РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

С.А. Запрягаев[a], Н.Л. Манаков[b], С.И. Granted Мармо[b], И.С. Ненашев[b]

[a] *Факультет компьютерных наук*
Воронежского государственного университета

[b] *Физический факультет*
Воронежского государственного университета

СОДЕРЖАНИЕ

1. Нерелятивистские кулоновские функции Грина

- Матричные элементы

$$\mathcal{M} = \left\langle n_f l_f m_f \right| (\mathbf{e}\cdot\mathbf{r}) G_{E_{n_i}+\hbar\omega}(\mathbf{r},\mathbf{r}')(\mathbf{e}'\cdot\mathbf{r}') \left| n_i l_i m_i \right\rangle \ . \tag{1}$$

- Парциальное разложение функции Грина:

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{lm} g_l(r,r';E) Y_{lm}\left(\mathbf{r}/r\right) Y^*_{lm}\left(\mathbf{r}'/r'\right) \ . \tag{2}$$

- Штурмовское разложение радиальной КФГ (а.е.):

$$g_l(E;r,r') = \frac{4}{\nu}(xx')^l e^{-\frac{x+x'}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k!\, L_k^{2l+1}(x)\, L_k^{2l+1}(x')}{\Gamma(k+2l+2)(k+l+1-\eta)}, \tag{3}$$

$$x = \frac{2r}{\nu}, \quad x' = \frac{2r'}{\nu}, \quad \nu = \frac{1}{\sqrt{-2(E+i0)}}, \quad \eta = Z\nu \ . \tag{4}$$

- Штурмовские функции

$$S_{kl}(2r/\nu) = \frac{2}{\nu}\,(2r/\nu)^l\,\exp(-r/\nu)\,L_k^{2l+1}(2r/\nu); \tag{5}$$

их разложение по функциям с масштабированным аргументом

$$S_{kl}\left(\frac{2r}{\nu}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{nk}(\beta)\,S_{nl}\left(\frac{2r}{\beta}\right). \tag{6}$$

- Обобщенное штурмовское разложение КФГ (симметричный ряд) [Манаков и др. ЖЭТФ **119** (2001) 45]:

$$g_l(E;r,r') =$$

$$= \frac{4\nu}{\beta^2}\left(\frac{2r}{\beta}\cdot\frac{2r}{\beta'}\right)^l e^{-\frac{r}{\beta}-\frac{r'}{\beta'}} \sum_{k,k'=0}^{\infty} g^l_{kk'}(\nu;\beta,\beta')L_k^{2l+1}\left(\frac{2r}{\beta}\right)L_{k'}^{2l+1}\left(\frac{2r'}{\beta'}\right). \tag{7}$$

- Ядро разложения $g^l_{kk'}$ при $\beta' = \beta$:

$$g^l_{kk'}(\nu;\beta,\beta) = \frac{\nu}{\Gamma(2l+2)}\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{k_<} {}_2F_1(-k_<, l+1-\eta; 2l+2; z)\times$$
$$\times\left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{k_>} \frac{k_>!\,{}_2F_1(k_>+1, k_>+2l+2; k_>+l+2-\eta; z^{-1})}{(l+1-\eta)_{k_>+1}},$$
$$k_< = \min(k,k'),\quad k_> = \max(k,k'),\quad z = -\frac{4\beta\nu}{(\beta-\nu)^2}. \tag{8}$$

Здесь β — свободный (произвольный) параметр!

- Вычисление матричных элементов $\mathcal{M}$ из (1):

выбор свободных параметров $\beta = n_f/Z$, $\beta' = n_i/Z$ и сведение L^c_k по рекурсии к ортонормированным $\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^c L^c_k(\rho)L^c_m(\rho)\,d\rho \sim \delta_{km}$.

• Обобщенное штурмовское разложение КФГ (несимметричный ряд) [Манаков и др. ТМФ **59** (1984) 49].

$$g_l(E;r,r') = \frac{4\nu}{\beta^2} e^{\frac{r-r'}{\nu}-\frac{2r}{\beta}} \left(\frac{2r}{\beta}\cdot\frac{2r'}{\beta}\right)^l \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{k'=0}^{n} \frac{k!}{(l+1-\eta)_{k+1}} \times$$

$$\times \frac{(l+1-\eta)_{k'}}{\Gamma(k'+2l+2)} \left(\frac{\beta-\nu}{\beta}\right)^{k-k'} L_k^{2l+1}(2r/\beta) L_{k'}^{2l+1}(2r'/\beta). \qquad (9)$$

ОШР1 (7) при $\beta = \beta' = \nu$ и ОШР2 (9) при $\beta = \nu$ переходят в стандартное штурмовское разложение КФГ (3).

• ОШР функции Грина для модельного потенциала Фьюса следуют из ОШР КФГ при замене [Манаков и др, ЖЭТФ **132** (2007) 796]

$$l \to \lambda_l\,.$$

2. Релятивистские кулоновские функции Грина

- Парциальное разложение:

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{k,m} G^{(E)}_{k,m}(\mathbf{r},\mathbf{r}') =$$

$$= \sum_{k,m} \begin{pmatrix} G^{11}_k(r,r')\chi^k_m\chi^{k\,\dagger}_m & iG^{12}_k(r,r')\chi^k_m\chi^{-k\,\dagger}_m \\ iG^{21}_k(r,r')\chi^{-k}_m\chi^{k\,\dagger}_m & -G^{22}_k(r,r')\chi^{-k}_m\chi^{-k\,\dagger}_m \end{pmatrix} \quad (10)$$

или [`Manakov` *et al*, `Вестник ВГУ` **1** `(2000) 55.`]

$$G^{(E)}_{k,m}(\mathbf{r},\mathbf{r}') =$$

$$= \sum_{\substack{k,m \\ p=\pm1}} \frac{1}{2\lambda}\left[(\lambda+\varepsilon\kappa p)g_k(E;r,r')+i\,s\,g^{(1)}_k(E;r,r')(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{n})\right]p\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n})\overline{\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n}')}, \quad (11)$$

$$\kappa = |k|, \quad s = \mathrm{sign}(k) = \pm1, \quad \lambda = \sqrt{\kappa^2-(\alpha Z)^2}, \quad \varepsilon = E/m_e c^2.$$

- Штурмовские разложения радиальных кулоновских ф.Г.

Симметричная часть:

$$g_k(E;r,r') = \frac{4m_e}{\hbar^2 a_0 \nu}(xx')^{\lambda+\delta_s-1}\times$$
$$\times\, e^{-(x+x')/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n\,!L_n^{2\lambda+s}(x)L_n^{2\lambda+s}(x')}{\Gamma(n+2\lambda+2\delta_s)(n+d_s)}. \qquad (12)$$

Несимметричная часть:

$$g_k^{(1)} = \frac{4m_e}{\hbar^2 a_0 \nu}\frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\sqrt{xx'}}\left[\delta(x-x') + (xx')^{\lambda}\left(\frac{x}{x'}\right)^{s/2}\times\right.$$
$$\left.\times\, e^{-(x+x')/2}\sum_{n=(1-s)/2}^{\infty}\frac{(n+\delta_s)!\,L_{n+s}^{2\lambda-s}(x)L_n^{2\lambda+s}(x')}{\Gamma(n+2\lambda+\delta_s)(n+d_s)}\right]. \qquad (13)$$

Здесь $\quad x = 2r/\nu a_0, \quad x' = 2r'/\nu a_0, \quad d_s = \lambda - \eta + \delta_s,$

$$\nu = \alpha/\sqrt{1-\varepsilon^2}, \quad \eta = \nu Z\varepsilon, \quad \delta_s = (s+1)/2. \qquad (14)$$

- Преобразование штурмовского ряда в $g_k(E;r,r')$.

1. Разложение полиномов Лагерра:

$$L_n^{2\lambda+s}(2r/\nu) \propto \sum_{m=0}^{\infty}(1-z)^{-\frac{n+m}{2}}{}_2F_1(-m,-n;2\lambda+s+1;z)L_m^{2\lambda+s}(2r/\beta),$$

$$z = -\frac{4\beta\nu}{(\beta-\nu)^2}. \tag{15}$$

Промежуточный результат:

$$g_k(E;r,r') \propto \sum_{m,m'=0}^{\infty} g^k_{mm'}(E,\beta)\, L_m^{2\lambda+s}\left(\frac{2r}{\beta}\right) L_{m'}^{2\lambda+s}\left(\frac{2r'}{\beta}\right),$$

$$g^k_{mm'}(E,\beta) = \sum_n (1-z)^{-n}\frac{(2\lambda+s+1)_n}{n!(n+\lambda-\eta+\delta_s)}\times$$

$$\times\, {}_2F_1(-m,-n,2\lambda+s+1;z)\,{}_2F_1(-m',-n,2\lambda+s+1;z). \tag{16}$$

2. Дифференциальное представление одной из ${}_2F_1$ (ВТФ I):

$$
{}_2F_1(-m,-n,2\lambda+2;z)=\frac{(1-z)^{m+n+2\lambda+s+1}}{(2\lambda+s+1)_m z^{2\lambda+s}}\frac{d^m}{dz^m}\left[\frac{z^{m+2\lambda+s}}{(1-z)^{n+2\lambda+s+1}}\right] \tag{17}
$$

и элементарное тождество

$$
(n+d_s+1)^{-1}=\int_0^1 dt\ t^{n+d_s}. \tag{18}
$$

Промежуточный результат:

$$
g^k_{mm'}(E,\beta)\propto\frac{d^m}{dz^m}\sum_n\int_0^1 dt t^{n+d_s-1}\frac{(2\lambda+s+1)_n}{n!}\times
$$

$$
\times\frac{z^{m+2\lambda+s}}{(1-z)^{n+2\lambda+s+1}}{}_2F_1(-m',-n,2\lambda+s+1;z_0)\Big|_{z_0=z}. \tag{19}
$$

4. Сумма по n - это ряд для производящей функции ${}_2F_1$ (ВТФ I):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(c)_n}{n!} s^n {}_2F_1(-n, -m, c, z) = \frac{[1 - s(1 - z)]^m}{(1 - s)^{m+c}}, \tag{20}$$

так что (с заменой $t \to t\dfrac{1 - z_0}{1 - z}$ в интеграле):

$$g^k_{mm'}(E, \beta) \propto \frac{d^m}{dz^m} [\varphi_m I_{m'},] \Big|_{z_0 = z}, \tag{21}$$

$$\varphi_m = z^{m+2\lambda+s} (1 - z)^{d_s - 2\lambda - s - 1}, \tag{22}$$

$$I_{m'} = \int\limits_0^{(1-z_0)/(1-z)} dt t^{d_s - 1} \frac{(1 - t)^{m'}}{(1 - \frac{t}{1-z_0})^{m'+2\lambda+s+1}}. \tag{23}$$

5. Дифференцирование произведения (21) с учетом исчезновения производных

$$\frac{d^p}{dz^p} I_{m'} \Big|_{z_0=z} = 0 \quad \text{при} \quad p \le m' \tag{24}$$

и свойства симметрии

$$g^k_{mm'}(E,\beta) = g^k_{m'm}(E,\beta). \tag{25}$$

Окончательный результат:

$$g^k_{mm'}(E,\beta) \propto \left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^m {}_2F_1(-m, d_s; 2\lambda+s+1; z)\times$$

$$\times \frac{m'!}{(d_s)_{m'+1}} \left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{m'} {}_2F_1(m'+1, m'+2\lambda+s+1; m'+d_s+1; z^{-1}). \tag{26}$$

- Обобщенное штурмовское разложение для $g_k^{(1)}(E;r,r')$.

$$g_k^{(1)}\big|_{s=1} \propto \left[\delta(x-x') + \sum_{m,m'=0}^{\infty} g_{mm'}^{(1),k>0} L_m^{2\lambda-1}(2r/\beta) L_{m'}^{2\lambda+1}(2r'/\beta)\right],$$

где $\quad g_{mm'}^{(1),k>0}(E,\beta) \propto \left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{m-1} F(-m,d-1;2\lambda;z)\times$

$$\times \frac{m'!}{(d)_{m'+1}} \left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{m'} F(m'+1,m'+2\lambda+2;m'+d+1;z^{-1})+$$

`появился «довесок»!`

$$+z\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{m-m'} \sum_{p=m'+1}^{m} B_{p;m,m'}(\lambda)\times$$

$$\times F(-m+p,d-1+p;2\lambda+p;z)F(-p+m'+1,-p-d+1;-p-2\lambda;z). \tag{27}$$

- Альтернативный способ (через квадрированное уравнение Дирака)

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \hat{\mathbf{K}}\,\mathcal{G}(E;\mathbf{r},\mathbf{r}'), \tag{28}$$

$$\hat{\mathbf{K}} = -\frac{1}{2m_ec^2}\left[c(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{p}) - m_ec^2 + \gamma^0\left(-\frac{Ze^2}{r} - E\right)\right]. \tag{29}$$

— оператор квадрирования,

$$\mathcal{G}(E;\mathbf{r},\mathbf{r}^{'}) = \sum_k g_k(E;r,r^{'})\sum_{m,p} p\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n})\overline{\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n}')}, \tag{30}$$

—функция Грина квадрированного уравнения, где (можно взять)

$$g_k(E;r,r') \propto \sum_{m,m'=0}^{\infty} g^k_{mm'}(E,\beta)\,L^{2\lambda+s}_m(2r/\beta)\,L^{2\lambda+s}_{m'}(2r'/\beta). \tag{31}$$

Действуя оператором квадрирования, получим более компактный результат (без «довесков)» :

$$G^{(E)}_{k,m}(\mathbf{r},\mathbf{r'}) =$$
$$= \sum_{\substack{k,m\\ p=\pm 1}} \frac{1}{2\lambda}\left[(\lambda+\varepsilon\kappa p) g_k(E;r,r') + i\, s\, g_k^{(1)}(E;r,r')(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{n})\right] p\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n})\overline{\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n'})},$$
(32)

$$g_k^{(1)}(E;r,r') = \sqrt{1-\varepsilon^2}\frac{4\nu}{\beta^3}\sum_{mm'} g^k_{mm'}(y')^{\lambda+\delta_s-1}e^{-\frac{y'}{2}}L^{2\lambda+s}_{m'}(y')\times$$
$$\times\left[\left(\lambda+\delta_s+s\lambda+\frac{y}{2}\left(1-\frac{s\eta\beta}{\lambda\nu}\right)\right)y^{\lambda+\delta_s-2}e^{-\frac{y}{2}}L^{2\lambda+s}_m(y)-\right.$$
$$\left.-y^{\lambda+\delta_s-1}e^{-\frac{y}{2}}L^{2\lambda+s+1}_m(y)\right], \qquad y=2r/\beta, \quad y'=2r'/\beta. \tag{33}$$

3. Расчет (дипольной) поляризуемости с ОШР рел. КФГ

[V. Yakhontov, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 093001.]

$$M = \left\langle \Psi_{n_0 k_0 m_0} \right| \gamma_0 z G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r'}) \gamma_0 z' \left| \Psi_{n_0 k_0 m_0} \right\rangle , \quad \Psi_{n_0 k_0 m_0} = \begin{pmatrix} g\chi_{m_0}^{k_0} \\ if\chi_{m_0}^{-k_0} \end{pmatrix}$$

$$g_{1s}(r) = C_\gamma r^{\gamma-1} e^{-Zr}, \qquad f_{1s} = -\frac{\alpha Z}{1+\gamma} g_{1s},$$

$$\gamma = \sqrt{1-(\alpha Z)^2}. \tag{34}$$

$$\langle g_{1s} | \, r g_k r \, | g_{1s} \rangle , \qquad \langle g_{1s} | \, r g_k^{(1)} r \, | g_{1s} \rangle , \qquad k = \pm 1, \pm 2. \tag{35}$$

- Окончательное выражение для поляризуемости $1s$-состояния:

$$\alpha^s(\omega) \propto \sum_{\substack{s=\pm 1\\ kp=1,-2\\ \varepsilon=\gamma\pm\omega}} \frac{(4-kp)}{54\lambda^2(1+\gamma)} \times$$

$$\times\left\{(s\lambda+pk\varepsilon)\left[pk+s\lambda-(Z\alpha)^2\left(1+\frac{s\lambda}{1+\gamma}\right)\right]\langle g_{1s}|\, r g_k(\varepsilon; r, r')r'\, |g_{1s}\rangle + \right.$$

$$\left. + (Z\alpha)^2(1-pk)\,\langle g_{1s}|\, r g_k^{(1)}(\varepsilon; r, r')r'\, |g_{1s}\rangle\right\}. \quad (36)$$

Интегралы по радиальным переменным приводят к ${}_2F_1$:

$$\int_0^\infty dt t^{a-1} e^{-\beta t} L_m^{2\lambda+1}(xt) \propto F(-m, a, 2\lambda+2; x/\beta). \qquad (37)$$

- Радиальный матричный элемент

$$\langle g_{1s}|\, r g_k r \,|g_{1s}\rangle \equiv \sum_{m,m'=0}^{\infty} A_{mm'} \propto$$

$$\propto \sum_{m,m'=0}^{\infty} \frac{(2\lambda+s+1)_m}{m!}\frac{(2\lambda+s+1)_{m'}}{m'!}\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{m_<} F(-m_<, d_s; 2\lambda+s+1; z)\times$$

$$\times\frac{m_>!}{(d_s)_{m_>+1}}\left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{m_>} F(m_>+1, m_>+2\lambda+s+1; m_>+d_s+1; z^{-1})\times$$

$$\times F(-m, \gamma+\lambda+\delta_s+2; 2\lambda+s+1; \frac{2/\beta}{Z+1/\beta})\times$$

$$\times F(-m', \gamma+\lambda+\delta_s+2; 2\lambda+s+1; \frac{2/\beta}{Z+1/\beta}). \quad (38)$$

- <u>Сходимость ряда</u> $\sum_{m,m'=0}^{\infty} A_{mm'}$

Края матрицы ($m_< = \text{const}, \quad m_> \to \infty$):

$$A_{mm'} \sim m_>^{\eta} \left[\frac{C_1}{m_>^{\gamma+3}} + m_>^{\gamma+1} \left(\frac{\beta - 1/Z}{\beta + 1/Z} \right)^{m_>} \right] \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{m_>} . \tag{39}$$

Диагональ матрицы ($m = m' \to \infty$):

$$A_{mm} \sim \left[\frac{C_1}{m^{\gamma+3}} + m^{\gamma+1} \left(\frac{\beta - 1/Z}{\beta + 1/Z} \right)^{m} \right]^2 \left[m^{2\eta} \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{2m} + C_2 \right] . \tag{40}$$

Выбор свободного параметра

$$\beta = \frac{1}{2} (\nu + 1/Z) \tag{41}$$

приводит к сходящемуся ряду при мнимых ν (т.е. при $E > m_e c^2$).

$\omega/\lvert E_i \rvert$	$Z^4\,\mathrm{Re}\,\alpha_s$, ат. ед.	$Z^4\,\mathrm{Im}\,\alpha_s$, ат. ед.	$Z^4\,\mathrm{Re}\,\alpha_s$, ат. ед.	$Z^4\,\mathrm{Im}\,\alpha_s$, ат. ед.
	$Z = 1$		$Z = 30$	
1.5	−2.1797029358(0)	1.0858448034(0)	−2.0921385432(0)	1.0188342107(0)
1.8	−1.5041523045(0)	5.4320148148(−1)	−1.4390561986(0)	5.0315384013(−1)
2.1	−1.0875629815(0)	3.0052671027(−1)	−1.0376690213(0)	2.7476700425(−1)
2.4	−8.1820847165(−1)	1.7917706825(−1)	−7.7894629745(−1)	1.6169435934(−1)
2.7	−6.3589487200(−1)	1.1318182140(−1)	−6.0430844164(−1)	1.0081747296(−1)
3.0	−5.0750173552(−1)	7.4860822040(−2)	−4.8161480092(−1)	6.5825000191(−2)
3.3	−4.1399424289(−1)	5.1407766757(−2)	−3.9244356017(−1)	4.4625313261(−2)
	$Z = 50$		$Z = 100$	
1.5	−1.9350950449(0)	9.0855444521(−1)	−1.1999551218(0)	5.2477042713(−1)
1.8	−1.3244682284(0)	4.3954606399(−1)	−8.2290225574(−1)	2.4400783933(−1)
2.1	−9.5142225975(−1)	2.3523585071(−1)	−5.9670216402(−1)	1.2649088460(−1)
2.4	−7.1228429914(−1)	1.3574683480(−1)	−4.5435193348(−1)	7.1150577752(−2)
2.7	−5.5163559838(−1)	8.3054325418(−2)	−3.6049564921(−1)	4.2642381263(−2)
3.0	−4.3923034070(−1)	5.3249887999(−2)	−2.9620003869(−1)	2.6882872849(−2)
3.3	−3.5781951564(−1)	3.5475112112(−2)	−2.5089056592(−1)	1.7661323861(−2)

Таблица 1. Релятивистская дипольная поляризуемость основного состояния водородоподобных ионов с зарядом ядра $Z = 1, 30, 50, 100$ в надпороговой области

4. Дальнейшее использование штурмовских разложений КФГ уравнения Дирака.
Возможные применения и трудности.

Our publications

1. С.А.Запрягаев, Н.Л.Манаков, В.Г.Пальчиков. *Теория многозарядных ионов с одним и двумя электронами* // Энергоатомиздат, 1985.

2. С.А.Запрягаев. *Релятивистская теория многозарядных ионов* (докторская дисс.), 1997.

3. N.L.Manakov, S.A.Zapriagaev. *Dirac-Coulomb problem in the second-order Dirac equation approach* // Вестник ВГУ **1** (2000) 55.

4. Н.Л.Манаков, С.И.Мармо, А.Г.Файнштейн. *Аналитическое продолжение кулоновских функций Грина в область непрерывного спектра* // ТМФ **59** (1984) 49.

5. А.А.Крыловецкий, Н.Л.Манаков, С.И.Мармо. *Обобщенные штурмовские разложения кулоновской функции Грина* // ЖЭТФ **119** (2001) 45.

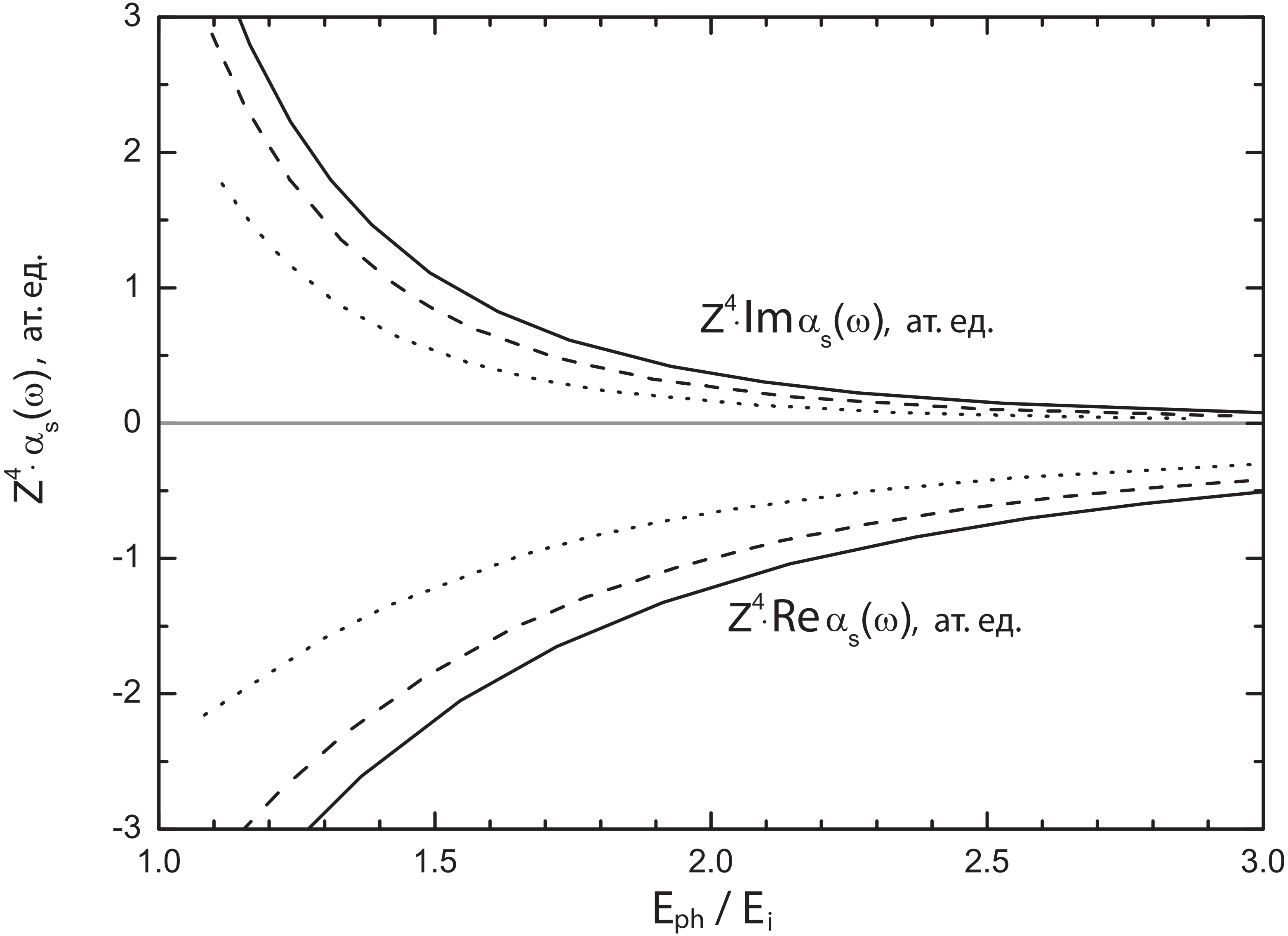

Рис. 1. Действительная и мнимая части скалярной динамической поляризуемости $\alpha_s(\omega)$ водородоподобных ионов с зарядом ядра $Z = 1$ (сплошные линии), $Z = 60$ (штриховые линии), $Z = 100$ (пунктирные). Полное согласие с [V. Yakhontov, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 093001]