arXiv:2305.04233v1 [physics.atom-ph] 7 May 2023

双中心异核狄拉克问题的有限基组方法

A.A. Kotov,[1] D. A. Glazov,[1] A. V. Malyshev,[1] V.M. Shabaev,[1] 和 G. Plunien[21]圣彼得堡国立大学物理系，俄罗斯圣彼得堡 *199034*[2]德累斯顿工业大学理论物理研究所，德国德累斯顿 *D-01062* ¨¨

摘要

基于双动能平衡有限基组展开的严格双中心方法，应用于单电子异核双原子铋-金、铀-铅和锕-铀准分子。在可能的情况下，将所得 1σ 基态能量与先前的计算结果进行比较。分析双中心势的单极近似中坐标系原点的三种不同位置：（1）两个原子核之间的中点；（2）重核中心；（3）轻核中心。结果发现，这些位置对应的计算结果存在显著差异。此外，还在单极近似下评估了单电子量子电动力学的主要贡献（自能和真空极化）。

I. 引言

重离子与原子相遇会短暂形成双原子准分子。目前，可在GSI亥姆霍兹重离子研究中心[1–5]对高电荷离子与中性原子（例如 Xe^{54+}–Xe）的碰撞开展实验研究。即将开展的 NICA [6], HIAF [7], 和 GSI/FAIR [8] 实验将能够观测重元素少电子体系的碰撞，直至裸原子核之间的碰撞，例如 U^{92+}–U^{92+}。

准分子能谱的理论预测在研究束缚态量子电动力学（BS-QED）中的临界现象以及解释实验数据方面都发挥着重要作用。人们已发展出多种理论方法来研究这些系统的相对论动力学；参见文献 [9–18] 及其中的参考文献。在 Born–Oppenheimer近似下，已有多项研究探讨了准分子系统的狄拉克问题 [9, 14, 19–35]。这些方法大多依赖于双中心势的分波展开，而另有一些研究考察了卡西尼坐标系[30] 和狄拉克–福克–斯图姆方法 [32, 33]的应用。

此前，我们采用双动能平衡有限基组方法 [36, 37]，在严格的双中心方法和单极近似下，研究了氩、铅和铀的单电子及双电子同核准分子。我们表明，所得解与其他独立计算得到的能谱符合良好。文献 [37], 表明，分析坐标系原点（c.s.o.）的不同位置，可以估算目前尚无法通过严格双中心计算评估的各项贡献中的非单极修正。

在本研究中，我们将方法拓展至单电子异核准分子的情形：铋–金、铀-铅和锕–铀。我们在双中心势和单极势下，针对广泛的核间距范围（最长达 1000 fm）计算基态能量。此外，我们还考虑了三种不同的单极势，具体取决于 c.s.o. 的放置方式。对于所研究的重准分子，QED 效应也发挥着重要作用。我们在单极近似下考虑了主要的自能和真空极化贡献。

相对论单位制 $\hbar = c = m = 1$ 和海维赛电荷单位 $\alpha = e^2/(4\pi)$

（精细结构常数）在全文中均有使用。

II. 方法

我们从 Born–Oppenheimer近似出发，其中电子由双中心狄拉克方程描述，

$$\left[\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+\beta+V(\vec{r})\right]\Psi_n(\vec{r})=E_n\Psi_n(\vec{r})\,, \tag{1}$$

$$V(\vec{r})=V^A_{\rm nucl}(|\vec{r}-\vec{R}_A|)+V^B_{\rm nucl}(|\vec{r}-\vec{R}_B|)\,, \tag{2}$$

其中 $\vec{r}$和 $\vec{R}_{A,\ B}$ 分别是电子和原子核的位置矢量； $V^{A,\ B\,核}(r)$ 是由原子核产生的球对称束缚势； $\vec{p}$ 是动量算符； $\vec{\alpha}$ 和 β 是标准的 4×4 狄拉克矩阵。原子核之间的距离记为 $D=|\vec{R}_A-\vec{R}_B|$。在本工作中，我们采用核电荷分布的费米模型。相应的显式公式众所周知，可参见例如文献 [38]。

双中心（TC）势关于核间轴呈轴对称性。在球坐标系（r,θ,φ）中，极角 θ 从该轴起算，势可以展开为以下级数：

$$V(r,\theta)=\sum_l V_l(r)P_l(\cos\theta);\quad V_l(r)=\frac{2l+1}{2}\int_0^\pi V(r,\theta)P_l(\cos\theta)\sin\theta d\theta. \tag{3}$$

该级数的第一项 $V_0(r)$ 对应于广泛使用的单极近似（MA）。在此近似下，初始的轴对称问题被化简为球对称问题。许多为原子问题开发的方法都可用于求解相应的狄拉克方程。对于 TC 和 MA 势，我们均采用双动能平衡有限基组方法；更多详情请参见文献 [36, 37, 39, 40]。

球坐标采用了三种不同的 c.s.o. 位置，分别为：（1）位于两个原子核之间的中点；（2）位于重核的中心；（3）位于轻核的中心。尽管 TC 方法在数值误差范围内给出的结果相同，但三个不同 c.s.o. 对应的 MA 值（分别记为 MA(1)、MA(2) 和 MA(3)）却存在显著差异。在较大距离处，TC 方法与不同的 MA 值通常会呈现定性上的分歧，而在 $D\to0$ 处，它们在形式上趋于相同的极限。

除狄拉克能量外，我们还计算了主要的 QED 修正——自能和真空极化。这些项仅在单极近似下进行处理；也就是说，在这种情况下使用 MA(1) 势。计算遵循文献中讨论的相关方法，例如参考文献 [41–46]。这些方法基于电子传播子的束缚势幂级数展开，以分离紫外发散并进行重整化。

III. 结果

在图1中，给出了采用 TC、MA(1)、MA(2) 和 MA(3) 势计算得到的铟–铀准分子的基态能量。尽管人们可能会预期，所有三种单极近似在核间距较小时都会趋于一致，但所得结果表明，MA(1) 能量实际上与 TC 结果更为接近。不过，随着核间距增大，TC 与 MA(1) 之间的偏差也随之增大。此外，我们注意到，在所示范围内，MA(2) 与 MA(3) 结果之间的差异几乎保持恒定。

所得结果的总不确定度主要有两个来源：（1）计算方案的数值误差，它由实际计算中所用有限基组的质量决定（基组误差）；（2）与核模型和均方根半径的不确定度相关的误差（核误差）。在核间距较小时，核误差是总不确定度的主要贡献，并且随着 D 增大而迅速减小。与此同时，基组误差相当小，例如，对于铀–铅准分子，在整个研究范围内，其数值不超过 10 eV。因此，在核间距较小（最高至 300 fm）时，总不确定度几乎完全由核误差决定；而在核间距较大（从 500 到 1000 fm）时，则由基组误差决定。

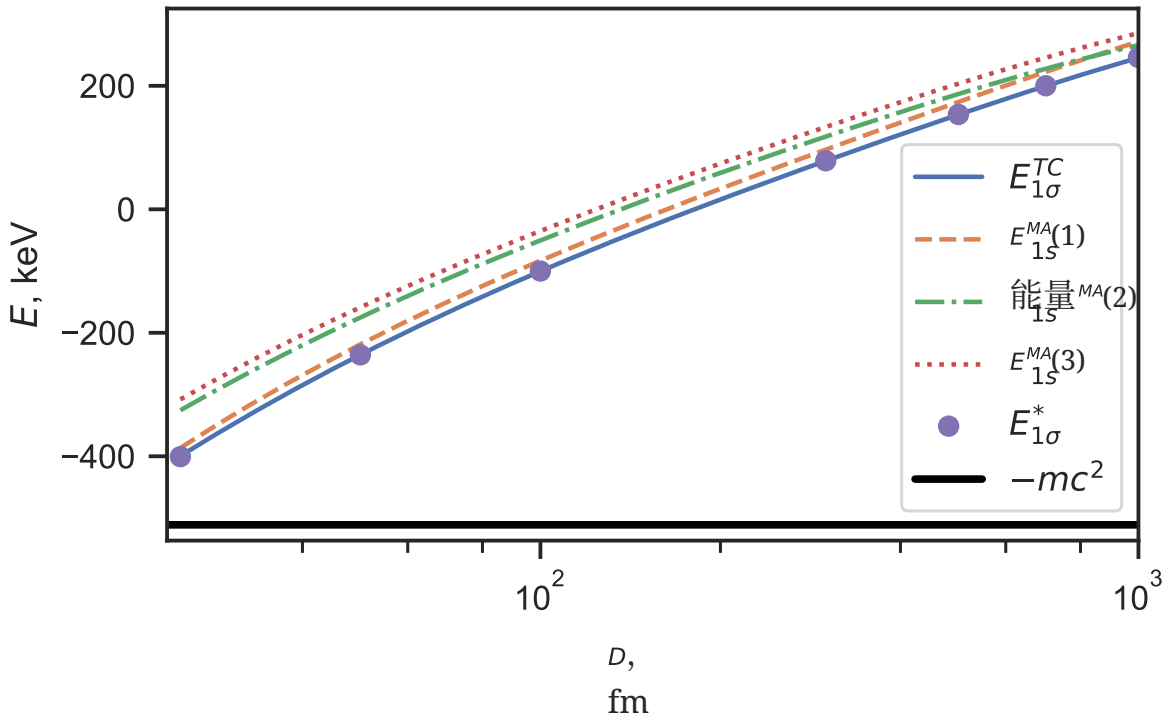

图1. 使用 TC、MA(1)、MA(2) 和 MA(3) 势计算的铀–铅准分子的基态狄拉克能量。 $E^{*}_{1\sigma}$ 对应于参考文献 [35]中的数据。

在图 2 中，我们将采用 TC 方法计算得到的铀–铅准分子基态能量与现有数据 [35] 进行了比较。图中绘出了差值 $\Delta E = E^{\mathrm{Ref.[35]}}_{1\sigma} - E^{TC}_{1\sigma}$。除核间距为 $D = 50$ fm 的结果外，所有数值都符合得很好。对于这一核间距，我们估计总数值误差为 ± 30 eV，比参考文献 [35] 中给出的相应不确定度小三倍。我们不清楚这种偏差产生的原因。

所有所研究准分子的数值数据，包括自能和真空极化贡献，均列于表 I。值得注意的是，结合能方面 TC 与 MA(1) 之间的差异显著更大，在大多数情况下超过总 QED 修正一个数量级。因此，采用严格的双中心方法计算狄拉克能量，对于准确确定电子能谱至关重要。

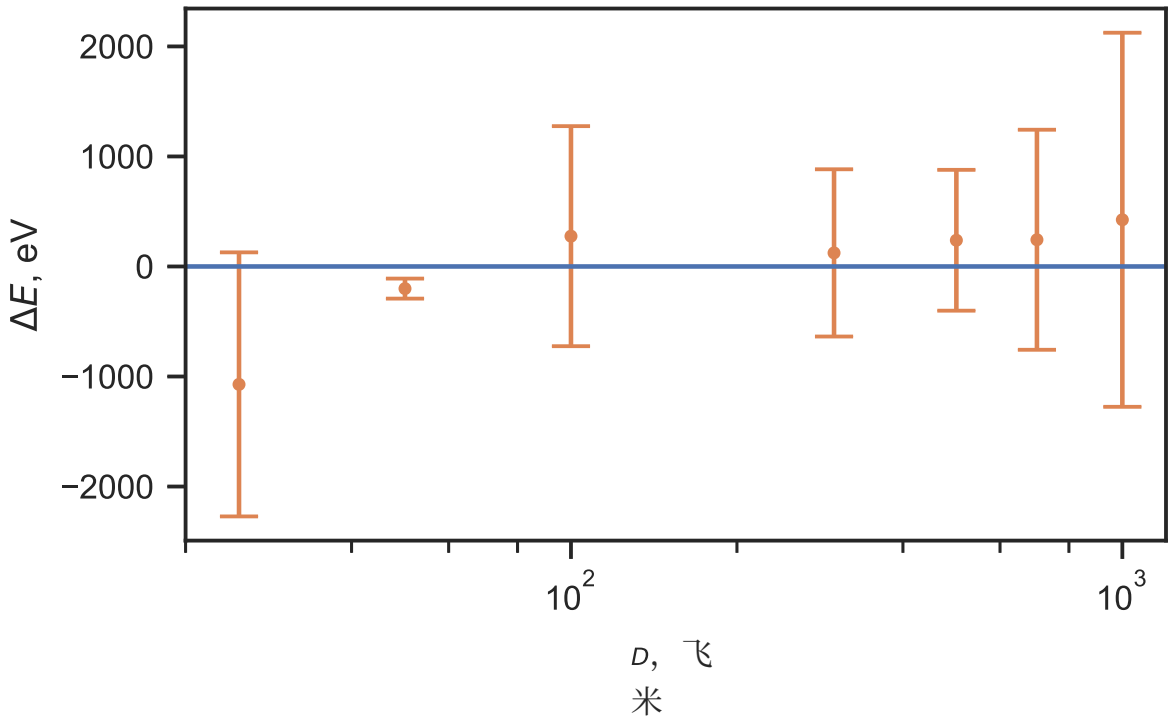

图 2. 参考文献 [35]中铀–铅准分子的基态结合能（单位：eV）与本研究所得结果的比较。详情请参阅正文。

表 I. 不同核间距下单电子铋–金、铀-铅和锕–铀准分子的基态狄拉克能量、自能和真空极化贡献（单位：eV）。

D, fm	$E_{1\sigma}^{\mathrm{TC}}$	$E_{1s}^{\mathrm{MA(1)}}$	$E_{1s}^{\mathrm{MA(2)}}$	$E_{1s}^{\mathrm{MA(3)}}$	$\mathrm{SE}_{1s}^{\mathrm{MA(1)}}$	$\mathrm{VP}_{1s}^{\mathrm{MA(1)}}$
			铋–金			
15	−237,546	−234,358	−196,293	−192,512	6900	−6025
25	−171,018	−164,778	−128,136	−123,948	5236	−3830
50	−79,797	−70,861	−39,310	−34,999	3376	−1849
100	6199	16,418	44,424	48,863	2071	−827
300	137,579	150,276	173,231	178,322	800	−187
500	198,231	213,083	230,800	236,409	451	−81
700	237,280	254,069	266,215	272,260	290	−43
1000	276,703	296,127	300,037	306,662	169	−21
			U–Pb			
25	−399,528	−386,390	−325,462	−307,855	7378	−6230
50	−235,560	−218,680	−175,040	−158,648	4446	−2722
100	−100,275	−83,130	−50,315	−35,068	2570	−1113
300	78,437	96,786	117,862	133,471	928	−227
500	153,372	173,899	186,844	203,557	512	−95
700	199,857	222,639	227,866	245,689	325	−50
1000	245,476	271,658	265,930	285,332	188	−24
			Cf–U			
50	−491,640	−459,027	−383,320	−366,680	6003	−4189
80	−329,591	−298,922	−242,676	−228,241	4007	−2162
100	−263,819	−234,379	−184,810	−171,155	3285	−1566
200	−91,283	−64,537	−30,027	−17,722	1701	−551
250	−43,071	−16,584	13,759	25,933	1349	−386
500	91,335	119,363	134,508	147,097	594	−115
700	149,097	179,309	184,223	197,470	372	−59
1000	204,297	238,194	229,390	243,724	212	−28

IV. 结论

本研究采用严格的双中心方法，计算了铋–金、铀-铅和锕–铀准分子在不同核间距（最大达 1000 fm）下的基态能量。我们还在三种不同的坐标系原点位置下考察了单极近似：（1）位于两个原子核的中点；（2）位于重核中心；（3）位于轻核中心。双中心方法所得结果与此前针对铋–金和铀–铅准分子的独立计算结果吻合良好。我们还在单极近似下计算了主要的量子电动力学贡献，即自能和真空极化。要准确预测准分子能谱，仍需进一步发展本文提出的方法，包括采用严格的双中心方法计算量子电动力学贡献。

致谢

单电子能量计算工作由俄罗斯科学基金会资助（资助项目编号：21-42-04411）。关于 QED 修正的研究得到“BASIS”理论物理与数学发展基金会的支持。

---

[1] P. Verma、P. Mokler、A. Br¨auning-Demian、H. Br¨auning、C. Kozhuharov、F. Bosch、D. Liesen、S. Hagmann、T. St¨ohlker、Z. Stachura、D.Banas、A. Orsic-Muthig、M. Sch¨offler、D. Sierpowski、U. Spillmann、S. Tashenov、S. Toleikis 和 M. Wahab, 《核仪器与方法物理研究B辑》**245**，56（2006），物质中的快重离子。

[2] P. Verma、P. Mokler、A.Br¨auning-Demian、C. Kozhuharov、H.Br¨auning、F.Bosch、D.Liesen、T. St¨ohlker、S. Hagmann、S. Chatterjee、A. Gumberidze、R. Reuschl、M. Sch¨offler、U. Spill- mann、A. Orsic Muthig、S. Tachenov、Z. Stachura 和 M. Wahab，《辐射物理与化学》**75**，2014（2006），第20届国际X射线与内壳层过程会议论文集。

[3] S. Hagmann, T.St¨ohlker, C.Kozhuharov, V.Shabaev, I.Tupitsyn, Y.Kozhedub, H.Rothard, U. Spillmann, R. Reuschl, S. Trotsenko, 等人，载于《美国物理联合会会议论文集》，第1336卷（美国物理联合会，2011年），第115页。

[4] B. Zhu, A. Gumberidze, T. Over, G. Weber, Z. Andelkovic, A. Br¨auning-Demian, R. J. Chen, D. Dmytriiev, O. Forstner, C. Hahn, F. Herfurth, M. O. Herdrich, P.-M. Hillenbrand, A. Kalinin, F. M. Kr¨oger, M. Lestinsky, Y. A. Litvinov, E. B. Menz, W. Middents, T. Morgen- roth, N. Petridis, P. Pf¨afflein, M.S. Sanjari, R. S. Sidhu, U. Spillmann, R. Schuch, S. Schippers, S. Trotsenko, L. Varga, G. Vorobyev, and T. St¨ohlker, 《物理评论A》**105**，052804（2022）。[5] P.-M. Hillenbrand, S. Hagmann, Y. S. Kozhedub, E. P. Benis, C. Brandau, R. J. Chen, D. Dmytriiev, O. Forstner, J. Glorius, R. E. Grisenti, A. Gumberidze, M. Lestinsky, Y. A. Litvinov, E. B. Menz, T. Morgenroth, S. Nanos, N. Petridis, P. Pf¨afflein, H. Rothard, M. S. Sanjari, R. S. Sidhu, U. Spillmann, S. Trotsenko, I. I. Tupitsyn, L. Varga, and T. St¨ohlker, 《物理评论A》**105**，022810（2022）。[6] G. M. Ter-Akopian, W. Greiner, I. N. Meshkov, Y. T. Oganessian, J. Reinhardt, and G. V. Trubnikov, 《国际现代物理学杂志E》**24**，1550016（2015），10.1142/S0218301315500160。[7] X. Ma, W. Wen, S. Zhang, D. Yu, R. Cheng, J. Yang, Z. Huang, H. Wang, X. Zhu, X. Cai, Y. Zhao, L. Mao, J. Yang, X. Zhou, H. Xu, Y. Yuan, J. Xia, H. Zhao, G. Xiao, and W. Zhan, 《核仪器与方法物理研究B辑》**408**，169（2017），载于第18届高电荷态离子物理国际会议（HCI-2016）论文集，波兰凯尔采，2016年9月11日至16日。[8]A. Gumberidze, T. St¨ohlker, H. Beyer, F. Bosch, A. Br¨auning-Demian, S. Hagmann, C. Kozhuharov, T. K¨uhl, R. Mann, P. Indelicato, W. Quint, R. Schuch, and A. Warczak, 《核仪器与方法物理研究B辑》**267**，248（2009），载于第四届原子系统基本过程国际会议论文集。[9] G. Soff, W. Greiner, W. Betz, and B. M¨uller, 《物理评论A》**20**，169（1979）。[10] U. Becker, N. Gr¨un, W. Scheid, and G. Soff, 《物理评论快报》**56**，2016（1986）。[11] J. Eichler, 《物理报告》**193**，165（1990）。[12] K. Rumrich, G. Soff, and W. Greiner, 《物理评论A》**47**，215（1993）。[13] D. C. Ionescu and A. Belkacem, 《物理学文摘》**T80**，128（1999）。[14] I. I. Tupitsyn, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev, G. B. Deyneka, S. Hagmann, C. Kozhuharov, G. Plunien, and T. St¨ohlker, 《物理评论A》**82**，042701（2010）。[15] I. I. Tupitsyn, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev, A. I. Bondarev, G. B. Deyneka, I. A. Maltsev, S. Hagmann, G. Plunien, and T. St¨ohlker, 《物理评论A》**85**，032712（2012）。

[16] I. A. Maltsev, V. M. Shabaev, R. V. Popov, Y. S. Kozhedub, G. Plunien, X. Ma, T. St¨ ohlker, 和 D. A. Tumakov, 《物理评论快报》123, 113401 (2019).[17] R. V. Popov, V. M. Shabaev, D. A. Telnov, I. I. Tupitsyn, I. A. Maltsev, Y. S. Kozhedub, A. I. Bondarev, N. V. Kozin, X. Ma, G. Plunien, T. St¨ohlker, D. A. Tumakov, 和 V. A. Zaytsev, Phys. Rev. D 102, 076005 (2020).[18] D. N. Voskresensky, Universe 7, 10.3390/universe7040104 (2021).[19] B. M¨uller, J. Rafelski, 和 W. Greiner, Phys. Lett. B 47, 5 (1973).[20] J. Rafelski 和 B. M¨uller, Phys. Lett. B 65, 205 (1976).[21] J. Rafelski 和 B. M¨uller, 《物理评论快报》36, 517 (1976).[22] V. Lisin, M. Marinov, 和 V. Popov, Phys. Lett. B 69, 141 (1977).[23] V. Lisin, M. Marinov, 和 V. Popov, Phys. Lett. B 91, 20 (1980).[24] L. Yang, D. Heinemann, 和 D. Kolb, Chem. Phys. Lett. 178, 213 (1991).[25] F. A. Parpia 和 A. K. Mohanty, Chem. Phys. Lett. 238, 209 (1995). [26] G. Deineka, Opt. Spectrosc. 84, 159 (1998).[27] V. Matveev, D. Matrasulov, 和 H. Y. Rakhimov, Phys. At. Nucl. 63, 318 (2000).[28] O. Kullie 和 D. Kolb, Eur. Phys. J. D 17, 167 (2001).[29]A. Ishikawa, H. Nakashima, 和 H. Nakatsuji, J. Chem. Phys. 128, 124103 (2008), 10.1063/1.2842068.[30] A. N. Artemyev, A. Surzhykov, P. Indelicato, G. Plunien, 和 T. St¨ ohlker, J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 43, 235207 (2010).[31] A. Ishikawa, H. Nakashima, 和 H. Nakatsuji, Chem. Phys. 401, 62 (2012), 电子关联方法及其应用的最新进展.[32] I. I. Tupitsyn 和 D. V. Mironova, Opt. Spectrosc. 117, 351 (2014).[33] D. Mironova, I. Tupitsyn, V. Shabaev, 和 G. Plunien, Chem. Phys. 449, 10 (2015).[34] A. N. Artemyev 和 A. Surzhykov, 《物理评论快报》114, 243004 (2015).[35] A. N. Artemyev, A. Surzhykov, 和 V. A. Yerokhin, 《物理评论A》106, 012813 (2022).[36]A. A. Kotov, D. A. Glazov, A. V. Malyshev, A. V. Vladimirova, V. M. Shabaev, 和 G. Plunien, X-Ray Spectrom. 49, 110 (2020), https://analyticalsciencejournals.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/xrs.3064.[37] A. A. Kotov, D. A. Glazov, V. M. Shabaev, 和 G. Plunien, Atoms 9, 10.3390/atoms9030044 (2021).

[38] F. A. Parpia 和 A. K. Mohanty, 《物理评论A》 **46**, 3735 (1992).[39] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, G. Plunien, 和 G. Soff, 《物理评论快报》 **93**, 130405 (2004).[40] E.B. Rozenbaum, D. A.Glazov, V.M.Shabaev, K. E.Sosnova,and D.A.Telnov,《物理评论A》 **89**, 012514 (2014).[41] V. A. Yerokhin 和 V. M. Shabaev, 《物理评论A》 **60**, 800 (1999).[42] D. A. Glazov, A. V. Volotka, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, 和 G. Plunien, 《物理快报A》**357**, 330 (2006).[43] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, G. Plunien, 和 V. A. Yerokhin, 《物理评论快报》**98**, 173004 (2007).[44] A. V. Volotka, D. A. Glazov, I. I. Tupitsyn, N. S. Oreshkina, G. Plunien, 和 V. M. Shabaev, 《物理评论A》 **78**, 062507 (2008).[45] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, G. Plunien, A. Surzhykov, 和 S. Fritzsche, 《物理评论A》 **88**, 032518 (2013).[46] A. V. Malyshev, D. A. Glazov, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, 和 V. A. Zaytsev, 《物理评论A》 **106**, 012806 (2022).