

А. А. Садовой, А. С. Ульянов

АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ МНОГОЭЛЕКТРОННОГО УРАВНЕНИЯ ДИРАКА, ОСНОВАННЫЙ НА МНОГОМЕРНЫХ СПИНОРАХ

Монография

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ X \end{pmatrix}$$

$$\left(E + \sum_{i=1}^A \frac{Z}{r_i} - \sum_{\substack{i>j \\ i=1}}^A \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) \Phi = -i \frac{\hbar c}{e^2} \sum_{i=1}^A \vec{\sigma}_i \vec{\nabla}_i X$$

$$\left(E + 2A + \sum_{i=1}^A \frac{Z}{r_i} - \sum_{\substack{i>j \\ i=1}}^A \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right) X = -i \frac{\hbar c}{e^2} \sum_{i=1}^A \vec{\sigma}_i \vec{\nabla}_i \Phi$$

ФГУП «Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский научно-исследовательский институт
экспериментальной физики»

А. А. Садовой, А. С. Ульянов

**АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ
МНОГОЭЛЕКТРОННОГО УРАВНЕНИЯ ДИРАКА,
ОСНОВАННЫЙ НА МНОГОМЕРНЫХ СПИНОРАХ**

Монография

Саров
2012

УДК 539.18+530.145
ББК 22.193
С14

Садовой, А. А., Ульянов, А. С.

С14 Аналитический метод решения многоэлектронного уравнения Дирака, основанный на многомерных спинорах : монография / А. А. Садовой, А. С. Ульянов. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2012. – 142 с., ил.
ISBN 978-5-9515-0217-9

В монографии изложен аналитический метод решения уравнения Дирака для систем с кулоновским взаимодействием. Возможности метода иллюстрируются на примере расчета свойств ионов трансурановых элементов.

В методе используются многомерные спиноры в $(3A-1)$ -мерном пространстве для системы из A электронов. Техника построения этих многомерных спиноров подробно изложена. Конкретные примеры приведены при расчете свойств гелие-, литие-, бериллие- и углеродоподобных ионов трансурановых элементов с $Z = 92-101$.

При решении уравнения Дирака используется техника вычисления матричных элементов операторов, входящих в уравнение Дирака, в $3A$ -мерном пространстве, что позволяет осуществить переход от многомерного уравнения Дирака к системе двух дифференциальных уравнений первого порядка, решение которых найдено аналитически. Полученные аналитические волновые функции могут использоваться для расчетов многих свойств ионов, которые не рассматриваются в данном издании.

Монография будет полезна студентам старших курсов, магистрам, аспирантам, а также работникам физических и физико-технических специальностей.

УДК 539.18+530.145
ББК 22.193

ISBN 978-5-9515-0217-9

© ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2012

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	5
Введение	6
Глава 1. Аналитический метод решения уравнения Дирака для систем с кулоновским взаимодействием, основанный на многоэлектронных спинорах	7
1.1. Построение спиноров в 3A-мерном пространстве	7
1.2. Разложение волновой функции многоэлектронного иона по многомерным спинорам	8
1.3. Методы аналитического решения уравнения Дирака ...	12
Глава 2. Некоторые свойства уравнения Дирака для систем с кулоновским взаимодействием	26
2.1. Среднее значение гамильтониана уравнения Дирака в методе МУКФ	27
2.2. Особенности решений уравнения Дирака для многоэлектронных систем	33
2.3. Осцилляционные свойства решения уравнения Дирака	35
Глава 3. Решение уравнения Дирака для гелиеподобных ионов трансурановых элементов	37
3.1. Уравнение Дирака в 6-мерном пространстве	37
3.2. Энергии и волновые функции гелиеподобных ионов с $Z = 92-101$	43
3.3. Электронная плотность гелиеподобных ионов тяжелых элементов	50
3.4. Моменты атомных радиусов	61
Водородоподобные ионы	61
Гелиеподобные ионы	62
3.5. Решение для гелиеподобных ионов в возбужденном состоянии 3S_1	65

Глава 4. Решение уравнения Дирака для литиеподобных ионов трансурановых элементов	71
4.1. Уравнение Дирака в 9-мерном пространстве	71
4.2. Волновая функция и энергия связи для $\frac{1}{2}^{+}$ состояния литиеподобных ионов с $Z = 92-101$	85
4.3. Электронная плотность литиеподобных ионов тяжелых элементов	89
4.4. Моменты атомных радиусов	95
Глава 5. Некоторые свойства 0^{+} состояния бериллиеподобных ионов трансурановых элементов	97
5.1. Уравнение Дирака в 12-мерном пространстве	97
5.2. Волновая функция и энергия связи для 0^{+} состояния бериллиеподобных ионов с $Z = 92-101$	109
5.3. Электронная плотность бериллиеподобных ионов тяжелых элементов	113
5.4. Моменты атомных радиусов	116
Глава 6. Состояние 0^{+} углеродоподобных ионов трансурановых элементов	118
6.1. Уравнение Дирака в 18-мерном пространстве	118
6.2. Волновая функция и энергия связи для 0^{+} состояния углеродоподобных ионов с $Z = 92-101$	127
6.3. Электронная плотность	130
6.4. Потенциалы ионизации	132
Список литературы	136

Примечание.

E_0 – энергия связи водородоподобного иона с электронной конфигурацией $1s^1$;

E_1 – энергия связи гелиеподобного иона с электронной конфигурацией $1s^1 2s^1$;

E_2 – энергия связи гелиеподобного иона с электронной конфигурацией $1s^2$;

E_3 – энергия связи литиеподобного иона с электронной конфигурацией $1s^2 2s^1$;

E_4 – энергия связи бериллиеподобного иона с электронной конфигурацией $1s^2 2s^2$;

E_5 – энергия связи углеродоподобного иона с электронной конфигурацией $1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2$.

Таблица 29

Потенциалы ионизации ионов урана, рассчитанные
различными методами (кэВ)

Метод	$I_1 = E_0 - E_1$	$I_2 = E_0 - E_2$	$I_3 = E_3 - E_2$	$I_4 = E_4 - E_3$	$I_5 = E_5 - E_4$
МУКФ	33,214	130,170	20,205	53,869	83,906
[15]	34,08	132,07	34,08	34,07	68,02
АТОМ [16]	32,09	127,16	32,09	31,59	60,51
GRASP [14, 23]	30,33	130,39	32,91	32,5	–

Из таблицы видно, что полученные потенциалы ионизации хорошо согласуются с результатами других источников только для нижних оболочек. Для более высоких оболочек имеем существенное расхождение приведенных данных. Вопрос о причинах такой разницы потенциалов ионизации будет подробно исследован в дальнейшем.

Благодарности

Авторы выражают благодарность В. П. Незнамову, Б. А. Надыкто и В. А. Жмайло за полезные обсуждения изложенных в монографии результатов.

Список литературы

1. Новые методы решения задачи многих тел в атомной, молекулярной и ядерной физике: сборник научных статей / Под ред. А. А. Садового. – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2008.

2. Садовой А. А. Методы многомерных угловых функций в теоретической и прикладной физике. – Арзамас-16: ВНИИЭФ, 1994.

3. Sadovoy A. A. The Multidimensional angular coulomb function method in atomic and molecular physics // Few-Body Systems Suppl. 2000. Vol. 12. P. 66–70.

4. Grant I. P. // Proc. Royal Soc. 1962. Vol. 262. P. 555.

5. Ishikawa H. Relativistic Dirac-Fock and many-body perturbation calculations of He, He-like ions and Ar // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 43, N 3. P. 1142–1150.

6. Lindroth E., Salomonson S. Relativistic calculation of the 23 S1-11S0 magnetic dipole transition rate and transition energy for heliumlike argon // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 41, N 9. P. 4659–4669.

7. Садовой А. А. Критерий нулевой потенциальной энергии и точность асимптотик волновых функций многоэлектронных атомных систем // ВАНТ. Сер. Теор. и приклад. физика. 2002. Вып. 1–2. С. 44–47.

8. Бете Г., Солпитер Е. Квантовая механика атомов с одним или двумя электронами. – М.: Физматгиз, 1960.

9. Берестецкий В. В., Лифшиц Е. М., Питаевский А. П. Релятивистская квантовая теория. Ч. 1. – М.: Наука, 1968.

10. Градштейн И. С. и Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. – М.: Физматгиз, 1963.

11. Бете Г. Квантовая механика. – М.: Физматгиз, 1965.

12. Kolakowska A., Talman J. D., Ashamar K. Minimax variational approach to the relativistic two-electron problem // Phys. Rev. A. 1996. Vol. 53, N 1. P. 168–177.

13. Садовой А. А., Ульянов А. С. Новый метод расчета свойств гелиеподобных ионов трансурановых элементов // ВАНТ. Сер. Теор. и приклад. физика. 2007. Вып. 2–3. С. 58–67.

14. Grant I. P., McKentzie B. J., Norrington P. H. et al. An atomic multiconfiguration Dirac-Fock package // Comp. Phys. Comm. 1980. Vol. 21. P. 207–231.

15. Desclaux J. P. Relativistic Dirac-Fock expectation values for atoms with $Z = 1$ to $Z = 120$ // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1973. Vol. 12, N 4. P. 311–406.

16. Philippov A. V., Povyshev V. M., Sadovoy A. A. et al. Electron-impact ionization cross sections of Ti, Kr, Sn, Ta, U atoms and their ions in the electron energy range from the threshold up to 200 keV. Part 2 // JINR Preprint E9-2002-5, 2002.

17. Левич В. Г., Вдовин Ю. А., Мямлин В. А. Курс теоретической физики. Т. II. – М.: Физматгиз, 1962.

18. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. Т. I. – М.: Гостехиздат, 1951. С. 382.

19. Надыкто Б. А. Полуэмпирическая модель расчета энергий состояний многоэлектронных атомов и ионов // УФН. 1993. Т. 163, № 9. С. 37–75.

20. Садовой А. А., Ульянов А. С. Электронная плотность высокоионизованных ионов трансурановых элементов // Сб. докладов VI научно-техн. конф. «Молодежь в науке». – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2007.

21. Труды XV Нижегородской сессии молодых ученых. Естественно-научные дисциплины. – Н. Новгород: Гладкова О. В., 2010.

22. Brandau C., Kozhuharov C. et al. Precise determination of the $2s_{1/2} - 2p_{1/2}$ splitting in very heavy lithiumlike ions utilizing dielectronic recombination // Phys. Rev. Let. 2003. Vol. 91, N 7. P. 073202-1–073202-4.

23. Dyll K. G., Grant I. P., Johnson C. T. et al. GRASP: a general-purpose relativistic atomic structure program // Comp. Phys. Comm. 1989. Vol. 55. P. 425–456.

Научное издание

**Садовой Александр Александрович,
Ульянов Антон Сергеевич**

**Аналитический метод решения
многоэлектронного уравнения Дирака,
основанный на многомерных спинорах**

Монография

Редактор, корректор *Н. Ю. Зимакова*
Компьютерная подготовка оригинала-макета *М. С. Меццержакова*

Подписано в печать 25.12.2012 Формат 60×84/16
Печать офсетная. Уч.-изд. л. 5,1 Усл. печ. л. 8
Тираж 100 экз. Зак. тип. 1914-2012

Отпечатано в ИПК ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»
607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23