.5) для верхней $i\varphi$ и нижней χ компонент дираковского биспинора следует

$$\begin{aligned} &i\left(\vec{\sigma}\vec{p} + \lambda\,[\vec{\sigma}\vec{p}\;, V(\vec{r})]\right)\varphi = (\epsilon + 1 - W(r))\,\chi\;,\\ &i\left(\vec{\sigma}\vec{p} - \lambda\,[\vec{\sigma}\vec{p}\;, V(\vec{r})]\right)\chi = -\,(\epsilon - 1 - W(r))\,\varphi\;. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Рассмотрим центральную задачу (водородоподобный ион), в этом случае будут сохраняться полный момент электрона $\vec{j}$ и оператор $k = \beta(\vec{\sigma}\vec{l} + 1)$, поэтому в стандартном представлении для матриц Дирака верхний и нижний спиноры электронной ВФ будут содержать шаровые спиноры Ω_{jlm_j} и $\Omega_{jl'm_j}$ различной четности и радиальные функции $if_j(r)$ и $g_j(r)$

$$\psi_{jm_j} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} if_j(r)\,\Omega_{jlm_j} \\ g_j(r)\,\Omega_{jl'm_j}\end{pmatrix}. \tag{2.8}$$

При этом $f_j(r)$ и $g_j(r)$ вещественны, и $l + l' = 2j$. Определение сферических гармоник и шаровых спиноров соответствует работе [114], при этом $\Omega_{jl'm_j} = (\vec{\sigma}\vec{n})\,\Omega_{jlm_j}$. Состояния с фиксированным j и различной четностью отличаются значениями $\kappa = \pm(j + {}^1\!/_2)$ и удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} &(\partial_r + \lambda V'(r) + \kappa/r)\,f_j = (\epsilon + 1 - W(r))\,g_j\,,\\ &(\partial_r - \lambda V'(r) - \kappa/r)\,g_j = -\,(\epsilon - 1 - W(r))\,f_j\,. \end{aligned} \tag{2.9}$$

2.2.1. Точечное ядро

Здесь необходимо отметить, что в случае точечного ядра ($W(r) = -Z\alpha/r$, $\lambda V'(r) = -Z\lambda/r^2$) в (2.9) член Дирака-Паули доминирует на предельно малых расстояниях $r \sim O(\alpha^2/4\pi) \simeq 4.2 \times 10^{-6} \sim 10^{-3}$ фм, за счет чего асимптотика радиальных функций при $r \to 0$ становится регулярной для всех Z и вне зависимости от четности уровня с точностью до степенного множителя описывается экспоненциально быстро убывающими функциями с нулями бесконечной кратности, которые имеют вид

$$f_j(r) \to \exp\left(-Z\lambda/r\right) \, , \qquad g_j(r) \to -\frac{\alpha}{2\lambda}\, r \exp\left(-Z\lambda/r\right) \, . \tag{2.10}$$

Из вида асимптотик (2.10) очевидно, что в этом случае эффекты, обусловленные потенциалом $\Delta U^{(0)}_{AMM}$, являются существенно непертурбативными, поскольку (2.10) не имеет разложения по степеням α при $r \to 0$. В свою очередь, это приводит к тому, что в поведении радиальных компонент волновой функции возникают существенные изменения на предельно малых расстояниях от центра по сравнению с чисто кулоновской задачей. При этом гамильтониан такой системы остаётся самосопряжённым при $Z\alpha > 1$. Исследование поведения уровней в водородоподобном ионе при наличии дополнительного потенциала $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ в случае точечного ядра проводилось в [27—29; 113]. Так, в работе [27] был с помощью теории возмущений вычислен сдвиг уровней за счёт потенциала Дирака-Паули (2.6). Так, для уровня $1s_{1/2}$ пертурбативное выражение для сдвига имеет вид [27]

$$\Delta\epsilon_{1s_{1/2}}(Z) = \frac{Z^4\alpha^5}{\pi}\,\frac{(1-Z^2\alpha^2)^{1/2}+1/2}{(1-Z^2\alpha^2)^{1/2}\,(3-4Z^2\alpha^2)} \, , \tag{2.11}$$

то есть имеет два полюса – при субкритическом $Z\alpha = \sqrt{3}/2$ и критическом $Z\alpha = 1$, то есть в точках, где происходит изменение свойств самосопряжённости гамильтониана для точечного ядра [27; 85; 86]. Однако, непертурбативный учёт $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ при больших Z даёт совершенно другие результаты. Оказывается, что в такой системе уровни ведут себя с ростом Z существенно отличным от

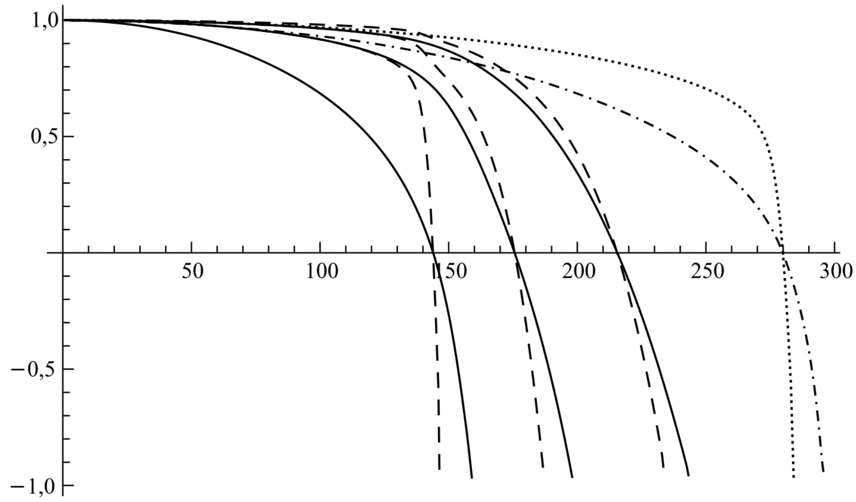


Рис. 2.1. Поведение уровней $1s_{1/2}$, $2s_{1/2}$, $3s_{1/2}$ (сплошные линии), $2p_{1/2}$, $3p_{1/2}$, $4p_{1/2}$ (штриховые) и $2p_{3/2}$ (штрихпунктирная), $3d_{3/2}$ (пунктирная) дираковской частицы в поле точечного ядра при наличии $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ в зависимости от заряда ядра Z [29].

чисто кулоновского случая образом (см. рис. 2.1) [29]. Сдвиг уровней с противоположными $\pm\kappa$ имеет различный знак и, кроме того, оказывается настолько большим, что, начиная с некоторого Z уровни с $\kappa > 0$ (например, $2p_{1/2}$) „обгоняют“ уровни с $\kappa < 0$ (например, $1s_{1/2}$), и в результате первым достигает порога нижнего континуума уровень $2p_{1/2}$ при $Z \simeq 147$ [29]. Причём данное пересечение уровней с ростом Z всегда имеет место при $\epsilon = 0$ [29]. Таким образом, в случае точечного ядра при $Z\alpha \gtrsim 1$ влияние $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ является сугубо непертурбативным.

2.2.2. Протяжённое ядро

Теперь перейдём к рассмотрению протяжённого ядра, поскольку нас в первую очередь будет интересовать область $Z\alpha > 1$, и учёт конечных размеров кулоновского источника является наиболее физически осмысленным способом восстановления самосопряжённости гамильтониана для этой области. Потенциал $\Phi(r)$ выберем в виде

$$\Phi(r) = -\frac{Ze}{4\pi r}\,, \quad r > R\,, \qquad \Phi(r) = -\frac{Ze}{4\pi}\,\frac{3R^2 - r^2}{2R^3}\,, \quad r \le R\,, \tag{2.12}$$

где радиус ядра R определяется через Z с помощью (упрощенной) формулы $R \simeq 1.228935\,(2.5Z)^{1/3}$ фм[1]. В случае протяжённого ядра с потенциалом (2.12) система уравнений получается из (2.9) после подстановки

$$\lambda V'(r) = -\frac{Z\lambda r}{R^3}\,, \quad r \le R\,; \qquad \lambda V'(r) = -\frac{Z\lambda}{r^2}\,, \quad r > R\,. \tag{2.13}$$

В результате численного решения системы (2.9) с учётом (2.13) сдвиг электронных уровней $\mathcal{D}\epsilon$ за счёт $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ может быть определён непертурбативным образом как по $Z\alpha$, так и (частично) по α/π.

Полученные таким образом непертурбативные значения для сдвигов уровней прежде всего следует сравнить с оценкой сдвига по теории возмущений, когда $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ рассматривается как возмущение кулоновского потенциала (2.12). В этом случае сдвиг кулоновских уровней с квантовыми числами nj находится по формуле

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\epsilon(nj)^{\mathrm{PT}} &= \langle \psi^{(0)}_{nj} | \Delta U^{(0)}_{AMM} | \psi^{(0)}_{nj} \rangle = \\ &= -2Z\lambda \left(\frac{1}{R^3} \int\limits_0^R dr\; r^3 f^{(0)}_{nj}(r)\, g^{(0)}_{nj}(r) + \int\limits_R^\infty dr\, f^{(0)}_{nj}(r)\, g^{(0)}_{nj}(r) \right)\,, \end{aligned} \tag{2.14}$$

где $f^{(0)}_{nj}(r)\,,\ g^{(0)}_{nj}(r)$ — радиальные компоненты невозмущенного кулоновского уровня определенной четности $\psi^{(0)}_{nj}$. Выражение (2.14) за счет радиальных кулоновских компонент $f^{(0)}_{nj}$, $g^{(0)}_{nj}$ полностью учитывает зависимость ВФ от $Z\alpha$, но при этом является эффектом первого порядка по $Z_q\lambda$, т.е. фактически по Δg_{free} и тем самым по α/π.

В таб. 2.1, 2.2 приведены значения полных сдвигов уровней $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$, вычисленные с помощью решения системы (2.9) после замены (2.13), а также по ТВ (2.14). Непертурбативный результат для уровня $2p_{1/2}$ отсутствует

[1] Коэффициент в этой формуле выбран таким образом, чтобы в чисто кулоновской задаче с потенциалом $\Phi(r)$ уровень $1s_{1/2}$ почти достигал порога отрицательного континуума при $Z = 170$ с энергией связи $\simeq 1.99999\,m$. Более корректное соотношение $R = 1.2\,A^{1/3}$, $A = 0.00733Z^2 + 1.3Z + 63.6$ для нашего случая будет превышением точности, поскольку уже кулоновский потенциал ядра в виде (2.12) является приближением, особенно при $Z > 137$.

при $Z = 183$, так как сдвиг для нечётного уровня является отрицательным и при $Z > 180$ уровень уже опускается в нижний континуум, то есть учёт $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ уменьшает соответствующий данному уровню критический заряд сразу на несколько единиц. Данные методы дают близкие значения, однако отличие между непертурбативным $\mathcal{D}\epsilon$ и пертурбативным $\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$ результатами составляет $\sim 5\%$. При этом, как и в случае точечного ядра, сдвиг нижнего чётного уровня оказывается положительным, а нижнего нечётного – отрицательным, но при этом не настолько большими, чтобы вызывать перестройку спектра, которая возникает за счёт $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ для точечного ядра. Тем не менее, для электронных уровней, находящихся вблизи порога нижнего континуума $\epsilon = -m$, данный сдвиг составляет $\sim 10\%$ от энергии связи.

Таблица 2.1. Полные сдвиги $1s_{1/2}$ уровня за счёт $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ в виде (2.6).

Z	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ
140	6.727	7.031
150	13.594	14.317
160	25.802	27.223
170	43.927	46.136

Таблица 2.2. Полные сдвиги $2p_{1/2}$ уровня за счёт $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ в виде (2.6).

Z	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ
160	-21.539	-20.040
170	-43.065	-40.661
180	-68.227	-65.334
183	–	-72.908

Ещё раз отметим, что для атомного электрона сдвиг за счет ΔU_{AMM} является частью собственно-энергетического вклада в полный радиационный сдвиг уровней. Расчеты для $1s$-электрона при $Z = 170$ и таком же соотношении между R и Z, выполненные в [101; 102] в первом порядке по α/π с полным учетом зависимости от $Z\alpha$, приводят к $\Delta E_{SE}(1s_{1/2}) \simeq 11,0$ кэВ. Таким образом, вклад от $\Delta U^{(0)}_{AMM}$ в виде оператора Дирака-Паули, который возникает как одна из радиационных поправок к вершинному формфактору (но только в пределе малых переданных импульсов), заметно превышает значение для полного сдвига за счёт собственной энергии. Однако, как будет показано далее, учёт динамической экранировки аномального магнитного момента электрона существенно корректирует полученные значения сдвигов за счёт ΔU_{AMM} и приводит их в соответствие с ΔE_{SE}.

В работах [80; 82] был подробно рассмотрен вопрос о том, насколько эквивалентно в случае $Z\alpha > 1$ использование в качестве источника для потенциала Дирака-Паули протяжённого равномерно заряженного сверхтяжёлого ядра и системы большого числа точечных зарядов в силу асимптотик (2.10), поскольку волновая функция должна экспоненциально исчезать на каждом точечном источнике. Проведённый анализ с использованием аналитических и численных методов показал [80; 82], что при непертурбативном учёте ΔU_{AMM} в уравнении Дирака данные подходы приводят к совпадающим результатам, несмотря на существенно различное поведение дираковских волновых функций в этих случаях, что является заранее неочевидным в силу (2.10), хотя и ожидаемым результатом.

2.3. Эффективное взаимодействие за счёт динамически экранированного АММ

Получим явное выражение для эффективного потенциала взаимодействия за счёт динамически экранированного АММ (2.3). Для атомного электрона потенциал внешнего поля имеет вид $A^{(cl)}_{\mu}(\vec{r}\,) = \delta_{0,\mu}\Phi(r)$, где $\Phi(r)$ — сферически симметричный кулоновский потенциал ядра. С учётом того, что в лидирующем приближении $F_2(0) = \alpha/2\pi \simeq \Delta g_{free}/2$, после интегрирования по углам в (2.4) получаем

$$\mathcal{A}_{\mu}^{(cl)}(r) = -\frac{\Delta g_{free}}{2}\,\frac{Ze}{4\pi r}\,c(r)\,\delta_{\mu,0},$$
$$c(r) = 2\int\limits_0^{\infty} qdq\ \sin qr \left(-\frac{1}{Ze}\,\tilde{\Phi}(q)\right)\frac{1}{\pi}\frac{F_2(-q^2)}{F_2(0)}\,. \tag{2.15}$$

Теперь эффективный потенциал (2.3) может быть переписан следующим образом:

$$\Delta U_{AMM}(r) = -i\,Z\lambda\,\vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla}\left(-\frac{c(r)}{r}\right)\,, \tag{2.16}$$

где $\lambda = \alpha^2/4\pi m$, $\alpha = e^2/4\pi$. Отметим, что потенциал (2.16) имеет такую же структуру, что и $\Delta U_{AMM}^{(0)}$ (2.6). Далее вопрос состоит в вычислении функции $c(r)$ для заданного кулоновского потенциала $\Phi(r)$. Эффективным методом вычисления интегралов типа (2.15) является расширение пределов интегрирования по чётности до $(-\infty,\infty)$ и сведение его к интегралу от мнимой части электронного формфактора $\mathrm{Im}\,F_2(q^2)$, которая имеет более простой вид, чем $F_2(q^2)$.

2.3.1. Точечный источник

Для точечного источника кулоновский потенциал и его Фурье-образ $\tilde{\Phi}(q)$ имеют вид

$$\Phi(r) = -\frac{Ze}{4\pi r}\,e^{-\mu r}\,,\quad \tilde{\Phi}(q) = -\frac{Ze}{q^2+\mu^2}, \tag{2.17}$$

где масса фотона μ введена для регуляризации интеграла в (2.15), что позволяет избавиться от полюса $\tilde{\Phi}(q)$ в нуле. В случае $\mu = 0$ необходимо было бы задавать специальные правила обхода полюса в нуле или уточнять, в каком смысле понимается интеграл, однако регуляризация с помощью $e^{-\mu r}$ позволяет сместить полюс с действительной оси и упростить дальнейшие вычисления. В этом случае для функции $c(r)$ получаем следующее выражение:

$$c(r) = \frac{1}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} qdq\ e^{iqr}\left(\frac{1}{q^2+\mu^2}\right)\frac{1}{\pi}\frac{F_2(-q^2)}{F_2(0)}\,. \tag{2.18}$$

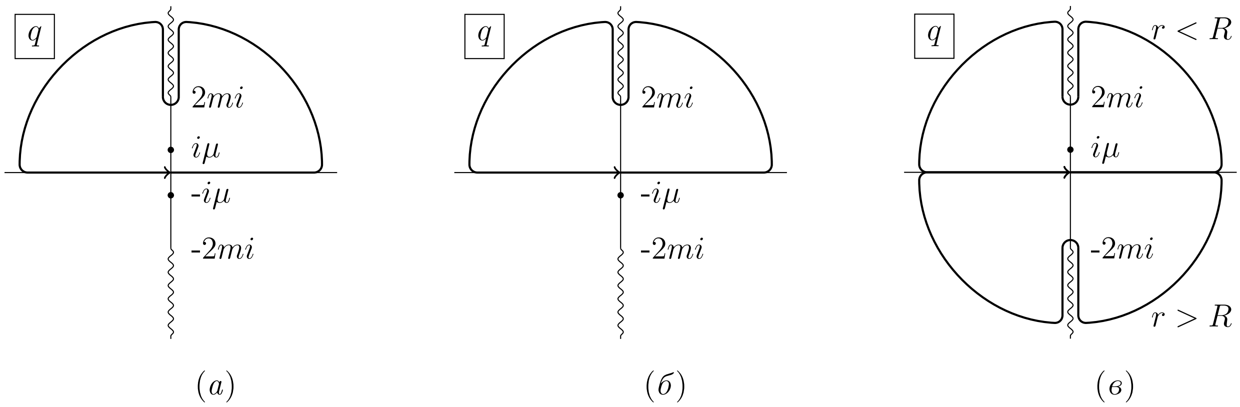


Рис. 2.2. Контуры интегрирования, используемые при вычислении интегралов в формулах (2.18), (2.26).

В (2.18) в верхней полуплоскости подынтегральная функция имеет полюс в точке $i\mu$, кроме того электронный формфактор $F_2(-q^2)$ имеет разрез на мнимой оси, начинающийся при $q = 2mi$, скачок при переходе через который составляет $\Delta F_2(-q^2) = 2i\,\mathrm{Im}\,F_2(-q^2)$. В итоге, после сведения интеграла к контурному (см. рис. 2.2, *а*), выражение (2.18) после перехода $\mu \to 0$ принимает вид (обозначаем c_q) [39]

$$c_q(r) = 1 - \int\limits_{4m^2}^{\infty} \frac{dQ^2}{Q^2}\, e^{-Qr}\, \frac{1}{\pi}\, \frac{\mathrm{Im}\,F_2(Q^2)}{F_2(0)}\,, \tag{2.19}$$

где в однопетлевом приближении [115]

$$\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,F_2(Q^2) = 2F_2(0)\,\frac{m^2}{Q^2}\,\frac{1}{\sqrt{1-4m^2/Q^2}}.$$

2.3.2. Протяжённое ядро

Потенциал протяжённого ядра (2.12), регуляризованный с помощью множителя $e^{-\mu r}$ по аналогии с (2.17), будет иметь вид

$$\Phi(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze}{4\pi r}\, e^{-\mu r}, & r > R \\ -\dfrac{Ze}{4\pi R}\,\dfrac{3R^2 - r^2}{2R^2}\, e^{-\mu r}, & r < R \end{cases}, \tag{2.20}$$

где радиус ядра R по-прежнему связан с зарядом ядра Z. Тогда Фурье-образ потенциала (2.20) может быть записан в виде следующего выражения:

$$\tilde{\Phi}(q) = -\frac{Ze}{q}\left(\tilde{\Phi}^{(+)}(q)e^{iqR} + \tilde{\Phi}^{(-)}(q)e^{-iqR} + \tilde{\Phi}^{(0)}(q)\right), \tag{2.21}$$

где

$$\tilde{\Phi}^{(+)}(q) = -3\,\frac{qR + i(1+R\mu)}{2R^3(q+i\mu)^4}\,e^{-R\mu}, \tag{2.22}$$

$$\tilde{\Phi}^{(-)}(q) = -3\,\frac{qR - i(1+R\mu)}{2R^3(q-i\mu)^4}\,e^{-R\mu}, \tag{2.23}$$

$$\tilde{\Phi}^{(0)}(q) = 3q\mu\,\frac{q^4R^2 + \mu^2\left(-4+R^2\mu^2\right) + 2q^2\left(2+R^2\mu^2\right)}{R^3\left(q^2+\mu^2\right)^4}. \tag{2.24}$$

После подстановки (2.21) в (2.15) получаем:

$$c(r) = J^{(+)}(r) + J^{(-)}(r) + J^{(0)}(r) \tag{2.25}$$

где

$$J^{(\pm)} = \frac{1}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dq\; e^{iq(r\pm R)}\,\tilde{\Phi}^{(\pm)}(q)\,\frac{1}{\pi}\frac{F_2(-q^2)}{F_2(0)}, \tag{2.26a}$$

$$J^{(0)} = \frac{1}{i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dq\; e^{iqr}\,\tilde{\Phi}^{(0)}(q)\,\frac{1}{\pi}\frac{F_2(-q^2)}{F_2(0)}. \tag{2.26b}$$

Интеграл $J^{(-)}$ вычисляется по-разному в случаях $r<R$ и $r>R$, а интегралы $J^{(+)}$, $J^{(0)}$ имеют одинаковый вид на всём интервале $r\in(0,\infty)$. В интеграл $J^{(0)}$ (контур интегрирования имеет такой же вид 2.2, *а*, как и в случае точечного ядра) вклад дает только полюс $i\mu$, так как $\tilde{\Phi}^{(0)} \propto \mu$, и вклад от разреза оказывается нулевым после снятия регуляризации $\mu\to 0$. Фурье-образ $\tilde{\Phi}^{(+)}$ не имеет полюсов в верхней полуплоскости, поэтому интеграл $J^{(+)}$ равен интегралу вдоль разреза функции $F_2(-q^2)$ от скачка подынтегральной функции при переходе с одного берега разреза на другой (см. рис. 2.2, *б*). При $r<R$ в $J^{(-)}$ остаётся только вклад от разреза $q\in(-2mi,-i\infty)$, так как у $\tilde{\Phi}^{(-)}$ нет полюсов в нижней полуплоскости, при $r>R$ в интеграл $J^{(-)}$ имеем вклад от полюса

$i\mu$ и от разреза $q \in (2mi, i\infty)$ (см. рис. 2.2, *в*). В итоге получаем следующие выражения для интегралов (2.26)

$$J^{(0)}(r) = \frac{1}{2R^3}\left\{r(3R^2 - r^2) + 3i(r^2 - R^2)\frac{F_2'(0)}{F_2(0)} + 3r\frac{F_2''(0)}{F_2(0)} - i\frac{F_2'''(0)}{F_2(0)}\right\}, \quad (2.27)$$

$$J^{(+)}(r) = -\int\limits_{4m^2}^{\infty}\frac{dQ^2}{Q^2}\,\frac{3(QR+1)}{R^3Q^3}\,e^{-Q(r+R)}\,\frac{1}{\pi}\,\frac{\operatorname{Im}F_2(Q^2)}{F_2(0)}, \quad (2.28)$$

$$J^{(-)}(r) = \frac{1}{2R^3}\left\{(r-R)^2(r+2R) - 3i(r^2 - R^2)\frac{F_2'(0)}{F_2(0)} - 3r\frac{F_2''(0)}{F_2(0)} + i\frac{F_2'''(0)}{F_2(0)}\right\} -$$
$$- \int\limits_{4m^2}^{\infty}\frac{dQ^2}{Q^2}\,\frac{3(QR-1)}{R^3Q^3}\,e^{-Q(r-R)}\,\frac{1}{\pi}\,\frac{\operatorname{Im}F_2(Q^2)}{F_2(0)}, \qquad r > R, \quad (2.29)$$

$$J^{(-)}(r) = \int\limits_{4m^2}^{\infty}\frac{dQ^2}{Q^2}\,\frac{3(QR+1)}{R^3Q^3}\,e^{-Q(R-r)}\,\frac{1}{\pi}\,\frac{\operatorname{Im}F_2(Q^2)}{F_2(0)}, \qquad r < R, \quad (2.30)$$

которые с учётом $F_2'(0) = 0$, $F_2''(0) = -F_2(0)/3m^2$, $F_2'''(0) = 0$ собираются в итоговое выражение для функции $c(r)$ для протяженного однородного заряженного ядра (обозначаем c_N) (2.20):

$$c_N(r) = 1 - \int\limits_{4m^2}^{\infty}\frac{dQ^2}{Q^2}\,\frac{3QR\cosh QR - 3\sinh QR}{R^3Q^3}\,e^{-Qr}\,\frac{1}{\pi}\,\frac{\operatorname{Im}F_2(Q^2)}{F_2(0)}, \qquad r > R, \quad (2.31a)$$

$$c_N(r) = \frac{(3R^2 - r^2)}{2R^3}r - \frac{r}{2m^2R^3} +$$
$$+ \int\limits_{4m^2}^{\infty}\frac{dQ^2}{Q^2}\,\frac{3(QR+1)}{R^3Q^3}\,\sinh Qr\,e^{-QR}\,\frac{1}{\pi}\,\frac{\operatorname{Im}F_2(Q^2)}{F_2(0)}, \qquad r < R. \quad (2.31b)$$

Сама по себе функция $c(r)$ не имеет явного физического смысла, однако выражение $\Delta g_{free}\,c(r)$ может интерпретироваться как зависимость величины АММ электрона во внешнем поле от координаты r. Анализ выражений (2.19, 2.31) показывает, что $c(r) \to 1$ в области $r \gtrsim 1/m$, а при $r \to 0$ монотонно стремится к нулю. Таким образом, вне зависимости от величины заряда кулоновского источника поведение эффективного потенциала (2.16) существенно отличается от оператора Дирака-Паули (2.1) прежде всего на малых расстояниях $r \ll 1/m$, практически совпадает с ним в той области, где потенциал внешнего поля изменяется более плавно, т.е. на расстояниях, больших $1/m$.

2.4. Уравнение Дирака с ΔU_{AMM} при наличии экранировки

Приведём теперь результаты для вклада от ΔU_{AMM} в виде (2.16), т.е. когда учитывается динамическая экранировка аномального магнитного момента электрона. Поскольку оператор (2.16) имеет точно такую же структуру, как и используемый в разделе 2.2 потенциал (2.6), то в этом случае по-прежнему

$$\Delta U_{AMM}(\vec{r}\,) = \lambda\,[\vec{\gamma}\cdot\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)]\,, \tag{2.32}$$

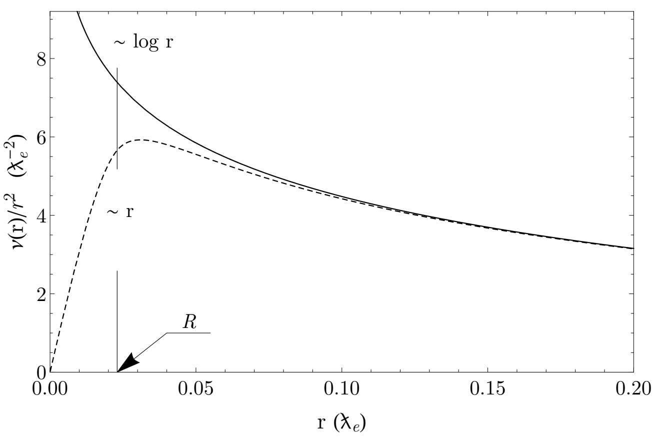
и исходное уравнение Дирака (2.5) сводится к той же системе уравнений (2.7) на спиноры φ, χ с тем лишь отличием, что теперь функция $V(\vec{r}\,)$ для всего ядра, рассматриваемого как однородно заряженный кулоновский источник для ΔU_{AMM}, имеет вид $V(\vec{r}\,) = Zc_N(r)/r$, а в случае точечного ядра $V(\vec{r}\,) = Zc_q(r)/r$.

Для центральной задачи ищем ВФ электрона в виде (2.8), в итоге получаем, что состояния с различными значениями $\kappa = \pm(j + 1/2)$ удовлетворяют уравнениям

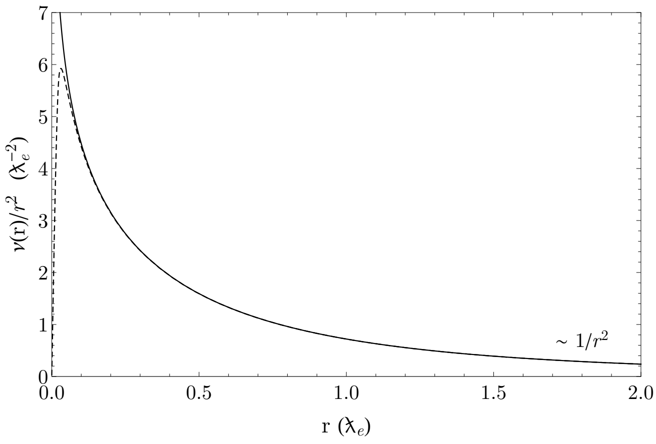
$$\begin{aligned}\left(\partial_r - Z\lambda\nu(r)/r^2 + \kappa/r\right) f_j &= (\epsilon + 1 - W(r))g_j\ ,\\ \left(\partial_r + Z\lambda\nu(r)/r^2 - \kappa/r\right) g_j &= -(\epsilon - 1 - W(r))f_j\ ,\end{aligned} \tag{2.33}$$

где $\nu(r) = c(r) - rc'(r)$, и в зависимости от рассматриваемого случая выбирается соответствующее выражение для $c(r)$.

Отметим, что в случае точечного ядра член $\nu(r)/r^2$ ведёт себя при $r \ll 1$ как $\log r$ (что соответствует $c(r) \to 0$), а при $r \to \infty$ как $1/r^2$ (что соответствует $c(r) \to 1$), так что ΔU_{AMM} не изменяет кулоновские асимптотики волновых



(*а*)



(*б*)

Рис. 2.3. Поведение члена $\nu(r)/r^2$ в уравнениях (2.33) на малых (*а*) и больших (*б*) расстояниях для точечного кулоновского источника (сплошная линия) и протяжённого ядра радиуса R (штрих).

функций. По этой причине при наличии экранировки учёт ΔU_{AMM} уже не может рассматриваться как один из методов восстановления самосопряжённости гамильтониана при $Z > 137$.

Для протяжённого ядра отличие в поведении $\nu(r)/r^2$ по сравнению с точечным источником возникает на масштабах порядка радиуса ядра, а при $r \ll R$ член $\nu_N(r)/r^2$ ведёт себя линейно и обращается в нуль в центре ядра (см. рис. 2.3), что опять же свидетельствует о том, что в динамической экранировке АММ существенны именно предельно малые расстояния, а не амплитуда поля, которая в центре ядра также исчезает.

Как и в статическом пределе (раздел 2.2), в рамках одночастичного уравнения Дирака (2.33) имеется возможность непертурбативного учета вклада от ΔU_{AMM}, и этим следует воспользоваться, чтобы сравнить результаты пертурбативного и непертурбативного подходов к учету ΔU_{AMM} при больших Z, учитывая последние существенно непертурбативные расчеты вакуумной энергии при $Z > Z_{cr,1s}$ [22—26], которые демонстрируют явно нелинейный характер этого эффекта за рамками ТВ.

Численное решение системы (2.33) для протяжённого ядра с использованием $c_N(r)$, определённой в соответствии с (2.31), показывает, что для ядра с критическим зарядом $Z = 170$ уровень $1s_{1/2}$, который соответствует $\kappa = -1$, а также уровень $2p_{1/2}$ ($\kappa = +1$) при соответствующем критическом заряде $Z = 183$ будут сдвинуты относительно чисто кулоновского случая с потенциалом (2.20) следующим образом

$$\mathcal{D}\epsilon_{AMM}\,(1s_{1/2}, Z = 170) = 1.12 \ \text{кэВ}\,,$$
$$\mathcal{D}\epsilon_{AMM}\,(2p_{1/2}, Z = 183) = -1.09 \ \text{кэВ}\,. \tag{2.34}$$

Эти результаты для вклада от ΔU_{AMM} в сдвиг уровней являются полностью непертурбативными по $Z\alpha$, и (частично) по α/π за счет того, что фактической константой связи в ΔU_{AMM} в данном случае является $Z_q\lambda$, куда α/π входит как сомножитель. Подчеркнем, однако, что эта зависимость не имеет ничего общего с суммированием разложения по петлям для АММ, поскольку исходное выражение для оператора (2.15) основано для однопетлевом приближении для вершинного фактора. Оценка по теории возмущений в этом случае может быть сделана на основе кулоновских ВФ $\psi^{(0)}_{nj}$ с квантовыми числами nj по формуле

$$\mathcal{D}\epsilon\,(nj)^{\mathrm{PT}} = \langle\psi^{(0)}_{nj}|\Delta U_{AMM}|\psi^{(0)}_{nj}\rangle = -2Z\lambda\int\limits_0^\infty dr\, f^{(0)}_{nj}(r) g^{(0)}_{nj}(r)\nu_N(r)\,, \tag{2.35}$$

и она даёт значения, совпадающие с непертурбативными результатами (2.34) с точностью не хуже 0.5%.

В таб. 2.3, 2.4 приведены значения полных сдвигов уровней $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ за счёт динамически экранированного АММ, вычисленные непертурбативно на основе решения системы (2.33) для всего ядра и по ТВ (2.35). Из сравнения результатов, представленных в таб. 2.1, 2.2 и таб. 2.3, 2.4, легко заметить, что учёт динамической экранировки АММ существенно уменьшает (по абсолютной величине) сдвиг нижних электронных уровней в водородоподобных атомах при $Z\alpha > 1$ по сравнению с приближением $\Delta g \simeq const$, и значения (2.34) уже не вступают в кажущееся противоречие с результатами однопетлевого вычисления собственно-энергетического сдвига уровня $1s_{1/2}$ при $Z = 170$. Кроме того, в экранированном случае практически нет расхождения между пертурбативными $\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$ и непертурбативными $\mathcal{D}\epsilon$ результатами для сдвигов уровней, что и будет в дальнейшем использоваться при исследовании скорости роста вклада от экранированного ΔU_{AMM}.

Таблица 2.3. Полные сдвиги $1s_{1/2}$ уровня за счёт ΔU_{AMM} в виде (2.16).

Z	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ
80	0.043597	0.043697
90	0.069515	0.069696
100	0.106887	0.107128
110	0.160265	0.160556
120	0.236310	0.236753
130	0.344301	0.344890
140	0.494512	0.495260
150	0.689946	0.691335
160	0.911676	0.912975
170	1.118285	1.119560

Таблица 2.4. Полные сдвиги $2p_{1/2}$ уровня за счёт ΔU_{AMM} в виде (2.16).

Z	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ
90	−0.008197	−0.008191
100	−0.014730	−0.014719
110	−0.026443	−0.026424
120	−0.048442	−0.048409
130	−0.092737	−0.092640
140	−0.187155	−0.186966
150	−0.372568	−0.372442
160	−0.632095	−0.632793
170	−0.874857	−0.875325
180	−1.051722	−1.052329
183	−1.089671	−1.090388

2.5. Общие свойства сдвигов нижних уровней в водородоподобном ионе за счёт ΔU_{AMM}

Теперь рассмотрим зависимость сдвигов энергетических уровней от ΔU_{AMM} от Z. Для атомного электрона сдвиг, обусловленный ΔU_{AMM}, является частью собственно-энергетического вклада в полный радиационный сдвиг, который в пертурбативной КЭД пропорционален Z^4/n^3 [116] и обычно представляется в терминах функции $F_{nj}(Z\alpha)$, определяемой в соответствии с выражением

$$\Delta E_{nj}^{SE}(Z\alpha) = \frac{Z^4\alpha^5}{\pi n^3} F_{nj}(Z\alpha)\,. \tag{2.36}$$

В пертурбативной КЭД $F_{nj}(Z\alpha)$ найдено для нижних электронных уровней водородоподобных атомов с зарядом ядра $Z = 1 - 110$ с учётом всех порядков по $Z\alpha$ [117—121]. Для случая $Z\alpha > 1$ вычисление $\Delta E_{1s_{1/2}}^{SE}$ с точностью порядка нескольких процентов для зарядов ядра $Z = 140, 150, 160, 170$ приведено в работах [101; 102].

Для оператора Дирака-Паули (2.1) пертурбативные вычисления вклада от $\Delta U_{AMM}^{(0)}$ в F_{nj} проводились в [27] в приближении точечного ядра (для $Z < 137$), и в [30] для протяженного ядра с той же зависимостью $R(Z)$, как и в (2.20). При малых Z поведение $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ для оператора Дирака-Паули в случае протяжённого и точечного ядер практически совпадает, а с увеличением заряда ядра Z наблюдается их быстрый рост. При этом $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ для точечного ядра имеет два полюса при субкритическом $Z\alpha = \sqrt{3}/2$ и критическом $Z\alpha = 1$ значениях заряда ядра [27]. Однако с учётом эффективной зависимости АММ от расстояния для протяжённого ядра (2.31) $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ ведёт себя существенно иначе. На рис. 2.4, *а* показана функция $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ для уровней $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$, рассчитанная в рамках непертурбативного подхода на основе (2.34), а также аналогичная зависимость для оператора Дирака-Паули (2.1) в случае точечного и протяжённого ядер. В частности, из рис. 2.4, *а* следует, что для нижнего уровня $1s_{1/2}$ учёт зависимости электронного формфактора от величины пере-

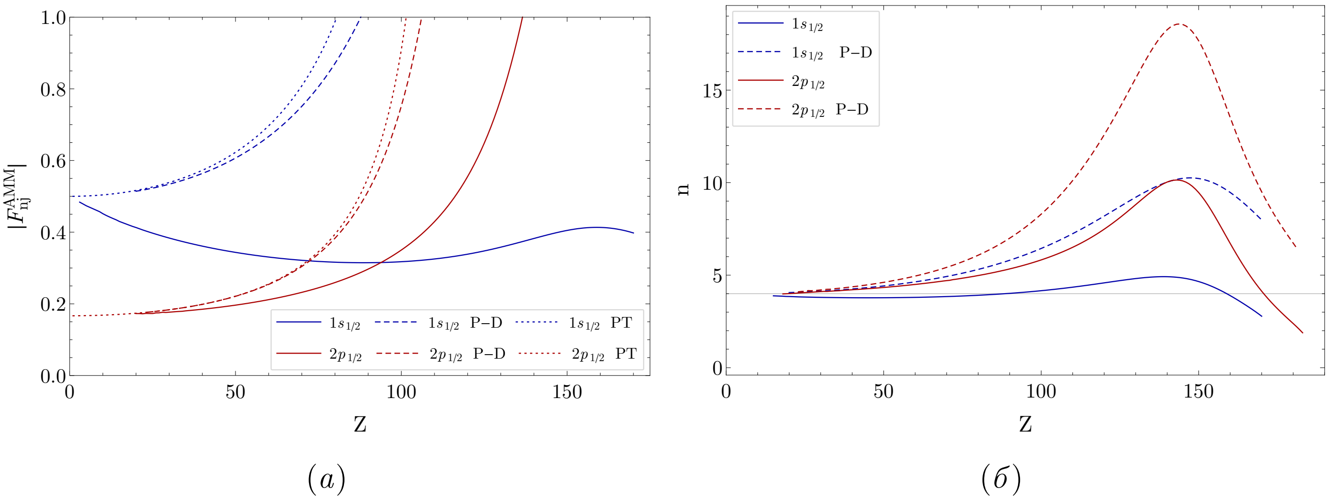


Рис. 2.4. Функция F_{nj}^{AMM} (*а*) и степень роста (*б*) для вклада от ΔU_{AMM} как функция заряда ядра Z для уровней $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$. Для сравнения показаны зависимости для ΔU_{AMM} в виде оператора Дирака-Паули (2.1) (обозн. P-D), а также вычисленные по ТВ для точечного ядра из работы [27] (обозн. PT).

данного импульса приводит к тому, что теперь $F_{1s_{1/2}}^{AMM}(Z\alpha)$ качественно повторяет поведение $F_{1s_{1/2}}(Z\alpha)$ для суммарного собственно-энергетического сдвига, а именно уменьшается с ростом заряда ядра вплоть до $Z \sim 90$, после чего начинает расти (сравн. с [101; 116], также см. рис. 2.6, *а*).

Другой важной характеристикой КЭД-эффектов является вид их степенной зависимости от Z. На рис. 2.4, *б* показано поведение скорости роста $n(Z)$ сдвига уровней $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ за счет ΔU_{AMM} как функции Z, определённой через логарифмическую производную

$$n(Z) = Z\frac{\partial}{\partial Z}\ln\left(|\mathcal{D}\epsilon_{AMM}|\right) . \tag{2.37}$$

Из рис. 2.4, *б* следует, что в данном случае поведение $n(Z)$ в соответствии с (2.36), т.е. рост КЭД-эффектов $\sim Z^4$, имеет место вплоть до $Z \sim 60 - 80$, причём $n(Z)$ для $1s_{1/2}$ имеет пологий минимум при $Z \sim 50$ и стремится к $n = 4$ при $Z \to 0$ снизу, но далее сдвиг от ΔU_{AMM} показывает существенное увеличение степени роста, которое достигает максимума при $Z \simeq 147$ как для $1s_{1/2}$, так и для $2p_{1/2}$, причем этом максимум скорости роста значительно более выражен для $2p_{1/2}$. Для потенциала эффективного взаимодействия в виде оператора

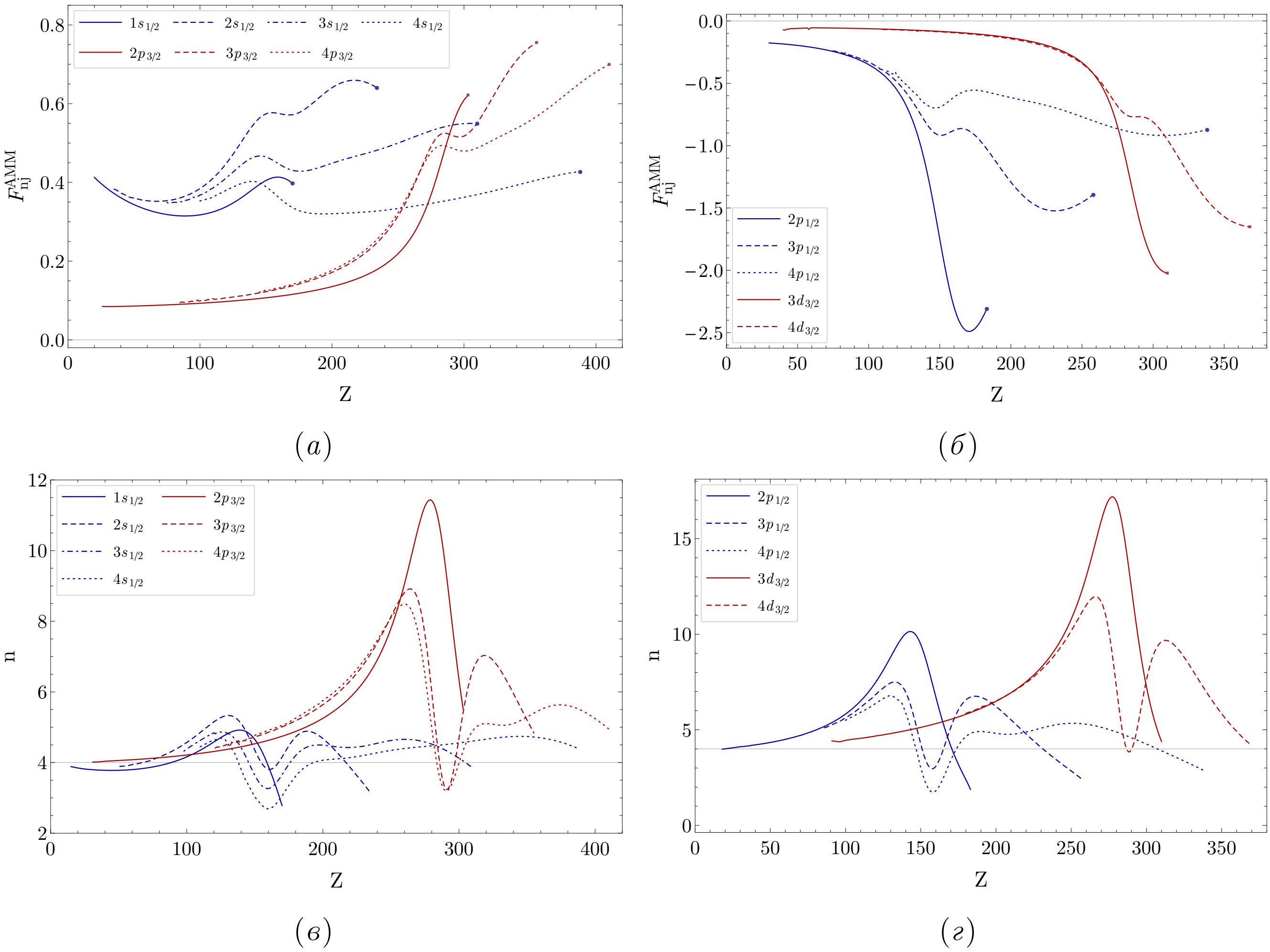
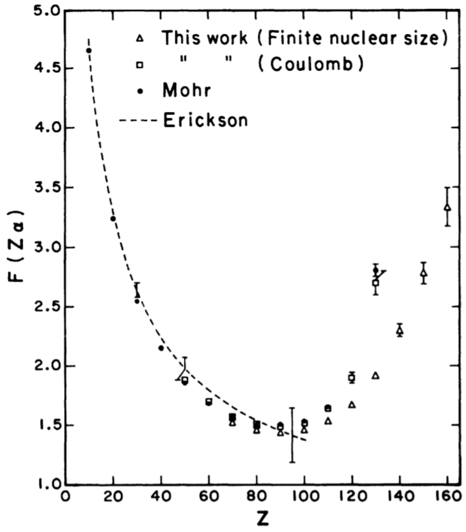


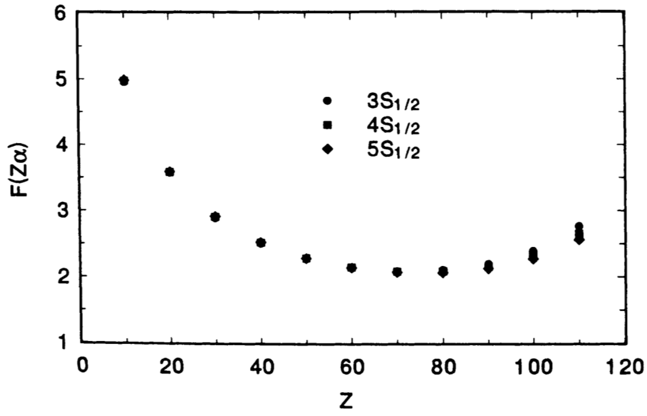
Рис. 2.5. Функция F_{nj}^{AMM} и степень роста для вклада от ΔU_{AMM} как функция заряда ядра Z для уровней с $n \leq 4$ и $j = {}^1\!/_2, {}^3\!/_2$. При этом на рис. $(а)(в)$ показаны уровни с $j = l + {}^1\!/_2$, а на рис. $(б)(г)$ уровни с $j = l - {}^1\!/_2$.

Дирака-Паули общий вид зависимости $n(Z)$ имеет такой же вид, с тем лишь отличием, что максимум при $Z \simeq 147$ более выражен. Вообще говоря, такое поведение для КЭД-эффектов достаточно естественно, поскольку при $Z\alpha > 1$ следует ожидать существенный рост непертурбативности по $Z\alpha$, а максимум скорости роста при $Z \simeq 147$ является специфической чертой ΔU_{AMM}. В частности, для точечного ядра в случае ΔU_{AMM} без учета экранировки на малых расстояниях первым уровнем, достигающим нижнего континуума как раз при $Z \simeq 147$, оказывается $2p_{1/2}$, причем с такой же (максимальной) скоростью опускания уровня на пороге нижнего континуума [29].

Теперь рассмотрим сдвиги уровней за счет ΔU_{AMM} при $Z \gg Z_{cr,1s}$, ко-



(*a*)



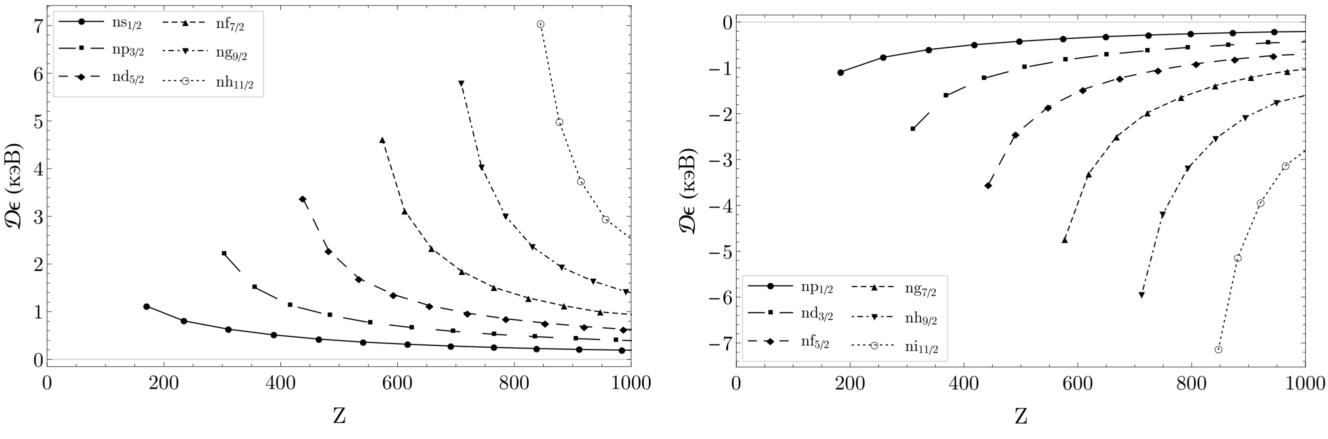
(*б*)

Рис. 2.6. (*a*) – Функция $F^{SE}_{nj}(Z\alpha)$ для уровня $1s_{1/2}$ [101]; (*б*) – Функция $F^{SE}_{nj}(Z\alpha)$ для уровней $ns_{1/2}$, $n = 3, 4, 5$. [119].

гда нижнего континуума будут достигать не только уровни $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$, но и уровни с другими квантовыми числами nlj. Так, при $Z \simeq 234$ в нижний континуум погружается уровень $2s_{1/2}$, при $Z \simeq 258$ – уровень $3p_{1/2}$ и т.д. На рис. 2.5, *а*, 2.5, *б* показана зависимость функций F^{AMM}_{nj} для сдвига, обусловленного ΔU_{AMM}, от заряда ядра для нижних уровней с $n \leq 4$ и $j \leq {}^3\!/_2$. Общее поведение функций F^{AMM}_{nj} в области $Z < 110$ достаточно плавно и для уровней с $j = l + {}^1\!/_2$ в целом повторяет поведение собственно энергетического вклада в Лэмбовский сдвиг. Так, функция F^{AMM}_{nj} для $1s_{1/2}$ уровня имеет минимум при $Z \sim 90$ (сравн. с [101], также см. рис. 2.6, *а*), для уровней $2s_{1/2}$, $3s_{1/2}$ имеет минимум при $Z \sim 70 - 80$, для уровней $np_{3/2}$ — монотонно увеличивается с ростом Z (сравн. с [118; 119], также см. рис. 2.6, *б*). Однако с ростом Z степенное поведение сдвига за счёт АММ становится более сложным.

На рис. 2.5, *в*, 2.5, *г* показано поведение скорости роста, определённой через логарифмическую производную (2.37) для тех же электронных уровней. При малых Z скорость роста $n(Z)$ соответствует $\sim Z^4$, однако с ростом Z по мере приближения уровня к границе нижнего континуума $n(Z)$ имеет резкий максимум (максимумы). Для каждой серии уровней с фиксированными значениями lj степень роста для нижнего из этих уровней (например, $1s_{1/2}$) имеет один максимум, положение которого практически соответствует значению Z_{cr}, при котором происходит падение первого уровня с таким же j в случае точечного ядра без учёта экранировки AMM (см. [29]); для следующего уровня (например, $2s_{1/2}$) — два максимума, причём первый из них практически повторяет пик в скорости роста для предыдущего уровня, а новый максимум вновь соответствует Z_{cr} в случае точечного неэкранированного ядра для следующего уровня с таким же j; и т.д. Естественно, такое немонотонное поведение имеют и функции F_{nj}^{AMM} для этих уровней, но их поведение также обладает следующей особенностью: в каждой серии уровней nlj в области больших Z величина $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ уменьшается с ростом номера уровня n при заданном Z (за исключением нижнего уровня в сериях с $\kappa < 0$), то есть при больших Z величина рассматриваемого КЭД-эффекта убывает быстрее, чем $1/n^3$.

Непосредственный интерес представляет величина радиационных эффектов у границы нижнего континуума. На рис. 2.7 показаны сдвиги кулоновских уровней nlj за счёт ΔU_{AMM}, вычисленные через (2.34) при таких Z из диапазона $Z_{cr,1s} < Z < 1000$, при которых они оказываются практически у порога нижнего континуума с $\epsilon_{nlj} \simeq -1$. В приложении A представлены значения сдвигов, вычисленные в рамках различных подходов, представленных в разделе 2.4. В каждой серии уровней с фиксированными значениями lj сдвиг уровня $\mathcal{D}\epsilon_{nlj}$ максимален при наименьшем возможном n, а по мере увеличения n (и тем самым соответствующего Z_{cr}) величина $\mathcal{D}\epsilon_{nlj}$ уменьшается по абсолютной величине. Последний эффект легко понять на основе вычислений по ТВ в соответствии с (2.35). С увеличением n радиальные ВФ $f_{nj}^{(0)}(r)$ и $g_{nj}^{(0)}(r)$ приобретают дополнительные нули, а произведение $f_{nj}^{(0)}(r)\, g_{nj}^{(0)}(r)$ становится знакопеременным и начинает осциллировать тем сильнее, чем больше n. И несмотря на тот факт, что область, в которой радиальные ВФ существенно отличны от нуля, увеличивается с ростом n, итоговое значение интегралов типа (2.35), определяющих сдвиг за счет ΔU_{AMM}, при этом уменьшается. При этом наибольший сдвиг уровней



(a) $(б)$

Рис. 2.7. Сдвиги уровней с различными nlj за счёт ΔU_{AMM}, когда они оказываются почти у порога нижнего континуума, в диапазоне $Z_{cr,1s} < Z < 1000$. Отдельные траектории соответствуют уровням с фиксированными четностью и lj. При этом на рис. (a) показаны уровни с $\kappa < 0\,,\ j = l + 1/2$, а на рис. $(б)$ — с $\kappa > 0\,,\ j = l - 1/2$.

в каждой серии nlj у границы нижнего континуума не превышает нескольких кэВ и медленно растёт с ростом lj.

Однако само по себе убывание $\mathcal{D}\epsilon_{nlj}$ с ростом n не особо примечательно, интерес представляет в первую очередь отличие $\mathcal{D}\epsilon_{nlj}$ от пертурбативного результата Z^4/n^3 для таких Z. Для этого в таб. 2.5 приведены значения $F^{AMM}_{nj}(Z_{cr}\alpha)$ для сдвига уровней на границе нижнего континуума за счёт ΔU_{AMM} в диапазоне $Z_{cr,1s} < Z < 1000$, которые монотонно убывают в каждой серии уровней nlj с ростом n и тем самым с ростом Z, что подтверждает выводы, сделанные ранее из рис. 2.5, а именно, что для больших Z верно $|F^{AMM}_{n+1\,j}(Z\alpha)| < |F^{AMM}_{nj}(Z\alpha)|$. Исключение составляют только самые нижние уровни в сериях с $\kappa = -1, -2, -3, -4$ (то есть когда $l = j - 1/2$ и $j = 1/2, 3/2, 5/2, 7/2$), для которых сначала, на первом шаге, $F^{AMM}_{nj}(Z_{cr}\alpha)$ увеличиваются, но далее также монотонно убывают. А поскольку выше было показано, что с учетом экранировки АММ поведение $F^{AMM}_{nj}(Z\alpha)$ качественно воспроизводит поведение $F_{nj}(Z\alpha)$ для суммарного сдвига нижних уровней, то следует ожидать, что в закритической области убывание с ростом Z будет иметь место и для всего собственно-энергетического вклада.

Таблица 2.5. Значения $F_{nj}(Z_{cr}\alpha)$ для сдвига за счёт ΔU_{AMM} для уровней с различными nlj на границе нижнего континуума в диапазоне $Z_{cr,1s} < Z < 1000$.

n	$ns_{1/2}$	$np_{3/2}$	$nd_{5/2}$	$nf_{7/2}$	$ng_{9/2}$	$nh_{11/2}$
1	0.398	0	0	0	0	0
2	0.641	0.624	0	0	0	0
3	0.551	0.764	0.736	0	0	0
4	0.431	0.722	0.805	0.809	0	0
5	0.338	0.626	0.775	0.827	0.851	0
6	0.272	0.529	0.706	0.797	0.844	0.886
7	0.223	0.449	0.624	0.740	0.807	0.859
8	0.187	0.384	0.549	0.671	0.754	0.814
9	0.159	0.333	0.483	0.606	0.695	0.763
10	0.137	0.292	0.427	0.544	0.638	–
11	0.120	0.258	0.381	0.490	0.583	–
12	0.106	0.229	0.342	–	–	–
n	$np_{1/2}$	$nd_{3/2}$	$nf_{5/2}$	$ng_{7/2}$	$nh_{9/2}$	$ni_{11/2}$
2	−2.309	0	0	0	0	0
3	−1.393	−2.031	0	0	0	0
4	−0.874	−1.669	−1.749	0	0	0
5	−0.601	−1.273	−1.559	−1.586	0	0
6	−0.442	−0.969	−1.318	−1.447	−1.486	0
7	−0.341	−0.754	−1.089	−1.278	−1.358	−1.414
8	−0.272	−0.604	−0.900	−1.107	−1.228	−1.296
9	−0.223	−0.496	−0.750	−0.957	−1.095	−1.186
10	−0.187	−0.416	−0.633	−0.823	−0.968	−1.071
11	−0.160	−0.355	−0.543	−0.714	−0.855	–
12	−0.138	−0.307	−0.472	−0.624	–	–

2.6. Основные выводы Главы 2

Таким образом, при наличии экранировки аномального магнитного момента между пертурбативными и непертурбативными способами учета ΔU_{AMM} в уравнении Дирака имеется малозаметная разница, медленно растущая с ростом Z (см. таб. 2.3, 2.4). Еще раз отметим, что в данном случае непертурбативность по α/π никак не связана с частичным суммированием петлевого разложения для АММ, а подразумевает эффекты, которые не могут быть в принципе получены в рамках стандартной теории возмущений. При этом в обоих случаях с самого начала учитывалась полная зависимость электронных волновых функций от $Z\alpha$.

Это означает, что в радиационных КЭД-эффектах с обменом виртуальным фотоном, к которым относится собственно-энергетический вклад, расчеты по стандартной теории возмущений с однородно заряженным ядром являются хорошим приближением даже для сверхтяжелых атомов, что полностью согласуется с общим выводом работ [122; 123].

Отметим, что учёт динамической экранировки аномального магнитного момента электрона приводит в соответствие сдвиг за счёт ΔU_{AMM} с полным собственно-энергетическим сдвигом уровня $\Delta E_{SE}(1s_{1/2}) \simeq 11.0$ кэВ при $Z = 170$ [101; 102]. Таким образом, сдвиг за счёт аномального магнитного момента в водородоподобном атоме составляет примерно десятую часть от полного собственно-энергетического вклада в радиационную поправку к энергии связи (для $1s_{1/2}$), а по абсолютной величине он оказывается сравнимым с эффектами поляризации вакуума за счёт высших порядков по α/π [94; 95].

И хотя сдвиг за счёт ΔU_{AMM} не является доминирующим вкладом в ΔE_{SE}, с учетом экранировки АММ поведение $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ для ряда уровней качественно воспроизводит поведение $F_{nj}(Z\alpha)$ для суммарного собственно-энергетического сдвига (см. рис. 2.5 и [118; 119]) в том диапазоне по Z, где для $F_{nj}(Z\alpha)$ имеются надежные результаты. Таким образом, возникает естественное предположение о том, что в закритической области убывание с ростом Z будет иметь место и для всего вклада в сдвиг уровней за счет собственной энергии, а тем самым и для других радиационных КЭД-эффектов с обменом виртуальным фотоном. В то же время, в поведении вакуумной энергии, в которой основную роль играет вклад от фермионной петли, в закритической области по Z, т.е. вне рамок теории возмущений, наблюдается существенно нелинейный рост эффекта [22—26], принципиально отличный от пертурбативного поведения, который тем самым не может быть скомпенсирован вкладом от радиационных поправок.

Глава 3

КЭД-эффекты в сверхтяжёлых ядерных квазимолекулах

3.1. Общая постановка задачи о нахождении электронных уровней в системе двух движущихся ядер

Рассматриваемые в предыдущих Главах эффекты, возникающие в сверхсильных кулоновских полях при достижении электронными уровнями порога нижнего континуума, имеют место для ядер с $Z > Z_{cr}$. Однако, ядер с таким большим зарядом в природе не обнаружено, а перспективы их синтеза весьма туманны. Тем не менее, необходимые сверхкритические кулоновские поля могут быть достигнуты (на некоторое время) при сближении двух или нескольких тяжёлых ядер (U, Th, Cm, и др.) на достаточно близкое расстояние, то есть в экспериментах по столкновению тяжёлых ионов.

В общем случае, с учётом запаздывающих потенциалов Лиенара–Вихерта, уравнение Дирака для электрона в поле двух движущихся ядер имеет следующий вид (в системе отсчёта, связанной с ядром-мишенью) [124; 125]:

$$\Big(c\vec{\alpha}\vec{p} + \beta mc^2 + W_T(\vec{r}) + \gamma\,(1 - \frac{v}{c}\,\alpha_z)\,W_P(\vec{d}(t) - \vec{r})\Big)\,\Psi(\vec{r},t) = i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t), \quad (3.1)$$

где W_T, W_P – кулоновский потенциал мишени и налетающего ядра, $\vec{d}(t) = \vec{d}(0) - \vec{v}t$ – расстояние между ядрами в момент времени t, $\vec{v} = v\,\vec{e}_z$ – скорость налетающего ядра, $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Прежде чем приступать к непосредственному решению уравнения (3.1), следует сделать ряд физических упрощений.

Во-первых, для исследования эффектов, вызванных непертурбативной перестройки вакуума при $Z > Z_{cr}$, оказывается принципиальным время существования сверхкритической конфигурации источников, которое должно быть по крайней мере сравнимым с временем жизни $\tau \approx 10^{-18} - 10^{-19}$ с метастабильных состояний, возникающих в нижнем континууме [8—13]. По этой причине в соответствующих экспериментах осуществляется столкновение сильно ионизованных атомов (в т.ч. и голых ядер) с точно подобранными энергиями, минимально необходимыми для преодоления сил кулоновского отталкивания (т.е. не более $5-10$ МэВ/нуклон), так что ядра практически останавливаются на расстоянии $\sim 10-50$ фм [14—21; 41]. Поскольку в дальнейшем будут в основном исследоваться ядерные конфигурации с $d \lesssim 50$ фм, моделирующие систему с $Z > Z_{cr}$, то движение ядер может рассматриваться на классическом уровне (в любом случае, при таких энергиях даже до начала сближения ядер и их замедления $v/c \lesssim 1/10$, и $\gamma \lesssim 1.005$, при этом значение параметра Зоммерфельда составляет $Z_1 Z_2 \alpha\, c/v > 500 \gg 1$, а учёт запаздывающих потенциалов в (3.1) даёт только поправки) [5; 10; 11; 90; 91]. Во-вторых, при $Z\alpha > 1$ электроны на нижних уровнях являются сугубо релятивистскими. Так, отношение времени оборота электрона по боровской орбите $t_e \approx \frac{2\pi\lambda/2}{c/2} \approx 0.8 \cdot 10^{-20}$ с ко времени нахождения ядер на расстоянии ~ 100 фм друг от друга $t_{coll} \approx 0.4-1.8 \cdot 10^{-19}$ с оказывается $t_{coll}/t_t \approx 10 \gg 1$ [10; 91], а значит вычисление энергии электронных уровней в такой системе может производиться в адиабатическом приближении (т.е. при фиксированном положении ядер в каждый момент времени), и можно перейти от (3.1) к стационарному уравнению Дирака. Также можно пренебречь межэлектронным взаимодействием, поскольку непертурбативная перестройка вакуума, сопровождающаяся рождением вакуумных позитронов, происходит вследствие погружения в нижний континуум незаполненных электронных уровней, а значит в идеальной ситуации в системе вообще не должно быть ни одного электрона, сталкивающиеся ядра должны быть полностью ободранными, что является экспериментально возможным (см., например, [41]).

В последующих разделах, имея ввиду перечисленные допущения, перейдём к непосредственному изучению электронных уровней и их сдвигов за счёт ΔU_{AMM} в сверхтяжёлых ядерных квазимолекулах с фиксированным межъядерным расстоянием, моделирующих сверхкритический кулоновский источник.

3.2. Методы решения двухцентрового уравнения Дирака

В отличие от случая водородоподобного иона, для решения двухцентрового уравнения Дирака с дополнительным эффективным взаимодействием ΔU_{AMM} (2.16) необходимо разработать специальную технику, поскольку уравнение Дирака не допускает необходимого разделения переменных. Задача о нахождении энергии электронных уровней в двухядерных квазимолекулах также возникает при вычислениях такого важного параметра двух сталкивающихся ядер как критическое расстояние между ядрами R_{cr}, при котором энергия связи нижнего электронного уровня составляет ровно $2mc^2$, то есть уровень достигает порога нижнего континуума. Определение R_{cr}, вообще говоря, требует решения уравнения Дирака для электрона в поле двух кулоновских центров, которое в случае низкоэнергетического столкновения тяжелых ионов может проводиться в адиабатическом приближении, для чего разработано большое количество различных методов. В частности, существует ряд методов, основанных на представлении волновой функции электрона в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) и вариационном подходе [54; 126—130], а также использующих различные способы численного интегрирования уравнения Дирака с помощью метода конечных элементов и решёточных вычислений [131—134] (наиболее полный обзор представлен в работах [54; 79; 135]). По современным оценкам [11; 58], критическое расстояние между ядрами составляет $10-50$ фм (в зависимости от заряда ядер для суммарного заряда ядер $Z_\Sigma \sim 170-190$), то есть по порядку величины совпадает с диаметром сталкивающихся тяжёлых ядер, что значительно меньше расстояний в молекулах. По этой причине большинство методов, основанных на ЛКАО и широко использующихся в квантовой химии, в этом случае плохо применимы, так как с уменьшением размеров квазимолекулы требуется значительно увеличивать число базисных элементов. Вычисления R_{cr} различными методами с использованием разложения ВФ по конечному набору базисных функций (как правило двухцентровому) и вариационного принципа представлены в работах [11; 54; 58; 77; 78; 126; 136].

В то же время, кулоновское поле, создаваемое двумя близко расположенными ядрами отличается от сферически симметричного лишь на некоторые поправки, что создаёт мотивацию к решению уравнения Дирака непосредственно в сферической системе координат, связанной с центром масс квазимолекулы, с использованием мультипольного разложения потенциала. Первые попытки применения такого подхода представлены в работах [75; 76; 137], где для вычислений энергии связи электрона в компактной двухатомной молекуле было использовано мультипольное разложение (в приближении точечных ядер). О применимости данного подхода свидетельствует близость результатов вычислений R_{cr} на основе численного решения уравнения Дирака в монопольном приближении [74; 75] к результатам, полученным другими методами, а также использование монопольного приближения для вычисления параметров резонансов, возникающих при погружении электронных уровней в область отрицательного континуума [44; 45]. Однако, по мере удаления ядер друг от друга монопольное приближение становится слишком грубым, и возникает необходимость учёта высших мультиполей в разложении кулоновского потенциала двух ядер. Так, учёт высших мультиполей оказывается принципиальным при вычислении вероятностей ионизации при столкновении тяжёлых ионов [55; 56; 138]. Выполненные в работе [46] вычисления R_{cr} с учётом нескольких первых мультипольных моментов кулоновского потенциала (вплоть до $l_{max} = 4$) хотя и уточняют результаты для монопольного приближения, но их оказывается недостаточно для наиболее тяжёлых ядер в диапазоне $Z \sim 88 - 100$. В работе [76] также представлена попытка вычисления R_{cr} для точечных ядер с учётом большого числа мультипольных моментов двухцентрового кулоновского потенциала, однако подробная информация о числе используемых мультиполей в этой работе отсутствует, а сравнение полученных в [76] значений с другими оценками показывает, что используемое в этой работе число мультиполей не может быть достаточно большим.

3.3. Двухцентровое уравнение Дирака в сферических координатах

Рассмотрим случай простейшей ядерной квазимолекулы, состоящей из двух одинаковых ядер с зарядом Z, расстояние между центрами которых составляет $d = 2a$. Выберем систему координат таким образом, чтобы центры ядер были расположены на оси z симметрично относительно начала координат в точках с координатами $(0, 0, \pm a)$. Для электрона потенциал внешнего поля в этом случае имеет вид

$$A_\mu^{(cl)}(\vec{r}\,) = \delta_{0,\mu}\left(\Phi_0(|\vec{r} - \vec{a}|) + \Phi_0(|\vec{r} + \vec{a}|)\right), \tag{3.2}$$

где $\vec{a} = a\,\vec{e_z}$, $\Phi_0(r)$ — сферически симметричный кулоновский потенциал каждого ядра по-отдельности, определяемый обычным образом через объёмную плотность электрического заряда ядра $\rho_0(r)$. С учётом того, что $F_2(0) = \alpha/2\pi \equiv \Delta g_{free}/2$, после подстановки Фурье-образа потенциала (3.2) в (2.4) и интегрирования по углам получаем

$$\mathcal{A}_\mu^{(cl)}(r) = -\frac{\Delta g_{free}}{2}\,\frac{e}{4\pi}\,V(\vec{r}\,)\,\delta_{\mu,0}, \tag{3.3}$$

$$V(\vec{r}\,) = Z\left(\frac{c(|\vec{r} - \vec{a}|)}{|\vec{r} - \vec{a}|} + \frac{c(|\vec{r} + \vec{a}|)}{|\vec{r} + \vec{a}|}\right), \tag{3.4}$$

и, как и в Главе 2, динамическая экранировка аномального магнитного момента учитывается за счёт

$$c(r) = 2\int\limits_0^\infty qdq\;\sin qr\left(-\frac{1}{Ze}\,\tilde{\Phi}_0(q)\right)\frac{1}{\pi}\frac{F_2(-q^2)}{F_2(0)}\,. \tag{3.5}$$

где $\tilde{\Phi}_0(q)$ — Фурье-образ потенциала $\Phi_0(r)$, а эффективное взаимодействие ΔU_{AMM} выражается через $V(\vec{r}\,)$ с помощью (2.32).

Потенциал кулоновского взаимодействия $W(\vec{r}\,)$ для дальнейших выкладок удобно записать в виде $W(\vec{r}\,) = -\alpha\,U(\vec{r}\,)$, где

$$U(\vec{r}\,) = \frac{4\pi}{e}\int d\vec{r}\,'\;\frac{\rho(\vec{r}\,)}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}\,, \tag{3.6}$$

и $\rho(\vec{r}\,) = \rho_0(\vec{r} - \vec{a}\,) + \rho_0(\vec{r} + \vec{a}\,)$.

Теперь из исходного уравнения Дирака (2.5) для верхней и нижней компонент дираковского биспинора $i\varphi$ и χ следует

$$\begin{aligned} &i\,(\vec{\sigma}\vec{p} + \lambda\,[\vec{\sigma}\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)])\,\varphi = (\epsilon + 1 + \alpha\,U(\vec{r}\,))\,\chi\,, \\ &i\,(\vec{\sigma}\vec{p} - \lambda\,[\vec{\sigma}\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)])\,\chi = -\,(\epsilon - 1 + \alpha\,U(\vec{r}\,))\,\varphi\,, \end{aligned} \tag{3.7}$$

Входящие в (3.7) спиноры φ, χ представляем в виде разложения по шаровым спинорам (т. е. по полному набору $\{|j, m_j, l, s\rangle\}$) следующего вида

$$\begin{aligned} \varphi &= \sum_{lm_j} \left(u_{l,m_j}\Omega^{(+)}_{l,m_j} + v_{l,m_j}\Omega^{(-)}_{l+1,m_j} \right)\,, \\ \chi &= \sum_{lm_j} \left(p_{l,m_j}\Omega^{(+)}_{l,m_j} + q_{l,m_j}\Omega^{(-)}_{l+1,m_j} \right)\,, \end{aligned} \tag{3.8}$$

где введены обозначения $\Omega^{(+)}_{l,m_j} = \Omega_{jlm_j}$ и $\Omega^{(-)}_{l+1,m} = \Omega_{jl'm_j}$, каждое слагаемое в скобках соответствует $j = l + 1/2$, $-j \le m_j \le j$, а все радиальные функции $u_{l,m_j}, v_{l,m_j}, p_{l,m_j}, q_{l,m_j}$ можно считать действительными.

Рассматриваемая двухъядерная система обладает аксиальной симметрией, поэтому сохраняется только проекция полного момента электрона на выделенное направление (ось z), и система (3.7) после подстановки (3.8) распадётся на ряд независимых подсистем, в которые будут входить только функции u, v, p, q, соответствующие одному и тому же значению m_j. Кроме того, при таком выборе системы координат $\rho(\vec{r}\,) = \rho(-\vec{r}\,)$, и $\Delta U_{AMM}(\vec{r}\,) = -\lambda\,[\vec{\gamma} \cdot \vec{p},\, V(\vec{r})]$ удовлетворяет условию $P^{-1}\Delta U_{AMM}(\vec{r}\,)P = \Delta U_{AMM}(\vec{r}\,)$, поэтому уровни также могут быть классифицированы по чётности. Таким образом, спиноры φ, χ, соответствующие решению системы уравнений (3.7) с определённой чётностью и определённым значением m_j, будем искать в виде разложения

$$\begin{aligned} \varphi &= \sum_{k=0}^{N} \left(u_k\Omega^{(+)}_{2k,m_j} + v_k\Omega^{(-)}_{2k+2,m_j} \right)\,, \\ \chi &= \sum_{k=0}^{N} \left(p_k\Omega^{(+)}_{2k+1,m_j} + q_k\Omega^{(-)}_{2k+1,m_j} \right)\,, \end{aligned} \tag{3.9}$$

для чётного случая, и

$$\varphi = \sum_{k=0}^{N} \left(u_k \Omega^{(+)}_{2k+1,m_j} + v_k \Omega^{(-)}_{2k+1,m_j} \right) ,$$
$$\chi = \sum_{k=0}^{N} \left(p_k \Omega^{(+)}_{2k,m_j} + q_k \Omega^{(-)}_{2k+2,m_j} \right) , \tag{3.10}$$

для нечётного.

В результате получаем систему уравнений на радиальные функции u_k, v_k, p_k, q_k с соответствующей чётностью уровня. Для чётного уровня с фиксированным m_j система принимает вид

$$\begin{aligned}
&\partial_r u_k - \frac{2k}{r} u_k + \lambda \sum_s \Big(\mathcal{A}_{2k;2s}(r) u_s + \mathcal{B}_{2k;2s+2}(r) v_s \Big) = \\
&\qquad = (\epsilon + 1) q_k + \alpha \sum_s \Big(\mathcal{M}_{2k+1;2s+1}(r) p_s + \mathcal{N}_{2k+1;2s+1}(r)\, q_s \Big) \\
&\partial_r v_k + \frac{2k+3}{r} v_k + \lambda \sum_s \Big(\mathcal{C}_{2k+2;2s}(r) u_s + \mathcal{D}_{2k+2;2s+2}(r) v_s \Big) = \\
&\qquad = (\epsilon + 1) p_k + \alpha \sum_s \Big(\mathcal{K}_{2k+1;2s+1}(r) p_s + \mathcal{L}_{2k+1;2s+1}(r) q_s \Big) \\
&\partial_r p_k - \frac{2k+1}{r} p_k - \lambda \sum_s \Big(\mathcal{A}_{2k+1;2s+1}(r) p_k + \mathcal{B}_{2k+1;2s+1}(r) q_s \Big) = \\
&\qquad = -(\epsilon - 1) v_k - \alpha \sum_s \Big(\mathcal{M}_{2k+2;2s}(r) u_s + \mathcal{N}_{2k+2;2s+2}(r) v_s \Big) \\
&\partial_r q_k + \frac{2k+2}{r} q_k - \lambda \sum_s \Big(\mathcal{C}_{2k+1;2s+1}(r) p_s + \mathcal{D}_{2k+1;2s+1}(r) q_s \Big) = \\
&\qquad = -(\epsilon - 1) u_k - \alpha \sum_s \Big(\mathcal{K}_{2k;2s}(r) u_s + \mathcal{L}_{2k;2s+2}(r) v_s \Big) ,
\end{aligned} \tag{3.11a}$$

а для нечётного

$$
\begin{aligned}
&\partial_r u_k - \frac{2k+1}{r} u_k + \lambda \sum_s \Big(\mathcal{A}_{2k+1;2s+1}(r) u_s + \mathcal{B}_{2k+1;2s+1}(r) v_s \Big) = \\
&\qquad = (\epsilon+1) q_k + \alpha \sum_s \Big(\mathcal{M}_{2k+2;2s}(r) p_s + \mathcal{N}_{2k+2;2s+2}(r) q_s \Big) \\
&\partial_r v_k + \frac{2k+2}{r} v_k + \lambda \sum_s \Big(\mathcal{C}_{2k+1;2s+1}(r) u_s + \mathcal{D}_{2k+1;2s+1}(r) v_s \Big) = \\
&\qquad = (\epsilon+1) p_k + \alpha \sum_s \Big(\mathcal{K}_{2k;2s}(r) p_s + \mathcal{L}_{2k;2s+2}(r) q_s \Big) \\
&\partial_r p_k - \frac{2k}{r} p_k - \lambda \sum_s \Big(\mathcal{A}_{2k;2s}(r) p_k + \mathcal{B}_{2k;2s+2}(r) q_s \Big) = \\
&\qquad = -(\epsilon-1) v_k - \alpha \sum_s \Big(\mathcal{M}_{2k+1;2s+1}(r) u_s + \mathcal{N}_{2k+1;2s+1}(r) v_s \Big) \\
&\partial_r q_k + \frac{2k+3}{r} q_k - \lambda \sum_s \Big(\mathcal{C}_{2k+2;2s}(r) p_s + \mathcal{D}_{2k+2;2s+2}(r) q_s \Big) = \\
&\qquad = -(\epsilon-1) u_k - \alpha \sum_s \Big(\mathcal{K}_{2k+1;2s+1}(r) u_s + \mathcal{L}_{2k+1;2s+1}(r) v_s \Big) ,
\end{aligned}
\tag{3.11b}
$$

где коэффициентные радиальные функции $\mathcal{K}(r), \mathcal{L}(r), \mathcal{M}(r), \mathcal{N}(r)$ определяются через матричные элементы потенциала $U(\vec{r}\,)$ по шаровым спинорам

$$
\begin{aligned}
\mathcal{K}_{l;s}(r) &= \langle \Omega^{(+)}_{l,m_j} | U(\vec{r}\,) | \Omega^{(+)}_{s,m_j} \rangle , \\
\mathcal{L}_{l;s}(r) &= \langle \Omega^{(+)}_{l,m_j} | U(\vec{r}\,) | \Omega^{(-)}_{s,m_j} \rangle , \\
\mathcal{M}_{l;s}(r) &= \langle \Omega^{(-)}_{l,m_j} | U(\vec{r}\,) | \Omega^{(+)}_{s,m_j} \rangle , \\
\mathcal{N}_{l;s}(r) &= \langle \Omega^{(-)}_{l,m_j} | U(\vec{r}\,) | \Omega^{(-)}_{s,m_j} \rangle ,
\end{aligned}
\tag{3.12}
$$

а функции $\mathcal{A}(r), \mathcal{B}(r), \mathcal{C}(r), \mathcal{D}(r)$ представляют из себя аналогичные матричные элементы коммутатора $[\vec{\sigma}\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)]$:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A}_{l;s}(r) &= i \langle \Omega^{(-)}_{l+1,m_j} | [\,\vec{\sigma}\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)] | \Omega^{(+)}_{s,m_j} \rangle , \\
\mathcal{C}_{l;s}(r) &= i \langle \Omega^{(+)}_{l-1,m_j} | [\,\vec{\sigma}\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)] | \Omega^{(+)}_{s,m_j} \rangle , \\
\mathcal{B}_{l;s}(r) &= i \langle \Omega^{(-)}_{l+1,m_j} | [\,\vec{\sigma}\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)] | \Omega^{(-)}_{s,m_j} \rangle , \\
\mathcal{D}_{l;s}(r) &= i \langle \Omega^{(+)}_{l-1,m_j} | [\,\vec{\sigma}\vec{p}\,, V(\vec{r}\,)] | \Omega^{(-)}_{s,m_j} \rangle ,
\end{aligned}
\tag{3.13}
$$

Для вычисления матричных элементов, входящих в выражения (3.12, 3.13), используем мультипольное разложение аксиально симметричных потенциалов $U(\vec{r}\,)$, $V(\vec{r}\,)$

$$
\begin{aligned}
U(\vec{r}\,) &= \sum_n U_n(r) P_n(\cos\vartheta)\,, \\
V(\vec{r}\,) &= \sum_n V_n(r) P_n(\cos\vartheta)\,.
\end{aligned}
\tag{3.14}
$$

В (3.14) мультипольные моменты $U_n(r)$ содержат в себе всю зависимость от функции распределения $\rho(\vec{r}\,)$:

$$
U_n(r) = \int d\vec{r}\,'\rho(\vec{r}\,')\,P_n(\cos\vartheta')\left(\Theta(r-r')\,\frac{r'^n}{r^{n+1}} + \Theta(r'-r)\,\frac{r^n}{r'^{n+1}}\right), \tag{3.15}
$$

а мультиполи $V_n(r)$, вообще говоря, записываются следующим образом:

$$
V_n(r) = \frac{2n+1}{2}\int\limits_0^\pi \sin\theta\, d\theta\, P_n(\cos\theta) V(\vec{r}\,)\,. \tag{3.16}
$$

Окончательно для коэффициентных функций получаем

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A}_{l;s}(r) &= \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|}\left(\partial_r - \frac{l-s}{r}\right) V_n(r)\, W_+^+(n,0;l,m_j;s,m_j), \\
\mathcal{B}_{l;s}(r) &= \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|}\left(\partial_r - \frac{l+s+1}{r}\right) V_n(r)\, W_-^+(n,0;l,m_j;s,m_j), \\
\mathcal{C}_{l;s}(r) &= \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|}\left(\partial_r + \frac{l+s+1}{r}\right) V_n(r)\, W_+^-(n,0;l,m_j;s,m_j), \\
\mathcal{D}_{l;s}(r) &= \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|}\left(\partial_r + \frac{l-s}{r}\right) V_n(r)\, W_-^-(n,0;l,m_j;s,m_j),
\end{aligned}
\tag{3.17}
$$

и

$$\mathcal{K}_{l;s}(r) = \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|} U_n(r) W_+^+(n,0;l,m_j;s,m_j),$$

$$\mathcal{M}_{l;s}(r) = \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|} U_n(r) W_+^-(n,0;l,m_j;s,m_j),$$

$$\mathcal{L}_{l;s}(r) = \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|} U_n(r) W_-^+(n,0;l,m_j;s,m_j),$$

$$\mathcal{N}_{l;s}(r) = \sum_{n=|l-s|}^{|l+s|} U_n(r) W_-^-(n,0;l,m_j;s,m_j), \tag{3.18}$$

где численные коэффициенты $W_\mp^\pm(n,0;l,m_j;s,m_j) = \langle \Omega^{(\pm)}_{l,m_j} | P_n(\cos\vartheta) | \Omega^{(\mp)}_{s,m_j} \rangle$ сводятся к комбинации $3j$-символов (приведём выражение для более общего случая $W_\mp^\pm(n, m_j - m; l, m_j; s, m) \equiv \left\langle \Omega^{(\pm)}_{l,m_j} \middle| \sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}} Y_n^{m_n}(\omega) \middle| \Omega^{(\mp)}_{s,m_j} \right\rangle$):

$$\begin{aligned}
W_\pm^+(n, m_j - m; l, m_j; s, m) =& \sqrt{(l + m_j + 1/2)(s \pm m + 1/2)}\, w_n^-(l, m_j; s, m) \pm \\
& \pm \sqrt{(l - m_j + 1/2)(s \mp m + 1/2)}\, w_n^+(l, m_j; s, m)\ , \\
W_\pm^-(n, m_j - m; l, m_j; s, m) =& \sqrt{(l - m_j + 1/2)(s \pm m + 1/2)}\, w_n^-(l, m_j; s, m) \mp \\
& \mp \sqrt{(l + m_j + 1/2)(s \mp m + 1/2)}\, w_n^+(l, m_j; s, m)\ , \\
w_n^\pm(l, m_j; s, m) =& (-1)^{m_j \pm 1/2} \begin{pmatrix} l & n & s \\ -(m_j \pm 1/2) & m_j - m & m \pm 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & n & s \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\ .
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Осталось конкретизировать выбор функции распределения объёмной плотности заряда ядер, вычислить соответствующие мультипольные моменты (3.15, 3.16), после чего можно приступать к непосредственному численному решению систем уравнений (3.11) и поиску энергии электронных уровней $1\sigma_q$ и $1\sigma_u$ методом стрельбы. Заметим, что если положить $\lambda = 0$ в системах (3.11), то они будут описывать чисто кулоновский случай, когда взаимодействие электрона за счёт ΔU_{AMM} с ядрами отсутствует. При этом коэффициентные функции $\mathcal{A}(r), \mathcal{B}(r), \mathcal{C}(r), \mathcal{D}(r)$ в системы уравнений входить не будут.

Отдельно отметим, что в пределе малых значений переданного импульса (то есть в приближении $F_2(-\vec{q}^{\,2}) \simeq F_2(0)$) мультиполи V_n будут полностью совпадать с U_n. Действительно, поскольку в этом случае интеграл в (3.5) может быть взят, в результате чего $c(r) = r\,\Phi_0(r)$, то оказывается, что $V(\vec{r}\,) = U(\vec{r}\,)$ и выражение (3.16) после взятия интеграла по θ полностью совпадает с (3.15).

3.4. Вид и поведение мультипольных моментов U_n, V_n

Описанный в разделе 3.3 метод поиска электронных уровней в двухатомных квазимолекулах в принципе позволяет рассматривать как точечные ядра, так и ядра конечных размеров с различной функцией распределения объёмной плотности заряда $\rho_0(\vec{r}\,)$. Далее рассмотрим случай точечных ядер и протяжённых ядер в виде равномерно заряженных по объёму шаров радиуса R с потенциалом вида (2.12). В случае такого распределения заряда в ядре, как будет показано далее, мультипольные моменты (3.15) могут быть вычислены аналитически, и коэффициентные функции (3.12) так же будут иметь аналитический вид, что позволяет упростить вычисления.

3.4.1. Точечные ядра

Для двухядерной молекулы, состоящей из одинаковых ядер, в силу симметрии объёмной плотности заряда $\rho(\vec{r}\,)$ и функции $V(\vec{r}\,)$ относительно замены $\vec{r} \to -\vec{r}$, а также свойств симметрии полиномов Лежандра отличными от нуля остаются мультипольные моменты (3.15, 3.16) только при чётных n. В случае двух точечных ядер $\rho_0(\vec{r}\,) = Ze\,\delta(\vec{r}\,)/4\pi$, поэтому мультиполи (3.15) принимают наиболее простой вид:

$$U_n(r) = 2Z\left(\Theta(r-a)\,\frac{a^n}{r^{n+1}} + \Theta(a-r)\,\frac{r^n}{a^{n+1}}\right). \tag{3.20}$$

Для точечного источника функция $c(r) = c_q(r)$ имеет вид (2.19), и для мультипольных моментов V_n также может быть получено аналитическое выражение. После подстановки (3.4) в (3.16), с учётом явного вида $c_q(r)$ и разложения

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{a}|}}{|\vec{r}-\vec{a}|} = \frac{i\pi}{2\sqrt{ra}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) J_{l+1/2}(kr_<) H^{(1)}_{l+1/2}(kr_>) P_l(\cos\theta)\,, \tag{3.21}$$

где $r_< = \min(r,a)$, $r_> = \max(r,a)$, а также условия ортогональности полиномов Лежандра, результат для функций (3.16) при чётных n можно записать в виде:

$$V_n(r) = 2Z\Bigg(\frac{r_<^n}{r_>^{n+1}} - \\ - \frac{2n+1}{2\sqrt{ra}} \int\limits_{4m^2}^{\infty} \frac{dQ^2}{Q^2} \frac{\mathrm{Im}\, F_2(Q^2)}{F_2(0)}\, i\, J_{n+1/2}(iQr_<)\, H^{(1)}_{n+1/2}(iQr_>)\Bigg)\,, \quad n = \text{even}\,. \tag{3.22}$$

3.4.2. Протяжённые ядра

В случае протяжённых ядер в виде равномерно заряженных по объёму шаров радиуса R объёмная плотность заряда каждого отдельного ядра имеет вид $\rho_0(\vec{r}\,) = \Theta(R-r)\, 3Ze/(16\pi^2 R^3)$, а мультипольные моменты (3.15) для чётных n задаются выражением

$$U_n(r) = \frac{6Z}{2R^3} \int\limits_{a-R}^{a+R} r'^2 dr'\, \zeta_n(r') \left(\Theta(r-r')\, \frac{r'^n}{r^{n+1}} + \Theta(r'-r)\, \frac{r^n}{r'^{n+1}}\right), \tag{3.23}$$

где

$$\zeta_n(r') = \int\limits_{-1}^{1} dx' P_n(x') \Theta\left(R - \sqrt{a^2 - r'^2 - 2ar'x'}\right) = \frac{P_{n-1}(x_0') - P_{n+1}(x_0')}{2n+1} \tag{3.24}$$

и $x_0' = (a^2 + r'^2 - R^2)/(2ar')$. С учётом того, что а интегралы (3.25) могут быть вычислены аналитически для произвольного n:

$$\int\limits_{a-R}^{a+R} dr' r'^{n+2} \zeta_n(r') = \frac{2a^n R^3}{3}\,, \qquad \int\limits_{a-R}^{a+R} dr' r'^{-n+1} \zeta_n(r') = \frac{2R^3}{3a^{n+1}}\,, \tag{3.25}$$

в итоге получаем

$$U_n(r) = \begin{cases} \dfrac{2Za^n}{r^{n+1}}\,, & r < a - R\,, \\ \dfrac{3Z}{R^3}\left(\dfrac{1}{r^{n+1}}\displaystyle\int\limits_{a-R}^{r} dr'\, r'^{\,n+2}\zeta_n(r') + r^n \displaystyle\int\limits_{r}^{a+R} dr'\, \dfrac{1}{r'^{\,n-1}}\,\zeta_n(r')\right), & |r-a| \le R\,, \\ \dfrac{2Zr^n}{a^{n+1}}\,, & r > a + R\,. \end{cases} \tag{3.26}$$

Заметим, что интегралы в промежуточной области $|r-a| \le R$ также могут быть вычислены аналитически для произвольных n с помощью методов компьютерной алгебры, так как представляют из себя интегралы от дробно-рациональных функций, однако, в отличие от интегралов (3.25) в областях $|r-a| > R$, не могут быть записаны в общем виде для произвольного n. В приложении Б приведены аналитические выражения для мультиполей (3.26) в промежуточной области для некоторых начальных n, $0 \le n \le 12$.

В случае равномерного по объёму распределения заряда внутри ядра радиуса R функция $c(r)$ имеет вид $c_N(r)$ (2.31), и с использованием выражения (3.26) мультипольные моменты V_n могут быть вычислены непосредственно по формуле (3.16).

Во внешних областях $|r-a| > R$ мультипольные моменты U_n для протяжённых ядер (3.26) имеют такое же степенное поведение, как и мультипольные моменты для точечных ядер (3.20), однако внутри ядер их поведение оказывается весьма нетривиальным. На рис. 3.1, *а*, 3.1, *б* показано поведение U_n в промежуточной области для двух близко расположенных ядер урана на расстоянии 30 фм. В отличие от мультипольных моментов точечных ядер, которые имеют острый пик в точке $r = a$, который тем острее, чем больше n, мультиполи (3.26) ведут себя гладко вместе со своими производными и, начиная с некоторого n (зависящего, вообще говоря, от Z и a), начинают осциллировать в промежуточной области. Таким образом, в случае ядер конечных размеров все коэффициентные функции $\mathcal{K}$, $\mathcal{L}$, $\mathcal{M}$, $\mathcal{N}$ (3.12), которые определяются через

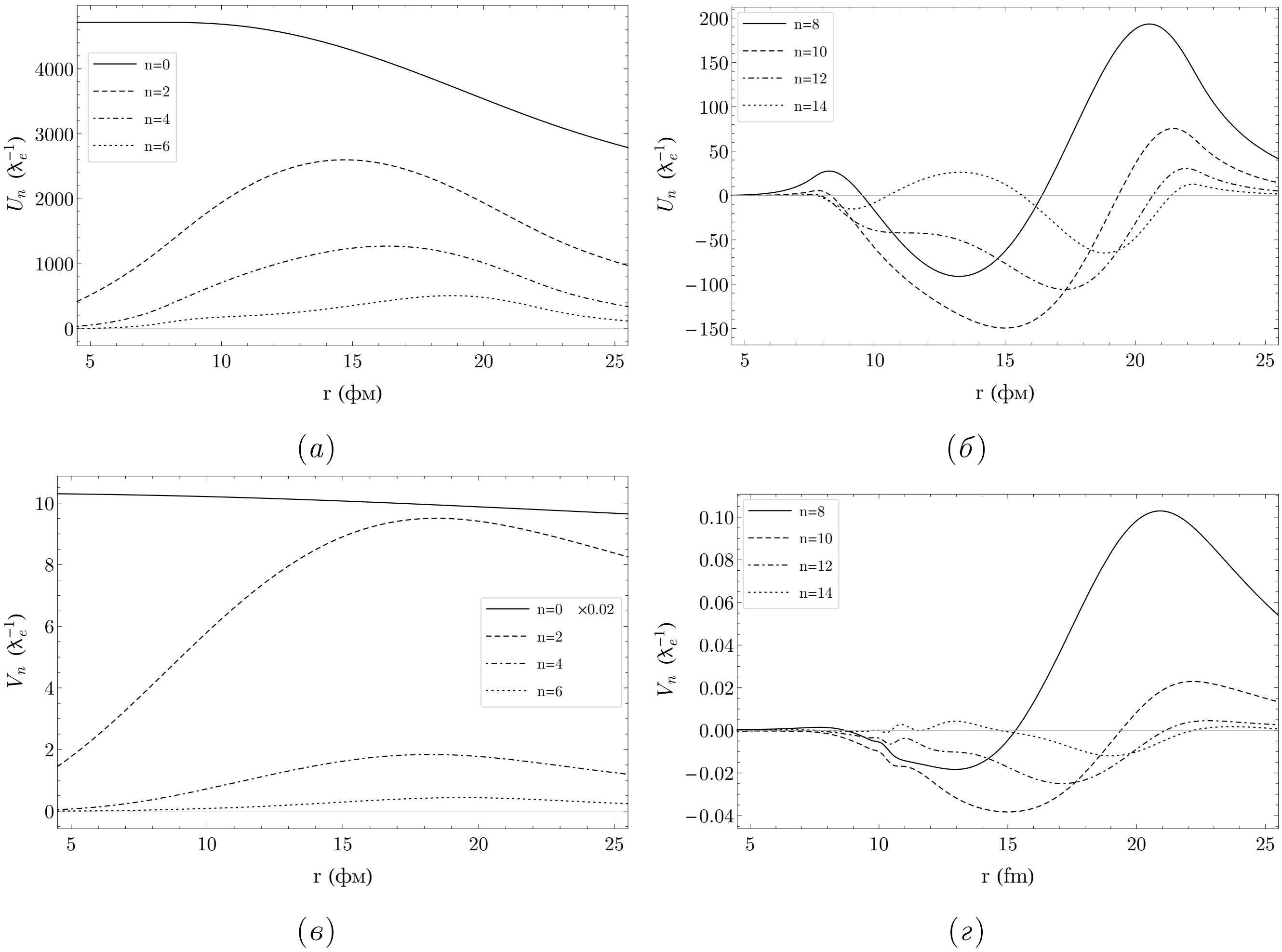


Рис. 3.1. Поведение мультипольных моментов кулоновского потенциала U_n (а),(б) и эффективного взаимодействия за счёт АММ V_n (в),(г) в области $(a-R, a+R)$ в случае двух ядер урана ($Z = 92$, $R \simeq 7.54$ фм) на расстоянии $d = 2a = 30$ фм; на рис. (а),(в) $n = 0, 2, 4, 6$ (функция V_0 для масштаба уменьшена в 50 раз), на рис. (б),(г) $n = 8, 10, 12, 14$.

кулоновские мультиполи U_n, представляют из себя непрерывные дробно-рациональные функции, которые могут быть легко вычислены для любого n.

На рис. 3.1, *в*, 3.1, *г* показано поведение мультипольных моментов V_n эффективного взаимодействия за счёт АММ в той же области, что и U_n на рис. 3.1, *а*, 3.1, *б*. По сравнению с кулоновскими мультипольными моментами U_n, функции V_n ведут себя похожим образом, однако они на несколько порядков меньше по абсолютной величине, чем U_n, и их величина быстрее убывает с ростом n. Так, функция V_0 на рис. 3.1, *в* оказывается в несколько десятков раз больше, чем V_2, в то время как для функций U_n спад амплитуды с ростом n происходит более плавно. Таким образом, для кулоновского потенциала учёт мультипольных моментов более высокого порядка должен оказаться более принципиальным, чем для эффективного потенциала взаимодействия за счёт АММ. Рассмотрение функций U_n, V_n для других параметров Z и a приводит к такому же заключению.

Использование других функций $\rho_0(\vec{r}\,)$ распределения заряда внутри ядра (например, распределение Ферми) также возможно, однако в этом случае интегралы во всех соответствующих выражениях (3.15) и (3.16) могут быть вычислены только численно, что незначительно увеличивает сложность задачи, однако рассмотрение других моделей распределения заряда в ядрах конечных размеров выходит за рамки данной работы.

3.5. Точность метода и область применимости

Как уже обсуждалось в разделе 3.2, выбор такой системы координат и разложения волновой функции электрона по сферическим гармоникам (3.9), (3.10) выглядит тем более оправданным, чем ближе симметрия системы к сферической, то есть чем меньше расстояние между ядрами. Естественно, совокупность шаровых спиноров, по которым идёт разложение, представляет из себя полный ортонормированный базис, однако при численном решении системы уравнений (3.11) всегда можно ограничиться только конечным числом уравнений и, соответственно, конечным числом гармоник в разложении волновой функции. Таким образом, в качестве параметра, характеризующего применимость данного метода для нахождения положения электронных уровней в двухатомной молекуле при заданном расстоянии между ядрами, естественным образом выступает количество используемых гармоник N в разложениях (3.9), (3.10), которые необходимы для определения положения уровня с заданной точностью. Заметим также, что с учётом чётности для заданного N разложения (3.9), (3.10) включают в себя сферические гармоники со значением $|\kappa| = 2j + 1$ вплоть до $\kappa_{max} = 2(N + 1)$, а в систему уравнений (3.11) входят мультипольные моменты (3.15), (3.16) с $n \leq l_{max} = 2\kappa_{max}$, и все они будут учитываться при дальнейших вычислениях.

Для начала рассмотрим чисто кулоновскую задачу (системы уравнений (3.11) с $\lambda = 0$). В таб. 3.1, 3.2 приведены значения энергии нижних чётного и нечётного электронных уровней ($1\sigma_g$ и $1\sigma_u$) в двухатомной молекуле U_2^{183+} для различного числа используемых при вычислении гармоник, в том числе и в монопольном приближении, при некоторых фиксированных расстояниях между ядрами. Для $d = 2a = 38.5$ фм (что соответствует критическому расстоянию в приближении точечных ядер) так же приведены результаты расчётов из работы [79], которые отличаются от полученных результатов для протяжённого ядра начиная с 4 знака после запятой, что обусловлено использованием различных моделей распределения заряда в ядрах. Отметим, что для достижения точности 10^{-5} в случае протяженных ядер при $d = 38.5$ фм достаточно $\kappa_{max} \sim 12 - 14$, однако для точечных ядер такого же порядка точности не удаётся достигнуть и при $\kappa_{max} \sim 40$, что объясняется тем фактом, что для точечных ядер конфигурация источников уже значительно отличается от сферически симметричной. В таб. 3.1 также приведены результаты экстраполяции для значений $\kappa_{max} \sim 50 - 200$, которые подтверждают медленную сходимость метода для точечных ядер. Для протяжённых ядер по мере увеличения размеров квазимолекулы количество необходимых гармоник для достижения заданной точности растёт (см. таб.3.2), однако вплоть до $d = 100$ фм остаётся приемлемым. Из приведённых данных также видно, что вычисления в монопольном приближении в этом диапазоне дают ошибку при определении энергии уровней порядка $\sim 0.05\,mc^2$. Отметим, что при учёте ΔU_{AMM} в исходных системах уравнений (3.11) точность определения энергии уровней не изменяется. Кроме того, поскольку с ростом n отношение $|V_n/V_0|$ убывает намного быстрее, чем $|U_n/U_0|$, то для определения величины сдвига уровней за счёт ΔU_{AMM} с заданной точностью будет достаточно меньшего количества гармоник, чем требуется для нахождения энергии связи чисто кулоновских уровней с той же точностью (см таб. 3.3).

Для межъядерных расстояний атомных масштабов предложенный метод уже плохо применим, поскольку требуется слишком большое количество гармоник. Так, положение уровня $1\sigma_g$ для двух ядер урана на расстоянии $d = 2/Z$ а.е. $\simeq 1150$ фм в зависимости от числа используемых гармоник для $\kappa_{max} < 50$ представлено в таб. 3.4, кроме того в таб. 3.4 представлены результаты экстраполяции для $\kappa_{max} < 200$, которые в пределах точности совпадают с результатами, вычисленными в работах [54; 58; 79; 132]. Этот факт лишний раз подтверждает правильность предложенного метода вычислений и указывает на область его применимости. А именно, метод может применяться весьма успешно для компактных ядерных квазимолекул с расстоянием между протяжёнными ядрами вплоть до $d \sim 100$ фм, чего достаточно для описания критических явлений, однако для бóльших межъядерных расстояний сходимость метода оказывается слишком медленной, что, однако, позволяет находить положение электронных уровней в точностью $\sim .5\%$.

Таблица 3.1. Положение уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ в зависимости от числа κ_{max} в используемом разложении электронной ВФ для $d = 38.5$ фм, $Z = 92$. Для сравнения приведены результаты из работы [79]

	$d = 38.5$ фм		$d = 38.5$ фм	
κ_{max}	$\epsilon_{1\sigma_g}$ (extended)	$\epsilon_{1\sigma_u}$ (extended)	$\epsilon_{1\sigma_g}$ (point-like)	$\epsilon_{1\sigma_u}$ (point-like)
1	$-\mathbf{0.8}8068503$	$-\mathbf{0.0}4750302$	$-\mathbf{0.}90914697$	$-\mathbf{0.}07115473$
4	$-\mathbf{0.92}053834$	$-\mathbf{0.08}215949$	$-\mathbf{0.9}6368764$	$-\mathbf{0.1}1864261$
6	$-\mathbf{0.92}726296$	$-\mathbf{0.08}813156$	$-\mathbf{0.9}7967341$	$-\mathbf{0.1}3289370$
8	$-\mathbf{0.928}46235$	$-\mathbf{0.089}16654$	$-\mathbf{0.98}633523$	$-\mathbf{0.13}883316$
10	$-\mathbf{0.9286}5404$	$-\mathbf{0.0893}6985$	$-\mathbf{0.98}983489$	$-\mathbf{0.14}194896$
12	$-\mathbf{0.92867}529$	$-\mathbf{0.0893}8885$	$-\mathbf{0.99}193745$	$-\mathbf{0.14}381799$
14	$-\mathbf{0.92867}675$	$-\mathbf{0.08939}018$	$-\mathbf{0.99}331635$	$-\mathbf{0.14}504198$
16	$-\mathbf{0.928677}46$	$-\mathbf{0.08939}083$	$-\mathbf{0.99}427829$	$-\mathbf{0.14}589479$
18	$-\mathbf{0.928677}86$	$-\mathbf{0.089391}18$	$-\mathbf{0.99}498089$	$-\mathbf{0.14}651701$
20	$-\mathbf{0.928677}93$	$-\mathbf{0.089391}25$	$-\mathbf{0.99}551260$	$-\mathbf{0.14}698746$
22	$-\mathbf{0.928677}95$	$-\mathbf{0.089391}26$	$-\mathbf{0.99}592651$	$-\mathbf{0.14}735339$
28			$-\mathbf{0.99}674496$	$-\mathbf{0.14}807607$
36			$-\mathbf{0.99}733608$	$-\mathbf{0.14}859715$
44			$-\mathbf{0.99}767358$	$-\mathbf{0.14}889334$
Extrap.				
50			$-\mathbf{0.997}840(03)$	$-\mathbf{0.149}040(66)$
60			$-\mathbf{0.998}030(05)$	$-\mathbf{0.149}207(67)$
80			$-\mathbf{0.998}24(252)$	$-\mathbf{0.149}39(420)$
100			$-\mathbf{0.998}35(504)$	$-\mathbf{0.149}49(279)$
140			$-\mathbf{0.998}4(6794)$	$-\mathbf{0.149}5(9134)$
200			$-\mathbf{0.998}5(4010)$	$-\mathbf{0.149}6(5401)$
Others [79]	-0.92831	-0.08908	-0.99842	-0.14956

Таблица 3.2. Положение уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ в зависимости от числа κ_{max} в используемом разложении электронной ВФ для $d = 100$ фм, $Z = 92$.

	$d = 77$ фм		$d = 100$ фм	
κ_{max}	$\epsilon_{1\sigma_g}$ (extended)	$\epsilon_{1\sigma_u}$ (extended)	$\epsilon_{1\sigma_g}$ (extended)	$\epsilon_{1\sigma_u}$ (extended)
1	$-\mathbf{0.4}6966445$	$\mathbf{0.2}6473979$	$-\mathbf{0.3}4300642$	$\mathbf{0.3}4750011$
4	$-\mathbf{0.5}0408585$	$\mathbf{0.2}3907531$	$-\mathbf{0.37}520439$	$\mathbf{0.3}2494307$
6	$-\mathbf{0.51}257777$	$\mathbf{0.23}251593$	$-\mathbf{0.3}8349391$	$\mathbf{0.3}1892112$
8	$-\mathbf{0.51}541712$	$\mathbf{0.23}031937$	$-\mathbf{0.38}651976$	$\mathbf{0.31}672205$
10	$-\mathbf{0.51}653404$	$\mathbf{0.22}945558$	$-\mathbf{0.38}785684$	$\mathbf{0.31}575183$
12	$-\mathbf{0.517}00152$	$\mathbf{0.229}09414$	$-\mathbf{0.38}850518$	$\mathbf{0.31}528208$
14	$-\mathbf{0.517}19901$	$\mathbf{0.228}94143$	$-\mathbf{0.388}83402$	$\mathbf{0.31}504405$
16	$-\mathbf{0.517}28014$	$\mathbf{0.2288}7865$	$-\mathbf{0.389}00366$	$\mathbf{0.314}92131$
18	$-\mathbf{0.5173}1141$	$\mathbf{0.2288}5441$	$-\mathbf{0.389}09093$	$\mathbf{0.314}85817$
20	$-\mathbf{0.51732}219$	$\mathbf{0.22884}603$	$-\mathbf{0.3891}3499$	$\mathbf{0.3148}2628$
22	$-\mathbf{0.51732}521$	$\mathbf{0.22884}364$	$-\mathbf{0.3891}5645$	$\mathbf{0.3148}1072$
24	$-\mathbf{0.5173257}7$	$\mathbf{0.228843}24$	$-\mathbf{0.3891}6634$	$\mathbf{0.3148}0354$
26	$-\mathbf{0.5173257}8$	$\mathbf{0.228843}21$	$-\mathbf{0.38917}052$	$\mathbf{0.31480}049$
28	$-\mathbf{0.5173257}9$	$\mathbf{0.228843}20$	$-\mathbf{0.38917}206$	$\mathbf{0.31479}937$
30			$-\mathbf{0.389172}50$	$\mathbf{0.314799}04$
32			$-\mathbf{0.389172}54$	$\mathbf{0.314799}00$

Таблица 3.3. Сдвиг уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ за счёт ΔU_{AMM} для некоторых значений числа κ_{max} в используемом разложении электронной ВФ для некоторых d и Z.

	$Z = 88$, $d = 20$ fm	
κ_{max}	$\mathcal{D}\epsilon_{1\sigma_g}$	$\mathcal{D}\epsilon_{1\sigma_u}$
1	**0.00202**849	−**0.00154**317
2	**0.00202**875	−**0.00154**161
4	**0.00204**843	−**0.00156**428
6	**0.002049**19	−**0.001565**16
8	**0.0020492**1	−**0.0015651**9

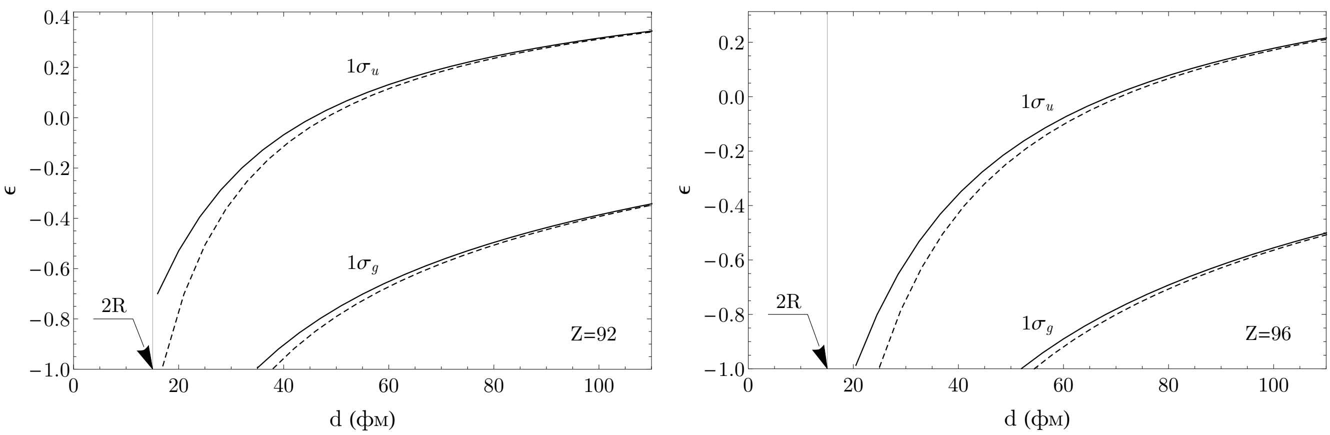
	$Z = 92$, $d = 38.5$ fm		$Z = 92$, $d = 77$ fm	
κ_{max}	$\mathcal{D}\epsilon_{1\sigma_g}$	$\mathcal{D}\epsilon_{1\sigma_u}$	$\mathcal{D}\epsilon_{1\sigma_g}$	$\mathcal{D}\epsilon_{1\sigma_u}$
1	**0.0017**8063	−**0.0012**9326	**0.0012**6513	−**0.0008**2044
2	**0.00178**522	−**0.0012**9216	**0.0012**7530	−**0.0008**1906
4	**0.00182**311	−**0.0013**3177	**0.0013**1916	−**0.0008**5585
6	**0.00182**822	−**0.00133**724	**0.00132**841	−**0.00086**363
8	**0.001829**09	−**0.001338**18	**0.00133**140	−**0.00086**616
10	**0.001829**37	−**0.001338**33	**0.001331**73	−**0.000866**79

Таблица 3.4. Положение уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ для некоторых значения числа κ_{max} в используемом разложении электронной ВФ при $d = 2/Z$ а.е. $\simeq 1150$ фм.

	$d = 2/Z \simeq 1150$ фм	
κ_{max}	$\epsilon_{1\sigma_g}$ (extended)	$\epsilon_{1\sigma_g}$ (point-like)
1	**0**.53072585	**0**.53071572
4	**0**.49199067	**0**.49196287
8	**0**.47813668	**0**.47808456
12	**0**.47433742	**0**.47426618
16	**0.47**268968	**0.47**260245
20	**0.47**180521	**0.47**170405
24	**0.47**126790	**0.47**115429
28	**0.47**091394	**0.47**078901
32	**0.47**066706	**0.47**059171
36	**0.47**048741	**0.47**034236
40	**0.47**035233	**0.47**018184
44	**0.47**024810	**0.47**009245
48	**0.47**016598	**0.46**999902
Extrap.		
50	**0.470**131(31)	**0.469**956(69)
60	**0.470**002(53)	**0.469**809(87)
80	**0.4698**6(785)	**0.4696**4(458)
100	**0.4698**0(489)	**0.4695**5(640)
140	**0.4697**(5506)	**0.4694**(6723)
200	**0.4697**(3875)	**0.4694**(0958)
Others [79]	0.4697339	0.4693303

3.6. Результаты для чисто кулоновского случая

Положение нижнего чётного $1\sigma_g$ и нижнего нечётного $1\sigma_u$ уровней в компактных двухатомных молекулах U_2^{183+} и Cm_2^{191+} в зависимости от расстояния между центрами ядер d в случае точечных и протяжённых ядер показано на рис. 3.2. Для молекулы, состоящей из двух ядер урана ($Z = 92$) уровень $1\sigma_g$ достигает границы нижнего континуума при $r = R_{cr} \simeq 34.75$ фм, в то время как нижний нечётный уровень $1\sigma_u$ остаётся в области дискретного спектра и при минимально возможном (в рамках используемой модели) расстоянии между ядрами, так как суммарный заряд ядер всё еще превышает $Z_{cr} \simeq 183$ для нижнего нечётного уровня $2p_{1/2}$ в водородоподобном ионе. В молекулах, состоящих из более тяжёлых ядер (например, $Z = 96$ на рис. 3.2, *б*), начиная с некоторого расстояния в область нижнего континуума уже погружаются два связанных электронных состояния.



(*а*) (*б*)

Рис. 3.2. Положение электронных уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ в зависимости от расстояния между центрами ядер в двухатомных молекулах U_2^{183+} (рис. (*а*)) и Cm_2^{191+} (рис. (*б*)) в чисто кулоновской задаче для точечных (штрих) и протяжённых (сплошная линия) ядер.

В таб. 3.5 приведены полученные значения R_{cr} в двухатомных молекулах для нижних чётного и нечётного уровней при различных зарядах ядер Z, а также для сравнения приведены результаты, полученные в работах [46; 58; 78]. Различия между приведёнными значениями обусловлены использованием различных моделей распределения заряда внутри ядра и значений для радиуса ядер. В работе [78] вычисления проводились с помощью вариационного метода, причём конечный радиус ядер учитывался в рамках квазиклассического приближения. В наиболее точных вычислениях [58], выполненых в рамках подхода, основанного на разложении электронной волновой функции по конечному двухцентровому базису, использовались экспериментальные значения для радиусов ядер. Результаты вычисления R_{cr} для $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$, полученные в рамках монопольного приближения в работах [74; 75], представлены там в виде графиков, поэтому соответствующие значения не приведены в таблицах. В работе [46] значения R_{cr} были получены с учётом мультипольного разложения потенциала, однако при вычислениях учитывались только гармоники вплоть до $l_{max} = 4$, чего, как следует из рассуждений в разделе 3.5 и значений в таб. 3.1, 3.2, оказывается недостаточно для определения положения уровней и R_{cr} с высокой точностью, особенно для наиболее тяжёлых ядер в данном диапазоне (см. третий столбец в таб. 3.5).

3.7. Поведение сдвигов нижних уровней за счёт ΔU_{AMM}

Величина и поведение КЭД-эффектов в процессах столкновения тяжёлых ионов подробно не исследовалась. До тех пор, пока ядра находятся на большом расстоянии друг от друга различные КЭД-поправки к энергии электронных уровней в двухатомных молекулах хорошо описываются теорией возмущений [71—73], однако по мере их приближения друг к другу происходит переход в закритическую область, когда $Z\alpha > 1$, и вопрос о применимости ТВ остаётся открытым [28; 29].

Решение систем уравнений (3.11) и сравнение полученных результатов с чисто кулоновской задачей (система (3.11) с условием $\lambda = 0$) позволяет определить величину сдвига электронных уровней в двухатомной молекуле за счёт ΔU_{AMM}. Ещё раз отметим, что такой подход является полностью непертур-

Таблица 3.5. Значения расстояний между протяжёнными ядрами в двухатомной молекуле R_{cr}, при которых уровни $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ достигают порога нижнего континуума (все значения приведены в фм).

Z	R_{cr} $(1\sigma_g)$	R_{cr} $(1\sigma_g$, other)			R_{cr} $(1\sigma_u)$	R_{cr} $(1\sigma_u$, other)
87	16.20	16.42^a	16.0^b			
88	19.69	19.89^a	19.4^b	19.88^c		
89	23.27	23.38^a	22.9^b			
90	26.96	26.96^a	26.5^b	26.88^c		
91	30.78	30.90^a	30.3^b			
92	34.75	34.72^a	34.3^b	34.38^c		
93	38.85	38.93^a	38.4^b			
94	43.10	43.10^a	42.6^b	42.52^c	15.42	
95	47.49	47.47^a	47.0^b		17.82	
96	52.01	52.06^a	51.6^b	51.07^c	20.25	
97	56.68	56.77^a	56.3^b		22.73	
98	61.48	61.56^a	61.0^b	60.08^c	25.26	25.4^d
99	66.41	66.50^a	66.0^b		27.86	
100	71.46	71.57^a	71.1^b		30.53	

^{a} работа [58], ^{b} работа [78], ^{c} работа [46], ^{d} работа [106].

батибным по $Z\alpha$, и позволяет увидеть неаналитическую зависимость по α/π, несмотря на то, что используется однопетлевое выражение для электронного формфактора $F_2(q^2)$ при выводе функций $c(r)$.

В таб. 3.6 приведены значения сдвига уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ для различных значений заряда ядер Z при фиксированном расстоянии между центрами ядер d. Пустые ячейки в таб. 3.6 означают, что при соответствующих значениях заряда ядер и расстояния между ними уровень достиг порога нижнего континуума. Как и в случае водородоподобного иона (см. Главу 2), сдвиг нижнего чётного уровня оказывается положительным, а нижнего нечётного — отрицательным, составляя при этом порядка 1 кэВ при $Z \simeq Z_{cr}$.

Рассмотрим такую важную характеристику изучаемого КЭД-эффекта, как

Таблица 3.6. Сдвиг уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ за счёт ΔU_{AMM} для различных значений суммарного заряда ядер $Z_\Sigma = 2Z$ и расстояния между ядрами d. Для сравнения приведены сдвиги уровней $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ за счёт ΔU_{AMM} для водородоподобного иона [80] (все значения приведены в кэВ).

уровень	Z_Σ	1 ядро	$d = 15.5$ фм	$d = 20$ фм	$d = 30$ фм	$d = 40$ фм
	140	0.495	0.465	0.448	0.413	0.385
	150	0.690	0.635	0.603	0.545	0.500
	160	0.912	0.828	0.779	0.692	0.626
$1\sigma_g$	170	1.118	1.017	0.953	0.840	0.755
($1s_{1/2}$)	173	—	1.068	1.002	0.883	0.793
	176	—	—	1.047	0.924	0.830
	181	—	—	—	0.987	0.888
	186	—	—	—	—	0.942
	150	−0.373	−0.329	−0.304	−0.264	−0.234
	160	−0.632	−0.546	−0.497	−0.417	−0.361
	170	−0.875	−0.763	−0.696	−0.580	−0.498
	180	−1.052	−0.937	−0.861	−0.725	−0.625
$1\sigma_u$	183	−1.090	−0.978	−0.901	−0.763	−0.659
($2p_{1/2}$)	188	—	−1.034	−0.960	−0.819	−0.711
	191	—	—	−0.989	−0.848	−0.738
	195	—	—	—	−0.883	−0.773
	199	—	—	—	−0.912	−0.802
	206	—	—	—	—	−0.843

степень роста в зависимости от Z. Сдвиг за счёт ΔU_{AMM} для атомного электрона является частью собственно энергетического вклада в Лэмбовский сдвиг, который в пертурбативной КЭД пропорционален Z^4/n^3 и обычно выражается через функцию $F_{nj}(Z\alpha)$ (2.36). Для сравнения полученных результатов для сдвигов уровней в квазимолекуле со случаем водородоподобного атома представим их также в терминах $F_{nj}^{AMM}(Z_\Sigma\alpha)$ (где Z_Σ — суммарный заряд кулоновских источников). На рис. 3.3, *а*, 3.3, *б* представлено поведение функции $F_{nj}^{AMM}(Z_\Sigma\alpha)$ для нижних чётного и нечётного уровней в симметричной квазимолекуле в за-

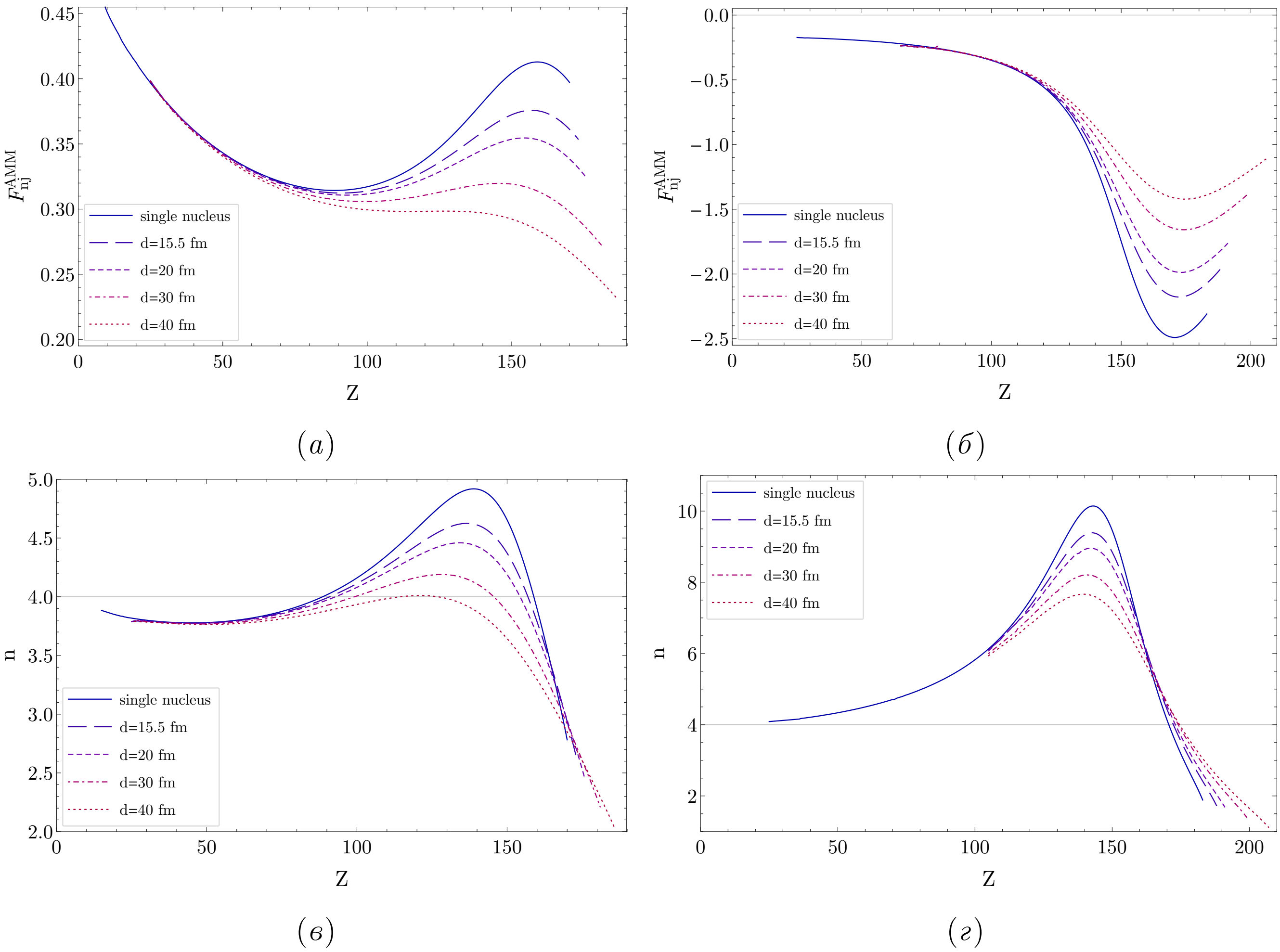


Рис. 3.3. Функция F_{nj}^{AMM} и степень роста для вклада от ΔU_{AMM} как функция суммарного заряда ядер для электронных уровней $1\sigma_g$ *(а)*,*(в)* и $1\sigma_u$ *(б)*,*(г)* в двухядерной квазимолекуле в зависимости от Z при фиксированном расстоянии между центрами ядер $r = 15.5, 20, 30, 40$ фм. Для сравнения показаны аналогичные зависимости для уровней $1s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ в водородоподобном ионе с зарядом Z из Главы 2.

висимости от Z_Σ для некоторых фиксированных межъядерных расстояний d, а также поведение $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ для случая водородоподобного атома из Главы 2. Из рис. 3.3, *а*, 3.3, *б* и значений, приведённых в таб. 3.6 следует, что в компактных квазимолекулах сдвиг за счёт ΔU_{AMM} быстро уменьшается с ростом межъядерного расстояния. Более того, сдвиг электронных уровней вблизи границы нижнего континуума также уменьшается с ростом критического заряда Z_{cr} и соответствующего критического расстояния R_{cr} (см. нижние значения в каждом столбце в таб. 3.6).

Зависимость степени роста от Z_Σ в случае двухатомной квазимолекулы, определяемой стандартным образом по логарифмической производной (2.37) для уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ при различных фиксированных значениях параметра d показана на рис. 3.3, *в*, 3.3, *г* (для сравнения также показана аналогичная зависимость в случае водородоподобного иона). В области больших Z все кривые на рис. 3.3 по мере уменьшения размеров квазимолекулы приближаются к соответствующим кривым для случая одного ядра. Как и в случае водородоподобного иона, степень роста сдвига уровня за счёт ΔU_{AMM} для компактных квазимолекул имеет немонотонное поведение с ростом Z, однако высота возникающих максимумов скорости роста при $Z \sim 140 - 150$ быстро уменьшается с увеличением размеров квазимолекулы, при этом дальнейший спад скорости роста при $Z > 150$ по мере приближения уровня к порогу нижнего континуума по-прежнему чётко выражен. Так, уже для $d = 40$ фм функция $F^{AMM}_{1\sigma_g}(Z_\Sigma\alpha)$ демонстрирует практически монотонное убывание во всём диапазоне по Z.

Поведение всех кривых на рис. 3.3 слабо зависит от числа используемых гармоник в разложении электронной волновой функции и имеет практически такой же вид и в монопольном приближении, когда учитывается только сферически симметричная часть двухцентрового потенциала (как кулоновского, так и ΔU_{AMM}), что соответствует распределению заряда по сфере диаметром d. Этот факт согласуется с замечанием в разделе 3.4 о том, что монопольный момент V_0 намного превосходит по абсолютной величине мультипольные моменты V_n более высоких порядков. В то же время, это говорит о том, что для общих свойств степенного поведения сдвигов за счёт ΔU_{AMM} наиболее принципиальным оказывается именно размер системы кулоновских источников с критическим зарядом, а не конкретная модель распределения электрического заряда в ней.

3.8. Основные выводы Главы 3

Таким образом, подход к решению двухцентрового уравнения Дирака на основе мультипольного разложения потенциалов (3.14) и электронной волновой функции по сферическим гармоникам (3.8) может успешно применяться для нахождения электронных уровней в компактных ядерных квазимолекулах ($d \lesssim 100$ фм) с высокой точностью, что позволяет исследовать процессы погружения электронных уровней в область нижнего континуума при столкновениях тяжёлых ионов не только на качественно уровне (что возможно в рамках монопольного приближения), но и на количественном. Вычисленные значения критических расстояний R_{cr} (таб. 3.5) для уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ согласуются с результатам вычислений другими методами [46; 54; 58; 74—76; 78] (где такое сравнение возможно) и уточняют их, кроме того, результаты для уровня $1\sigma_u$ существенно уточняют единственные результаты, полученные ранее в рамках монопольного приближения [74].

С использованием разработанного подхода также произведён учёт эффективного взаимодействия аномального магнитного момента электрона (2.32) с кулоновским полем сталкивающихся ядер. Проведённый в данной Главе анализ сдвигов уровней за счёт ΔU_{AMM} в зависимости от межъядерного расстояния и заряда ядер показывает, что сдвиг уровней вблизи границы нижнего континуума убывает с ростом Z_Σ и d (то есть с ростом размеров системы кулоновских источников), причём как в абсолютных единицах, так и в единицах $Z_\Sigma^4\alpha^5/\pi n^3$. При этом для такого убывания наиболее принципиальным является полный заряд системы кулоновских источников Z_Σ и её размеры, а не конкретная функция распределения плотности электрического заряда.

Заключение

Таким образом, в работе рассмотрено, как с учётом динамической экранировки аномального магнитного момента электрона на малых расстояниях ведут себя нижние электронные уровни за счет ΔU_{AMM} в сверхтяжелом протяженном ядре и компактной ядерной квазимолекуле при $Z\alpha > 1$. Получены следующие основные результаты:

1. Выведено явное выражение для потенциала ΔU_{AMM} эффективного взаимодействия динамически экранированного аномального магнитного момента электрона с кулоновским полем протяжённого ядра.

2. По итогам сравнения пертурбативных и непертурбативных результатов для водородоподобного иона установлено, что при наличии экранировки АММ между различными способами учёта ΔU_{AMM} в уравнении Дирака имеется малозаметная разница, медленно растущая с ростом Z.

3. Разработан и реализован сочетающий в себе как аналитические, так и численные методы способ решения двухцентрового уравнения Дирака, основанный на использовании разложения электронной волновой функции по сферическим гармоникам, а также мультипольного разложения кулоновского потенциала и дополнительного эффективного взаимодействия ΔU_{AMM}. Данный метод показал высокую эффективность для компактных ядерных квазимолекул с интересующими межъядерными расстояниями ($d \lesssim 100$ фм) и позволяет вычислять как положение электронных уровней, так и величину их сдвига за счёт ΔU_{AMM} с точностью не хуже $10^{-6}\ mc^2$.

4. Вычислены критические расстояния R_{cr} между одинаковыми сталкивающимися ядрами для нижних уровней $1\sigma_g$ и $1\sigma_u$ в диапазоне $Z \sim 87-100$. Полученные значения хорошо согласуются в частных случаях с результата-

там вычислений другими методами [46; 54; 58; 74—76; 78] (где это возможно) и уточняют их, кроме того, результаты для уровня $1\sigma_u$ существенно уточняют единственные полученные ранее в рамках монопольного приближения результаты [74].

5. В рамках непертурбативного по $Z\alpha$ и (частично) по α/π подхода показано, что для рассмотренных систем с критическим и закритическим зарядом кулоновских источников сдвиг электронных уровней за счёт ΔU_{AMM} вблизи границы нижнего континуума убывает с увеличением как заряда ядер, так и размеров системы кулоновских источников. Следует подчеркнуть, что в данном случае непертурбативность по α/π никак не связана с частичным суммированием петлевого разложения для формфакторов электрона, а подразумевает эффекты, которые в принципе не могут быть получены с помощью стандартной теории возмущений.

Проведённый анализ поведения сдвигов за счёт ΔU_{AMM} позволяет сделать общий вывод. Несмотря на то, что сдвиг за счёт ΔU_{AMM} не является доминирующим вкладом в собственно-энергетический сдвиг электронных уровней поведение $F_{nj}^{AMM}(Z\alpha)$ для ряда электронных уровней в водородоподобном ионе качественно воспроизводит поведение $F_{nj}(Z\alpha)$ для суммарного собственно-энергетического сдвига (см. рис. 2.5). Таким образом, возникает обоснованное предположение о том, что в закритической области убывание с ростом суммарного заряда Z_Σ и размеров системы кулоновских источников (см. рис. 2.7, *а*, 3.3, таб. 2.5, 3.6) будет иметь место и для других радиационных КЭД-эффектов с обменом виртуальным фотоном, а значит, не следует ожидать полной компенсации существенно нелинейного и принципиально отличного от предсказаний ТВ поведения вклада от фермионных петель в глубоко закритической области $Z \gg Z_{cr}$ [22—26] за счёт процессов с испусканием виртуальных фотонов.

Благодарности

В заключение автор хотел бы выразить искреннюю благодарность научному руководителю профессору К. А. Свешникову (кафедра квантовой теории и физики высоких энергий физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова) за постоянную поддержку и внимание, а также помощь как при выполнении данной работы, так и в жизненных вопросах.

Автор признателен профессору П. К. Силаеву (кафедра квантовой теории и физики высоких энергий физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова) за полезные обсуждения и замечания, а также О. В. Павловскому (кафедра квантовой статистики и теории поля физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова) за интерес к работе.

Автор хотел бы поблагодарить заведующего кафедрой квантовой теории и физики высоких энергий физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова профессора В. И. Денисова за внимательное прочтение рукописи, а также всех сотрудников и аспирантов кафедры квантовой теории и физики высоких энергий физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова за рабочую атмосферу и доброжелательность.

Отдельную благодарность автор хотел бы выразить своим родителям А. П. Роенко и В. Н. Роенко, а также всем своим друзьям, родным и близким за моральную поддержку во время выполнения работы и понимание.

Приложение А

Сдвиги уровней вблизи порога нижнего континуума

Таблица А.1. Сдвиги уровней nlj с чётным $l = 0$ и $j = 1/2$ ($ns_{1/2}$) у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
170	1.120	1.118	617	0.317	0.318
234	0.810	0.808	691	0.279	0.280
310	0.635	0.635	765	0.251	0.251
388	0.514	0.514	838	0.227	0.228
465	0.428	0.426	911	0.207	0.209
541	0.363	0.363	984	0.193	0.194

Таблица А.2. Сдвиги уровней nlj с нечётным $l = 1$ и $j = 1/2$ ($np_{1/2}$) у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
183	−1.090	−1.090	649	−0.318	−0.318
258	−0.770	−0.770	724	−0.282	−0.283
338	−0.601	−0.600	798	−0.253	−0.255
418	−0.496	−0.494	872	−0.234	−0.233
497	−0.422	−0.420	945	−0.215	−0.215
574	−0.362	−0.363			

Таблица А.3. Сдвиги уровней nlj с чётным $l = 2$ и $j = {}^3\!/_2$ ($nd_{3/2}$) у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
303	2.216	2.212	695	0.590	0.590
355	1.515	1.512	765	0.526	0.527
416	1.140	1.137	835	0.476	0.477
484	0.927	0.925	905	0.436	0.437
553	0.772	0.771	974	0.400	0.401
624	0.667	0.668			

Таблица А.4. Сдвиги уровней nlj с нечётным $l = 1$ и $j = {}^3\!/_2$ ($np_{3/2}$) у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
310	−2.340	−2.338	650	−0.706	−0.709
368	−1.611	−1.610	722	−0.624	−0.623
435	−1.228	−1.227	793	−0.550	−0.554
506	−0.991	−0.990	864	−0.500	−0.501
578	−0.826	−0.826	934	−0.453	−0.455

Таблица А.5. Сдвиги уровней nlj с чётным $l = 2$ и $j = {}^5\!/_2$ ($nd_{5/2}$) у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
438	3.382	3.377	720	0.970	0.970
482	2.290	2.285	786	0.851	0.851
534	1.701	1.697	853	0.761	0.761
593	1.362	1.360	920	0.689	0.690
655	1.129	1.128	987	0.631	0.633

Таблица А.6. Сдвиги уровней nlj с нечётным $l = 3$ и $j = {}^5\!/_2$ $(nf_{5/2})$ у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
443	−3.546	−3.543	741	−1.044	−1.045
491	−2.441	−2.440	808	−0.909	−0.908
548	−1.854	−1.853	876	−0.806	−0.808
609	−1.469	−1.469	944	−0.728	−0.729
674	−1.220	−1.221			

Таблица А.7. Сдвиги уровней nlj с чётным $l = 4$ и $j = {}^7\!/_2$ $(ng_{7/2})$ у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
574	4.626	4.619	765	1.513	1.512
612	3.130	3.123	824	1.290	1.289
658	2.333	2.328	885	1.124	1.124
710	1.851	1.847	947	0.994	0.996

Таблица А.8. Сдвиги уровней nlj с нечётным $l = 3$ и $j = {}^7\!/_2$ $(nf_{7/2})$ у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
577	−4.736	−4.733	781	−1.642	−1.643
619	−3.311	−3.310	841	−1.386	−1.386
668	−2.499	−2.496	904	−1.204	−1.207
722	−1.976	−1.977	968	−1.066	−1.067

Таблица А.9. Сдвиги уровней nlj с чётным $l = 4$ и $j = {}^9\!/_2$ у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
709	5.801	5.792	881	1.934	1.932
744	4.039	4.029	935	1.642	1.640
785	3.013	3.007	991	1.421	1.421
831	2.368	2.363			

Таблица А.10. Сдвиги уровней nlj с нечётным $l = 5$ и $j = {}^9/_2$ у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
712	−5.952	−5.950	842	−2.544	−2.542
749	−4.197	−4.196	894	−2.080	−2.081
793	−3.194	−3.191	949	−1.754	−1.754

Таблица А.11. Сдвиги уровней nlj с чётным $l = 6$ и $j = {}^{11}/_2$ у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
845	7.043	7.032	914	3.733	3.725
877	4.984	4.974	956	2.943	2.936

Таблица А.12. Сдвиги уровней nlj с нечётным $l = 5$ и $j = {}^{11}/_2$ у границы нижнего континуума.

Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ	Z	$\mathcal{D}\epsilon^{\mathrm{PT}}$, кэВ	$\mathcal{D}\epsilon$, кэВ
847	−7.141	−7.138	921	−3.938	−3.934
881	−5.135	−5.134	965	−3.128	−3.124

Приложение Б

Аналитические выражения для мультипольных моментов U_n

В промежуточной области $|r - a| \le R$ мультипольные моменты кулоновского потенциала двух ядер (3.26) имеют следующий аналитический вид (для $n < 12$):

$$U_0(r) = \frac{2Z}{16drR^3}\Big(d^4 - 4d^3r - 4d(r-2R)(r+R)^2 + \\ + (r-R)^3(r+3R) + 6d^2\left(r^2 - R^2\right)\Big) \quad (Б.1)$$

$$U_2(r) = \frac{2Z}{256a^3r^3R^3}\Big(5a^8 + 128a^5R^3 - 20a^2\left(r^2-R^2\right)^3 - 20a^6\left(r^2+3R^2\right) + \\ + (r-R)^5\left(5r^3 + 25r^2R + 15rR^2 + 3R^3\right) + 30a^4\left(r^4 + 2r^2R^2 - 3R^4\right)\Big) \quad (Б.2)$$

$$U_4(r) = \frac{2Z}{2048a^5r^5R^3}\Big(21a^{12} + 1024a^9R^3 - 54a^2\left(r^2-R^2\right)^5 - 54a^{10}\left(r^2+7R^2\right) + \\ + 27a^4\left(r^2-R^2\right)^3\left(r^2+7R^2\right) + 27a^8\left(r^4 + 10r^2R^2 - 35R^4\right) + \\ + (r-R)^7\left(21r^5 + 147r^4R + 210r^3R^2 + 142r^2R^3 + 49rR^4 + 7R^5\right) + \\ + 12a^6\left(r^6 + 9r^4R^2 - 45r^2R^4 + 35R^6\right)\Big) \quad (Б.3)$$

$$U_6(r) = \frac{2Z}{65536a^7r^7R^3}\Big(429a^{16} + 32768a^{13}R^3 - 936a^2\left(r^2-R^2\right)^7 - \\ - 936a^{14}\left(r^2+11R^2\right) + 364a^4\left(r^2-R^2\right)^5\left(r^2+11R^2\right) + \\ + 364a^{12}\left(r^4 + 18r^2R^2 - 99R^4\right) + 104a^6\left(r^2-R^2\right)^3\left(r^4 + 18r^2R^2 - 99R^4\right) + \\ + 104a^{10}\left(r^6 + 21r^4R^2 - 189r^2R^4 + 231R^6\right) + \\ + (r-R)^9\big(429r^7 + 3861r^6R + 9009r^5R^2 + 10889r^4R^3 + 7911r^3R^4 + 3519r^2R^5 + \\ + 891rR^6 + 99R^7\big) + 78a^8\left(r^8 + 20r^6R^2 - 210r^4R^4 + 420r^2R^6 - 231R^8\right)\Big) \quad (Б.4)$$

$$U_8(r) = \frac{2Z}{524288a^9r^9R^3}\Big(2431a^{20} + 262144a^{17}R^3 - 4862a^2\left(r^2 - R^2\right)^9 -$$

$$- 4862a^{18}\left(r^2 + 15R^2\right) + 1683a^4\left(r^2 - R^2\right)^7\left(r^2 + 15R^2\right) +$$

$$+ 1683a^{16}\left(r^4 + 26r^2R^2 - 195R^4\right) + 408a^6\left(r^2 - R^2\right)^5\left(r^4 + 26r^2R^2 - 195R^4\right) +$$

$$+ 408a^{14}\left(r^6 + 33r^4R^2 - 429r^2R^4 + 715R^6\right) +$$

$$+ 238d^8\left(r^2 - R^2\right)^3\left(r^6 + 33r^4R^2 - 429r^2R^4 + 715R^6\right) +$$

$$+ 238a^{12}\left(r^8 + 36r^6R^2 - 594r^4R^4 + 1716r^2R^6 - 1287R^8\right) +$$

$$+ (r - R)^{11}\big(2431r^9 + 26741r^8R + 87516r^7R^2 + 155180r^6R^3 + 175450r^5R^4 +$$

$$+ 133782r^4R^5 + 69212r^3R^6 + 23452r^2R^7 + 4719rR^8 + 429R^9\big) +$$

$$+ 204a^{10}\left(r^{10} + 35r^8R^2 - 630r^6R^4 + 2310r^4R^6 - 3003r^2R^8 + 1287R^{10}\right)\Big) \quad \text{(Б.5)}$$

$$U_{10}(r) = \frac{2Z}{8388608a^{11}r^{11}R^3}\Big(29393a^{24} + 4194304a^{21}R^3 - 55692a^2\left(r^2 - R^2\right)^{11} -$$

$$- 55692a^{22}\left(r^2 + 19R^2\right) + 18018a^4\left(r^2 - R^2\right)^9\left(r^2 + 19R^2\right) +$$

$$+ 18018a^{20}\left(r^4 + 34r^2R^2 - 323R^4\right) + 4004a^6\left(r^2 - R^2\right)^7\left(r^4 + 34r^2R^2 - 323R^4\right) +$$

$$+ 4004a^{18}\left(r^6 + 45r^4R^2 - 765r^2R^4 + 1615R^6\right) +$$

$$+ 2079a^8\left(r^2 - R^2\right)^5\left(r^6 + 45r^4R^2 - 765r^2R^4 + 1615R^6\right) +$$

$$+ 2079a^{16}\big(r^8 + 52r^6R^2 - 1170r^4R^4 + 4420r^2R^6 - 4199R^8\big) +$$

$$+ 1512a^{10}\left(r^2 - R^2\right)^3\left(r^8 + 52r^6R^2 - 1170r^4R^4 + 4420r^2R^6 - 4199R^8\right) +$$

$$+ 216a^{14}\left(7r^{10} + 385r^8R^2 - 10010r^6R^4 + 50050r^4R^6 - 85085r^2R^8 + 46189R^{10}\right) +$$

$$+ (r - R)^{13}\big(29393r^{11} + 382109r^{10}R + 1616615r^9R^2 + 3812195r^8R^3 + 5909930r^7R^4 +$$

$$+ 6450626r^6R^5 + 5093998r^5R^6 + 2916550r^4R^7 + 1186549r^3R^8 + 326417r^2R^9 +$$

$$+ 54587rR^{10} + 4199R^{11}\big) + 196a^{12}\big(7r^{12} + 378r^{10}R^2 - 10395r^8R^4 + 60060r^6R^6 -$$

$$- 135135r^4R^8 + 131274r^2R^{10} - 46189R^{12}\big)\Big) \quad \text{(Б.6)}$$

$$U_{12}(r) = \frac{2Z}{67108864a^{13}r^{13}R^3}\Big(185725a^{28}+33554432a^{25}R^3-339150a^2\left(r^2-R^2\right)^{13}-$$
$$-339150a^{26}\left(r^2+23R^2\right)+104975a^4\left(r^2-R^2\right)^{11}\left(r^2+23R^2\right)+$$
$$+104975a^{24}\left(r^4+42r^2R^2-483R^4\right)+$$
$$+22100a^6\left(r^2-R^2\right)^9\left(r^4+42r^2R^2-483R^4\right)+$$
$$+22100a^{22}\left(r^6+57r^4R^2-1197r^2R^4+3059R^6\right)+$$
$$+10725a^8\left(r^2-R^2\right)^7\left(r^6+57r^4R^2-1197r^2R^4+3059R^6\right)+$$
$$+2145a^{20}\left(5r^8+340r^6R^2-9690r^4R^4+45220r^2R^6-52003R^8\right)+$$
$$+1430a^{10}\left(r^2-R^2\right)^5\left(5r^8+340r^6R^2-9690r^4R^4+45220r^2R^6-52003R^8\right)+$$
$$+7150a^{18}\left(r^{10}+75r^8R^2-2550r^6R^4+16150r^4R^6-33915r^2R^8+22287R^{10}\right)+$$
$$+5775a^{12}\left(r^2-R^2\right)^3\Big(r^{10}+75r^8R^2-2550r^6R^4+16150r^4R^6-33915r^2R^8+$$
$$+22287R^{10}\Big)+1925a^{16}\Big(3r^{12}+234r^{10}R^2-8775r^8R^4+66300r^6R^6-188955r^4R^8+$$
$$+226746r^2R^{10}-96577R^{12}\Big)+(r-R)^{15}\Big(185725r^{13}+2785875r^{12}R+14486550r^{11}R^2+$$
$$+42840682r^{10}R^3+84878055r^9R^4+121292265r^8R^5+129590660r^7R^6+$$
$$+105101820r^6R^7+64747611r^5R^8+29914645r^4R^9+10067910r^3R^{10}+2335290r^2R^{11}+$$
$$+334305rR^{12}+22287R^{13}\Big)+1800a^{14}\Big(3r^{14}+231r^{12}R^2-9009r^{10}R^4+75075r^8R^6-$$
$$-255255r^6R^8+415701r^4R^{10}-323323r^2R^{12}+96577R^{14}\Big)\Big) \quad (\text{Б}.7)$$

Список литературы

1. *Pomeranchuk I.*, *Smorodinsky Y.* On the energy levels of systems $Z > 137$ // J. Phys. USSR. — 1945. — T. 9. — C. 97.

2. *Gershtein S. S.*, *Zel'dovich Y. B.* The critical charge of the nucleus and the vacuum polarization // Lettere al Nuovo Cimento. — 1969. — T. 1, № 16. — C. 835—836. — DOI: 10.1007/BF02753979.

3. *Gershtein S. S.*, *Zeldovich Y. B.* Positron Production during the Mutual Approach of Heavy Nuclei and the Polarization of the Vacuum // Zh. Eksp. Teor. Fiz. — 1969. — T. 57. — C. 654—659.

4. *Pieper W.*, *Greiner W.* Interior electron shells in superheavy nuclei // Z. Phys. — 1969. — T. 218, № 4. — C. 327—340. — DOI: 10.1007/BF01670014.

5. *Gershtein S. S.*, *Popov V. S.* Spontaneous production of positrons in collisions of heavy nuclei // Lettere al Nuovo Cimento. — 1973. — T. 6, № 14. — C. 593—596. — DOI: 10.1007/BF02827078.

6. *Зельдович Я. Б.*, *Попов В. С.* Электронная структура сверхтяжелых атомов // УФН. — 1971. — Т. 105. — С. 403. — DOI: 10.3367/UFNr.0105.197111b.0403.

7. *Rafelski J.*, *Müller B.*, *Greiner W.* The charged vacuum in over-critical fields // Nucl. Phys. B. — 1974. — T. 68, № 2. — C. 585—604. — DOI: 10.1016/0550-3213(74)90333-2.

8. *Greiner W.*, *Müller B.*, *Rafelski J.* Quantum Electrodynamics of Strong Fields. — 2nd. — Berlin : Springer, 1985.

9. *Greiner W.*, *Reinhardt J.* Quantum electrodynamics. — 3rd ed. — Springer, Berlin, 2003. — DOI: 10.1007/978-3-662-05246-4.

10. *Гриб А. А.*, *Мамаев С. Г.*, *Мостепаненко В. М.* Кватновые Эффекты в интенсивных внешних полях. — Москва : Атомиздат, 1980. — С. 296.

11. *Popov V. S.* Critical charge in quantum electrodynamics // Phys. At. Nucl. — 2001. — Т. 64, № 3. — С. 367—392. — DOI: 10.1134/1.1358463.

12. *Rafelski J.* [и др.]. Probing QED Vacuum with Heavy Ions // New Horizons in Fundamental Physics. — Springer, 2017. — С. 211—251. — (FIAS Interdisciplinary Science Series). — DOI: 10.1007/978-3-319-44165-8_17.

13. *Ruffini R.*, *Vereshchagin G.*, *Xue S.-S.* Electron–positron pairs in physics and astrophysics: From heavy nuclei to black holes // Phys. Rept. — 2010. — Т. 487, № 1—4. — С. 1—140. — DOI: 10.1016/j.physrep.2009.10.004.

14. *Backe H.* [и др.]. Observation of Positron Creation in Superheavy Ion-Atom Collision Systems // Phys. Rev. Lett. — 1978. — Т. 40, вып. 22. — С. 1443—1446. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.40.1443.

15. *Kozhuharov C.* [и др.]. Positrons from 1.4-GeV Uranium-Atom Collisions // Phys. Rev. Lett. — 1979. — Т. 42, вып. 6. — С. 376—379. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.42.376.

16. *Schweppe J.* [и др.]. Observation of a Peak Structure in Positron Spectra from U+Cm Collisions // Phys. Rev. Lett. — 1983. — Т. 51, вып. 25. — С. 2261—2264. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.51.2261.

17. *Clemente M.* [и др.]. Narrow positron lines from U-U and U-Th collisions // Phys. Lett. B. — 1984. — Т. 137, № 1. — С. 41—46. — DOI: 10.1016/0370-2693(84)91102-X.

18. *Cowan T.* [и др.]. Anomalous Positron Peaks from Supercritical Collision Systems // Phys. Rev. Lett. — 1985. — Т. 54, вып. 16. — С. 1761—1764. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.54.1761.

19. *Salabura P.* [и др.]. Correlated e^+e^- peaks observed in heavy-ion collisions // Phys. Lett. B. — 1990. — Т. 245, № 2. — С. 153—160. — DOI: 10.1016/0370-2693(90)90126-Q.

20. *Koenig I.* [и др.]. Investigations of correlated e^+e^- emission in heavy-ion collisions near the Coulomb barrier // Z. Phys. A - Hadrons and Nuclei. — 1993. — Т. 346, № 2. — С. 153—168. — DOI: 10.1007/BF01294631.

21. *Ahmad I.* [и др.]. Search for Monoenergetic Positron Emission from Heavy-Ion Collisions at Coulomb-Barrier Energies // Phys. Rev. Lett. — 1997. — Т. 78, вып. 4. — С. 618—621. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.618.

22. *Воронина Ю. С.*, *Давыдов А. С.*, *Свешников К. А.* Вакуумные эффекты для одномерного “атома водорода” при $Z > Z_{cr}$ // ТМФ. — 2017. — Т. 193, № 2. — С. 276—308. — DOI: 10.4213/tmf9325.

23. *Davydov A.*, *Sveshnikov K.*, *Voronina Y.* Vacuum energy of one-dimensional supercritical Dirac–Coulomb system // Int. J. Mod. Phys. A. — 2017. — Т. 32, № 11. — С. 1750054. — DOI: 10.1142/S0217751X17500543.

24. *Воронина Ю.*, *Давыдов А.*, *Свешников К.* Непертурбативные эффекты поляризации вакуума для квазиодномерной системы Дирака-Кулона при $Z > Z_{cr}$ // Письма в ЭЧАЯ. — 2017. — Т. 14, № 5. — С. 464—486.

25. *Davydov A.*, *Sveshnikov K.*, *Voronina Y.* Nonperturbative vacuum polarization effects in two-dimensional supercritical Dirac–Coulomb system I. Vacuum charge density // Int. J. Mod. Phys. A. — 2018. — Т. 33, № 01. — С. 1850004. — DOI: 10.1142/S0217751X18500045.

26. *Davydov A.*, *Sveshnikov K.*, *Voronina Y.* Nonperturbative vacuum polarization effects in two-dimensional supercritical Dirac–Coulomb system II. Vacuum energy // Int. J. Mod. Phys. A. — 2018. — Т. 33, № 01. — С. 1850005. — DOI: 10.1142/S0217751X18500057.

27. *Barut A. O.*, *Kraus J.* Relativistic Formula for the Magnetic Part of the Lamb Shift and Its Z Dependence // Phys. Scr. — 1982. — Т. 25, № 4. — С. 561. — DOI: 10.1088/0031-8949/25/4/010.

28. *Свешников К. А., Хомовский Д. И.* Непертурбативные эффекты радиационного вклада в магнитный момент электрона в водородоподобных атомах // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. — 2012. — № 5. — С. 18.

29. *Свешников К. А., Хомовский Д. И.* Эффекты больших Z при учёте радиационной компоненты магнитного момента электрона в водородоподобных атомах // Письма в ЭЧАЯ. — 2013. — Т. 10, № 2. — С. 187—206.

30. *Свешников К. А., Хомовский Д. И.* Пертурбативность и непертурбативность в эффектах больших Z для водородоподобных атомов // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3. Физ. Астрон. — 2016. — № 5. — С. 3.

31. *Itzykson C., Zuber J.-B.* Quantum Field Theory. — McGraw-Hill, New York, 1980.

32. *Barut A. O., Kraus J.* Resonances in e^+e^- system due to anomalous magnetic moment interactions // Phys. Lett. B. — 1975. — Т. 59, № 2. — С. 175—178. — DOI: 10.1016/0370-2693(75)90696-6.

33. *Barut A. O., Kraus J.* Solution of the Dirac equation with Coulomb and magnetic moment interactions // J. Math. Phys. — 1976. — Т. 17, № 4. — С. 506—508. — DOI: 10.1063/1.522932.

34. *Barut A. O., Kraus J.* Form-factor corrections to superpositronium and short-distance behavior of the magnetic moment of the electron // Phys. Rev. D. — 1977. — Т. 16, вып. 1. — С. 161—164. — DOI: 10.1103/PhysRevD.16.161.

35. *Barut A. O., Komy S.* Derivation of Nonperturbative Relativistic Two-Body Equations from the Action Principle in Quantumelectrodynamics // Fortschritte der Physik/Progress of Physics. — 1985. — Т. 33, № 6. — С. 309—318. — DOI: 10.1002/prop.2190330602.

36. *Geiger K.* [и др.]. Magnetic moment interactions in the $e^- - e^+$ system // Z. Phys. A - Atomic Nuclei. — 1988. — Т. 329, № 1. — С. 77—88. — DOI: 10.1007/BF01294818.

37. *Barut A. O.* The electron-positron system at short distances // Z. Phys. A - Atomic Nuclei. — 1990. — Т. 336, № 3. — С. 317—320. — DOI: 10.1007/BF01292863.

38. *Evans S.*, *Rafelski J.* Vacuum stabilized by anomalous magnetic moment // Phys. Rev. D. — 2018. — Т. 98, вып. 1. — С. 016006. — DOI: 10.1103/PhysRevD.98.016006.

39. *Lautrup B.* The short distance behaviour of the anomalous magnetic moment of the electron // Phys. Lett. B. — 1976. — Т. 62, № 1. — С. 103—104. — DOI: 10.1016/0370-2693(76)90060-5.

40. *Gumberidze A.* [и др.]. Atomic physics with highly-charged heavy ions at the GSI future facility: The scientific program of the SPARC collaboration // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2005. — Т. 233, № 1—4. — С. 28—30. — DOI: 10.1016/j.nimb.2005.03.082.

41. *Gumberidze A.* [и др.]. X-ray spectroscopy of highly-charged heavy ions at FAIR // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2009. — Т. 267, № 2. — С. 248—250. — DOI: 10.1016/j.nimb.2008.10.079.

42. *Yang J.* [и др.]. High Intensity heavy ion Accelerator Facility (HIAF) in China // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2013. — Т. 317. — С. 263—265. — DOI: 10.1016/j.nimb.2013.08.046.

43. *Kekelidze V.* [и др.]. Project NICA at JINR // Nucl. Phys. A. — 2013. — Т. 904/905. — С. 945c—948c. — DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2013.02.171.

44. *Ackad E.*, *Horbatsch M.* Numerical calculation of supercritical Dirac resonance parameters by analytic continuation methods // Phys. Rev. A. — 2007. — Т. 75, № 2. — С. 022508. — DOI: 10.1103/PhysRevA.75.022508.

45. *Ackad E.*, *Horbatsch M.* Calculation of electron-positron production in supercritical uranium-uranium collisions near the Coulomb barrier // Phys. Rev. A. — 2008. — Т. 78, № 6. — С. 062711. — DOI: 10.1103/PhysRevA.78.062711.

46. *Marsman A.*, *Horbatsch M.* Calculation of supercritical Dirac resonance parameters for heavy-ion systems from a coupled-differential-equation approach // Phys. Rev. A. — 2011. — Т. 84, № 3. — С. 032517. — DOI: 10.1103/PhysRevA.84.032517.

47. *Кулешов В. М.* [и др.]. Кулоновская задача с зарядом ядра $Z > Z_{cr}$ // УФН. — 2015. — Т. 185, № 8. — С. 845—852. — DOI: 10.3367/UFNr.0185.201508d.0845.

48. *Godunov S. I.*, *Machet B.*, *Vysotsky M. I.* Resonances in positron scattering on a supercritical nucleus and spontaneous production of e^+e^- pairs // Eur. Phys. J. C. — 2017. — Т. 77, № 11. — С. 782. — DOI: 10.1140/epjc/s10052-017-5325-4.

49. *Shabad A. E.*, *Usov V. V.* Modified Coulomb Law in a Strongly Magnetized Vacuum // Phys. Rev. Lett. — 2007. — Т. 98. — С. 180403. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.180403.

50. *Shabad A. E.*, *Usov V. V.* Electric field of a point-like charge in a strong magnetic field and ground state of a hydrogen-like atom // Phys. Rev. D. — 2008. — Т. D77. — С. 025001. — DOI: 10.1103/PhysRevD.77.025001.

51. *Godunov S. I.*, *Machet B.*, *Vysotsky M. I.* Critical nucleus charge in a superstrong magnetic field: Effect of screening // Phys. Rev. D. — 2012. — Т. 85, вып. 4. — С. 044058. — DOI: 10.1103/PhysRevD.85.044058.

52. *Godunov S. I.*, *Vysotsky M. I.* Dependence of the atomic energy levels on a superstrong magnetic field with account of a finite nucleus radius and mass // Phys. Rev. D. — 2013. — Т. 87, вып. 12. — С. 124035. — DOI: 10.1103/PhysRevD.87.124035.

53. *Высоцкий М. И.*, *Годунов С. И.* Критический заряд в сверхсильном магнитном поле // УФН. — 2014. — Т. 184, № 2. — С. 206—210. — DOI: 10.3367/UFNr.0184.201402j.0206.

54. *Tupitsyn I. I.* [и др.]. Relativistic calculations of the charge-transfer probabilities and cross sections for low-energy collisions of H-like ions with bare nuclei // Phys. Rev. A. — 2010. — Т. 82, № 4. — С. 042701. — DOI: 10.1103/PhysRevA.82.042701.

55. *McConnell S. R.* [и др.]. Solution of the two-center time-dependent Dirac equation in spherical coordinates: Application of the multipole expansion of the electron-nuclei interaction // Phys. Rev. A. — 2012. — Т. 86, № 5. — С. 052705. — DOI: 10.1103/PhysRevA.86.052705.

56. *McConnell S.*, *Artemyev A.*, *Surzhykov A.* Treatment of $U_{92}^{+} - U_{91}^{+}$ collisions in spherical co-ordinates: going beyond the monopole approximation // Phys. Scr. — 2013. — Т. 2013, T156. — С. 014055. — DOI: 10.1088/0031-8949/2013/T156/014055.

57. *Maltsev I. A.* [и др.]. Electron-positron pair creation in low-energy collisions of heavy bare nuclei // Phys. Rev. A. — 2015. — Т. 91, вып. 3. — С. 032708. — DOI: 10.1103/PhysRevA.91.032708.

58. *Mironova D. V.* [и др.]. Relativistic calculations of the ground state energies and the critical distances for one-electron homonuclear quasi-molecules // Chem. Phys. — 2015. — Т. 449. — С. 10—13. — DOI: 10.1016/j.chemphys.2015.01.003.

59. *Bondarev A. I.* [и др.]. Positron creation probabilities in low-energy heavy-ion collisions // Eur. Phys. J. D. — 2015. — Т. 69, № 4. — С. 110. — DOI: 10.1140/epjd/e2015-50783-6.

60. *Lee R.*, *Milstein A.* Electron–positron pair production in ion collisions at low velocity beyond Born approximation // Phys. Lett. B. — 2016. — Т. 761. — С. 340—343. — DOI: 10.1016/j.physletb.2016.08.058.

61. *Popov R. V.* [и др.]. One-center calculations of the electron-positron pair creation in low-energy collisions of heavy bare nuclei // Eur. Phys. J. D. — 2018. — Т. 72, № 6. — С. 115. — DOI: 10.1140/epjd/e2018-90056-4.

62. *Maltsev I. A.* [и др.]. Electron-positron pair production in slow collisions of heavy nuclei beyond the monopole approximation // Phys. Rev. A. — 2018. — Т. 98, вып. 6. — С. 062709. — DOI: 10.1103/PhysRevA.98.062709.

63. *Novak O.* [и др.]. *K*-shell ionization of heavy hydrogenlike ions // Phys. Rev. A. — 2018. — Т. 97, вып. 3. — С. 032518. — DOI: 10.1103/PhysRevA.97.032518.

64. *Indelicato P.* [и др.]. QED and relativistic corrections in superheavy elements // Eur. Phys. J. D. — 2007. — Т. 45, № 1. — С. 155—170. — DOI: 10.1140/epjd/e2007-00229-y.

65. *Eliav E.*, *Fritzsche S.*, *Kaldor U.* Electronic structure theory of the superheavy elements // Nucl. Phys. A. — 2015. — Т. 944. — С. 518—550. — DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2015.06.017.

66. *Pershina V.* Electronic structure and properties of superheavy elements // Nucl. Phys. A. — 2015. — Т. 944. — С. 578—613. — DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2015.04.007.

67. *Schwerdtfeger P.* [и др.]. Relativistic and quantum electrodynamic effects in superheavy elements // Nucl. Phys. A. — 2015. — Т. 944. — С. 551—577. — DOI: 10.1016/j.nuclphysa.2015.02.005.

68. *Artemyev A. N.*, *Surzhykov A.* Quantum Electrodynamical Corrections to Energy Levels of Diatomic Quasimolecules // Phys. Rev. Lett. — 2015. — Т. 114, вып. 24. — С. 243004. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.243004.

69. *Khalilov V. R., Mamsurov I. V.* Vacuum polarization of planar charged fermions with Coulomb and Aharonov–Bohm potentials // Mod. Phys. Lett. A. — 2016. — Т. 31, № 07. — С. 1650032. — DOI: 10.1142/S0217732316500322.

70. *Khalilov V., Mamsurov I.* Planar density of vacuum charge induced by a supercritical Coulomb potential // Phys. Lett. B. — 2017. — Т. 769. — С. 152—158. — DOI: 10.1016/j.physletb.2017.03.052.

71. *Korobov V. I.* Relativistic corrections of $m\alpha^6$ order to the rovibrational spectrum of H_2^+ and HD^+ molecular ions // Phys. Rev. A. — 2008. — Т. 77, № 2. — С. 022509. — DOI: 10.1103/PhysRevA.77.022509.

72. *Komasa J.* [и др.]. Quantum Electrodynamics Effects in Rovibrational Spectra of Molecular Hydrogen // J. Chem. Theory Comput. — 2011. — Т. 7, № 10. — С. 3105—3115. — DOI: 10.1021/ct200438t.

73. *Liu W.* Advances in relativistic molecular quantum mechanics // Phys. Rept. — 2014. — Т. 537, № 2. — С. 59—89. — DOI: 10.1016/j.physrep.2013.11.006.

74. *Wietschorke K.-H.* [и др.]. Self-consistent determination of critical two-centre distances // J. Phys. B: At., Mol. Phys. — 1979. — Т. 12, № 1. — С. L31. — DOI: 10.1088/0022-3700/12/1/007.

75. *Soff G.* [и др.]. Electrons in superheavy quasimolecules // Phys. Rev. A. — 1979. — Т. 20, вып. 1, № 1. — С. 169—193. — DOI: 10.1103/PhysRevA.20.169.

76. *Rafelski J., Müller B.* The critical distance in collisions of heavy ions // Phys. Lett. B. — 1976. — Т. 65, № 3. — С. 205—208. — DOI: 10.1016/0370-2693(76)90163-5.

77. *Lisin V. I., Marinov M. S., Popov V. S.* Critical distance for the electron two-center problem // Phys. Lett. B. — 1977. — Т. 69, № 2. — С. 141—142. — DOI: 10.1016/0370-2693(77)90628-1.

78. *Lisin V. I., Marinov M. S., Popov V. S.* Critical electron state in heavy-ion collisions // Phys. Lett. B. — 1980. — Т. 91, № 1. — С. 20—22. — DOI: 10.1016/0370-2693(80)90652-8.

79. *Artemyev A. N.* [и др.]. Finite basis set approach to the two-centre Dirac problem in Cassini coordinates // J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. — 2010. — Т. 43, № 23. — С. 235207. — DOI: 10.1088/0953-4075/43/23/235207.

80. *Roenko A., Sveshnikov K.* Perturbativity vs non-perturbativity in QED-effects for H-like atoms with $Z\alpha > 1$ // Int. J. Mod. Phys. A. — 2017. — Т. 32, № 22. — С. 1750130. — DOI: 10.1142/S0217751X17501305.

81. *Роенко А. А., Свешников К. А.* Динамическая экранировка АММ и КЭД-эффекты для водородоподобных атомов при больших Z // Письма в ЭЧАЯ. — 2018. — Т. 15, № 1. — С. 25—38.

82. *Роенко А. А., Свешников К. А.* Пертурбативные и непертурбативные аспекты взаимодействия АММ дираковской частицы с кулоновским полем сверхтяжелого ядра // Письма в ЭЧАЯ. — 2018. — Т. 15, № 1. — С. 39—60.

83. *Roenko A. A., Sveshnikov K. A.* Estimating the radiative part of QED effects in superheavy nuclear quasimolecules // Phys. Rev. A. — 2018. — Т. 97, № 1. — С. 012113. — DOI: 10.1103/PhysRevA.97.012113.

84. *Bjorken J. D., Drell S. D.* Relativistic Quantum Mechanics. — McGraw Hill, New York, 1964.

85. *Воронов Б. Л., Гитман Д. М., Тютин И. В.* Гамильтониан Дирака со сверхсильным кулоновским полем // ТМФ. — 2007. — Т. 150, № 1. — С. 41—84. — DOI: 10.4213/tmf5965.

86. *Gitman D. M., Tyutin I. V., Voronov B. L.* Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics: General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials. — Springer, New York, 2012. — DOI: 10.1007/978-0-8176-4662-2.

87. *Воронков В. В., Колесников Н. Н.* Электронные уровни сверхтяжелых элементов // ЖЭТФ. — 1960. — Т. 39. — С. 189—191.

88. *Werner F. G., J.A.Wheeler.* Superheavy Nuclei // Phys. Rev. — 1958. — Т. 109. — С. 126—144. — DOI: 10.1103/PhysRev.109.126.

89. *Fano U.* Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts // Phys. Rev. — 1961. — Т. 124, вып. 6. — С. 1866—1878. — DOI: 10.1103/PhysRev.124.1866.

90. *Müller B., Rafelski J., Greiner W.* Electron shells in over-critical external fields // Z. Physik A. — 1972. — Т. 257, № 1. — С. 62—77. — DOI: 10.1007/BF01398198.

91. *Müller B., Rafelski J., Greiner W.* Auto-ionization of positrons in heavy ion collisions // Z. Physik A. — 1972. — Т. 257, № 3. — С. 183—211. — DOI: 10.1007/BF01401203.

92. *Rafelski J., Fulcher L. P., Klein A.* Fermions and bosons interacting with arbitrarily strong external fields // Phys. Rept. — 1978. — Т. 38, № 5. — С. 227—361. — DOI: 10.1016/0370-1573(78)90116-3.

93. *Wichmann E. H., Kroll N. M.* Vacuum Polarization in a Strong Coulomb Field // Phys. Rev. — 1956. — Т. 101, вып. 2. — С. 843—859. — DOI: 10.1103/PhysRev.101.843.

94. *Gyulassy M.* Vacuum Polarization in Heavy-Ion Collisions // Phys. Rev. Lett. — 1974. — Т. 33, № 15. — С. 921—925. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.33.921.

95. *Gyulassy M.* Higher order vacuum polarization for finite radius nuclei // Nucl. Phys. A. — 1975. — Т. 244, № 3. — С. 497—525. — DOI: 10.1016/0375-9474(75)90554-0.

96. *Neghabian A. R.* Vacuum polarization for an electron in a strong Coulomb field // Phys. Rev. A. — 1983. — Т. 27, вып. 5. — С. 2311—2320. — DOI: 10.1103/PhysRevA.27.2311.

97. *Voronina Y.* [и др.]. Essentially non-perturbative and peculiar polarization effects in planar QED with strong coupling // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2019. — Т. 106. — С. 298—311. — DOI: 10.1016/j.physe.2018.08.013.

98. *Voronina Y.* [и др.]. Casimir (vacuum) energy in planar QED with strong coupling // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. — 2019. — Т. 109. — С. 209—224. — DOI: 10.1016/j.physe.2018.09.026.

99. *Soff G.*, *Mueller B.*, *Rafelski J.* Precise Values for Critical Fields in Quantum Electrodynamics // Z. Naturforsch. A. — 1974. — Т. 29. — С. 1267. — DOI: 10.1515/zna-1974-0905.

100. *Маринов М. С.*, *Попов В. С.* Влияние экранирования на критический заряд ядра // Письма в ЖЭТФ. — 1973. — Т. 17. — С. 511.

101. *Cheng K. T.*, *Johnson W. R.* Self-energy corrections to the K-electron binding in heavy and superheavy atoms // Phys. Rev. A. — 1976. — Т. 14, вып. 6. — С. 1943—1948. — DOI: 10.1103/PhysRevA.14.1943.

102. *Soff G.* [и др.]. Self-Energy of Electrons in Critical Fields // Phys. Rev. Lett. — 1982. — Т. 48, вып. 21. — С. 1465—1468. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.48.1465.

103. *Ораевский В. Н.*, *Рез А. И.*, *Семикоз В. Б.* Спонтанное рождение позитронов кулоновским центров в однородном магнитном поле // ЖЭТФ. — 1977. — Т. 72. — С. 820.

104. *Müller B.* Positron Creation in Superheavy Quasi-Molecules // Annu. Rev. Nucl. Sci. — 1976. — Т. 26, № 1. — С. 351—383. — DOI: 10.1146/annurev.ns.26.120176.002031.

105. *Reinhardt J.*, *Müller B.*, *Greiner W.* Theory of positron production in heavy-ion collisions // Phys. Rev. A. — 1981. — Т. 24, № 1. — С. 103—128. — DOI: 10.1103/PhysRevA.24.103.

106. *Müller B.*, *Greiner W.* The Two Centre Dirac Equation // Z. Naturforsch. A. — 1976. — Т. 31, № 1. — С. 1—30. — DOI: 10.1515/zna-1976-0102.

107. *Plunien G.*, *Müller B.*, *Greiner W.* The Casimir effect // Phys. Rept. — 1986. — Т. 134, № 2. — С. 87—193. — DOI: 10.1016/0370-1573(86)90020-7.

108. *Reitz J. R.*, *Mayer F. J.* New electromagnetic bound states // J. Math. Phys. — 2000. — Т. 41, № 7. — С. 4572—4581. — DOI: 10.1063/1.533363.

109. *Schwinger J.* On Quantum-Electrodynamics and the Magnetic Moment of the Electron // Phys. Rev. — 1948. — Т. 73, вып. 4. — С. 416—417. — DOI: 10.1103/PhysRev.73.416.

110. *Dorokhov A. E.*, *Radzhabov A. E.*, *Zhevlakov A. S.* Dynamical quark loop light-by-light contribution to muon g-2 within the nonlocal chiral quark model // Eur. Phys. J. C. — 2015. — Т. 75, № 9. — С. 417. — DOI: 10.1140/epjc/s10052-015-3577-4.

111. *Dorokhov A. E.*, *Radzhabov A. E.*, *Zhevlakov A. S.* Current status of the muon g-2 // J. Phys. Conf. Ser. — 2016. — Т. 678, № 1. — С. 012054. — DOI: 10.1088/1742-6596/678/1/012054.

112. *Jegerlehner F.* The Muon g-2 in Progress // Acta Phys. Polon. B. — 2018. — Т. 49. — С. 1157. — DOI: 10.5506/APhysPolB.49.1157.

113. *Behncke H.* The Dirac equation with an anomalous magnetic moment // Math. Z. — 1980. — Т. 174, № 3. — С. 213—225. — DOI: 10.1007/BF01161410.

114. *Bateman H.*, *Erdelyi A.* Higher Transcendental Functions. Т. 1/2. — Mc Graw-Hill, New York, 1953.

115. *Barbieri R., Mignaco J. A., Remiddi E.* Electron form factors up to fourth order. - I // Nuovo Cim. A. — 1972. — T. 11, № 4. — C. 824—864. — DOI: 10.1007/BF02728545.

116. *Mohr P. J., Plunien G., Soff G.* QED corrections in heavy atoms // Phys. Rept. — 1998. — T. 293, № 5. — C. 227—369. — DOI: 10.1016/S0370-1573(97)00046-X.

117. *Mohr P. J.* Self-energy radiative corrections in Hydrogen-like systems // Ann. Phys. — 1974. — T. 88, № 1. — C. 26—51. — DOI: 10.1016/0003-4916(74)90398-4.

118. *Mohr P. J.* Self-energy of the $n = 2$ states in a strong Coulomb field // Phys. Rev. A. — 1982. — T. 26, № 5. — C. 2338—2354. — DOI: 10.1103/PhysRevA.26.2338.

119. *Mohr P. J., Kim Y.-K.* Self-energy of excited states in a strong Coulomb field // Phys. Rev. A. — 1992. — T. 45, № 5. — C. 2727—2735. — DOI: 10.1103/PhysRevA.45.2727.

120. *Johnson W. R., Soff G.* The Lamb shift in Hydrogen-like atoms, $1 \leq \mathrm{Z} \leq 110$ // At. Data Nucl. Data Tables. — 1985. — T. 33, № 3. — C. 405—446. — DOI: 10.1016/0092-640X(85)90010-5.

121. *Yerokhin V. A., Shabaev V. M.* Lamb Shift of $\mathrm{n} = 1$ and $\mathrm{n} = 2$ States of Hydrogen-like Atoms, $1 \leq \mathrm{Z} \leq 110$ // J. Phys. Chem. Ref. Data. — 2015. — T. 44, № 3. — C. 033103. — DOI: 10.1063/1.4927487.

122. *Indelicato P., Bieroń J., Jönsson P.* Are MCDF calculations 101% correct in the super-heavy elements range? // Theor. Chem. Acc. — 2011. — T. 129, № 3. — C. 495—505. — DOI: 10.1007/s00214-010-0887-3.

123. *Pyykkö P.* The Physics behind Chemistry and the Periodic Table // Chem. Rev. — 2012. — T. 112, № 1. — C. 371—384. — DOI: 10.1021/cr200042e.

124. *Eichler J.* Theory of relativistic ion-atom collisions // Phys. Rept. — 1990. — Т. 193, № 4. — С. 165—277. — DOI: 10.1016/0370-1573(90)90018-W.

125. *Eichler J.* Lectures on Ion-Atom Collisions: From Nonrelativistic to Relativistic Velocities. — Amsterdam : Elsevier Science, 2005. — С. 272. — DOI: 10.1016/B978-044452047-0/50000-0.

126. *Müller B.*, *Rafelski J.*, *Greiner W.* Solution of the Dirac equation with two Coulomb centres // Phys. Lett. B. — 1973. — Т. 47, № 1. — С. 5—7. — DOI: 10.1016/0370-2693(73)90554-6.

127. *Gail M.*, *Grun N.*, *Scheid W.* Coupled channel calculations for electron–positron pair production in collisions of heavy ions // J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. — 2003. — Т. 36, № 7. — С. 1397. — DOI: 10.1088/0953-4075/36/7/309.

128. *Toshima N.*, *Eichler J.* Coupled-channel theory of excitation and charge transfer in relativistic atomic collisions // Phys. Rev. A. — 1988. — Т. 38, № 5. — С. 2305—2316. — DOI: 10.1103/PhysRevA.38.2305.

129. *Momberger K.*, *Grun N.*, *Scheid W.* Non-perturbative character of bound-free electron-positron pair production and the role of phase-distortion effects // J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. — 1993. — Т. 26, № 12. — С. 1851. — DOI: 10.1088/0953-4075/26/12/012.

130. *Fillion-Gourdeau F.*, *Lorin E.*, *Bandrauk A. D.* Numerical solution of the time-independent Dirac equation for diatomic molecules: B splines without spurious states // Phys. Rev. A. — 2012. — Т. 85, № 2. — С. 022506. — DOI: 10.1103/PhysRevA.85.022506.

131. *Sundholm D.* Fully numerical soluti ons of molecular Dirac equations for highly charged one-electron homonuclear diatomic molecules // Chem. Phys. Lett. — 1994. — Т. 223, № 5. — С. 469—473. — DOI: 10.1016/0009-2614(94)00473-0.

132. *Kullie O., Kolb D.* High accuracy Dirac-finite-element (FEM) calculations for H_2^+ and Th_2^{179+} // Eur. Phys. J. D. — 2001. — Т. 17, № 2. — С. 167—173. — DOI: 10.1007/s100530170019.

133. *Busic O., Grün N., Scheid W.* Calculations for electron transitions on a three-dimensional lattice in relativistic heavy-ion collisions // Phys. Rev. A. — 2004. — Т. 70, № 6. — С. 062707. — DOI: 10.1103/PhysRevA.70.062707.

134. *Yang L., Heinemann D., Kolb D.* An accurate solution of the two-centre Dirac equation for H_2^+ by the finite-element method // Chem. Phys. Lett. — 1991. — Т. 178, № 2. — С. 213—215. — DOI: 10.1016/0009-2614(91)87058-J.

135. *Tupitsyn I. I., Mironova D. V.* Relativistic calculations of ground states of single-electron diatomic molecular ions // Opt. Spectrosc. — 2014. — Т. 117, № 3. — С. 351—357. — DOI: 10.1134/S0030400X14090252.

136. *Matveev V. I., Matrasulov D. U., Rakhimov H. Y.* Two-center problem for the Dirac equation // Phys. At. Nucl. — 2000. — Т. 63, № 2. — С. 318—321. — DOI: 10.1134/1.855637.

137. *Rafelski J., Müller B.* Magnetic Splitting of Quasimolecular Electronic States in Strong Fields // Phys. Rev. Lett. — 1976. — Т. 36, № 10. — С. 517—520. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.36.517.

138. *Bondarev A. I.* [и др.]. Contribution of higher multipole terms of Coulomb interaction to ionization in low-energy heavy-ion collisions // J. Phys. Conf. Ser. — 2015. — Т. 635, № 2. — С. 022094. — DOI: 10.1088/1742-6596/635/2/022094.