УДК 539.14 DOI 10.53403/9785951505163_2021_26_1_64

Электронный вакуумный заряд для сверхкритического ядра

С. Ф. Гаранин, Е. М. Кравец

Решается уравнение Дирака с учетом конечных размеров ядра. В этом случае решение уравнения Дирака можно построить для любой, положительной или отрииательной, энергии. Рассматривались ядра с различными зарядами Z, как $Z < Z_c$, так $u Z > Z_c$, где $Z = Z_c - «критическое» зна$ чение заряда, при котором энергия нижнего дискретного уровня доходит до границы нижнего континуума $\varepsilon = -mc^2$. Определена поляризация вакуума и найден вакуумный заряд для нескольких значений Z. Найдено, что для докритического заряда ядра Z < Z_c полный заряд вакуума равняется нулю, а для Z > Z_c вакуум перестраивается и полный заряд вакуума становится равным –2е. Получено распределение вакуумного заряда для j = 1/2 как для докритических, так и для сверхкритических ядер.

Введение

Как известно [1], уравнение Дирака с чисто кулоновым полем и точечным ядром можно рассматривать лишь при $Z\alpha < 1$ (Z – заряд ядра, $\alpha = e^2/\hbar c \equiv 1/137,04$ – постоянная тонкой структуры), т. е. Z < 137. Учет конечных размеров ядра [2] снимает эту трудность, потенциал становится конечным на малых расстояниях и решение уравнения Дирака можно построить для любой, положительной или отрицательной, энергии. Однако, с возрастанием Z энергия нижнего дискретного уровня уменьшается и при некотором «критическом» значении заряда $Z = Z_c$ доходит до границы нижнего континуума $\varepsilon = -1^*$.

[©] Physics Letters. 2019. A 383. P. 27-34.

^{*} Мы будем пользоваться системой единиц $\hbar = c = m = 1$, где m – масса электрона. Значениям $\epsilon \ge 1$ соответствует верхний континуум решений уравнения Дирака, $-1 < \epsilon < 1$ – дискретный спектр, а $\epsilon \le -1$ – нижний континуум.

ЭЛЕКТРОННЫЙ ВАКУУМНЫЙ ЗАРЯД ДЛЯ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ЯДРА

При $Z > Z_c$ первый дискретный уровень исчезает из спектра и, как показано в работе [3], вакуум перестраивается – ему соответствует состояние с зарядом -2e. При этом для близких к критическому зарядов ядра $Z - Z_c << Z_c$ у отрицательных энергий при $-\varepsilon - 1 << 1$ имеется квазидискретный уровень и распределение заряда -2e в пространстве близко к распределению электронной плотности для этого квазидискретного уровня (а также с несколько меньшей точностью близко к распределению заряда в *K*-оболочке для $Z = Z_c$), на котором согласно принципу Паули могут находиться два электрона. Если создавать ядро с $Z > Z_c$, сталкивая два тяжелых ядра достаточно медленно, т. е. с нерелятивистской скоростью, то переход в состояние с заряженным вакуумом будет осуществляться в результате рождения двух электрон-позитронных пар, позитроны уходят на бесконечность, а электроны распределяются вблизи ядра, образуя новое вакуумное состояние.

Вопросы заряженного вакуума рассматривались не только в многочисленных работах, цитируемых в [3], но и в последующих работах, цитируемых в [4], с использованием в т. ч. и квазиклассического статистического подхода (релятивистского уравнения Томаса–Ферми), и в многочисленных работах, цитируемых в [5], в т. ч. рассматривающих и постановку экспериментов для регистрации возникающих при образовании сверхкритических ядер позитронов. Задачей о рождении пар занимались также специалисты по математической физике, которые получили строгие результаты [6, 7] в вопросе об их существовании в зависящем от времени внешнем поле. Этот вопрос сохраняет актуальность и в настоящее время (см., например, работу [8]).

Однако, существующая в литературе определенная идеологическая ясность в последнее время начала в некоторых работах подвергаться сомнениям. Так, в работе [9] точка зрения об образовании заряженного вакуума для сверхкритических ядер была признана неправомерной, поскольку, по мнению авторов, «рождение электрон-позитронных пар из вакуума сверхкритическим кулоновским полем невозможно: электрон такой пары не может оккупировать уже занятое состояние в море Дирака». Далее, в работе [10], посвященной энергетическому спектру электрона в кулоновском поле сверхтяжелого ядра, высказывается мнение, что одночастичная релятивистская квантовая механика с гамильтонианом Дирака неудовлетворительна с физической точки зрения ввиду неограниченности энергетического спектра электронов снизу.

В то же время, поскольку для конечных потенциалов решение уравнения Дирака строится для любой энергии, можно определить поляризацию вакуума и найти вакуумный заряд для любого, в т. ч. и сверхкритического, ядра, используя формулу [11]:

$$\rho = \frac{e}{2} \left\{ \sum_{(+)} \left| \psi_{\kappa, \varepsilon} \left(r \right) \right|^2 - \sum_{(-)} \left| \psi_{\kappa, \varepsilon} \left(r \right) \right|^2 \right\},\tag{1}$$

где $\kappa = \mp (j+1/2)$ для $j = l \pm 1/2$, (+) означает сумму по состояниям дискретного спектра $-1 < \varepsilon < 1$ и интеграл по верхнему континууму $\varepsilon \ge 1$, а (-) – интеграл по нижнему континууму $\varepsilon \le -1$. Формула (1) является исходной при приближенном, при $Z - Z_c << Z_c$, описании K-оболочки сверхкритического ядра, а также для приближенных расчетов (с учетом части спектра энергий), не основанных на использовании параметров малости, распределения заряда в K- и L-оболочках для атомов с большими Z [5]. Можно, однако, используя формулу (1) для всего спектра энергий, провести расчет поляризации вакуума точно для фиксированного значения к и убедиться, что для докритического заряда ядра $Z < Z_c$ полный заряд вакуума равняется нулю,

а для $Z > Z_c$ он равен -2e. При этом одновременно будет получено распределение вакуумного заряда для сверхкритического ядра. Такой подход должен быть справедливым для любого заряда Z и не содержит параметров малости, таких как α . Учет поправок, связанных с α , можно производить, используя это нулевое приближение. Такую программу мы проведем в настоящей работе.

Этот подход, насколько нам известно, ранее не исследовался. Стандартным для квантовоэлектродинамических (QED) задач является использование теории возмущений с использованием параметра малости $Z\alpha$ (см., например, [12], где расчет поляризации вакуума произведен с точностью до третьего порядка). Однако, такой поход, к сожалению, нельзя использовать для определения вакуумного заряда в сверхкритических полях, где происходит перестроение спектра энергий и необходим выход за рамки теории возмущений. В другом подходе для исследования поляризации вакуума для сверхкритического заряда [5, 13] для расчета плотности вакуумного заряда разность между (1) и соответствующим выражением для докритической плотности интегрируется по энергии вблизи резонанса, соответствующего квазидискретному уровню, «ныряющему» в нижний континуум. Это, вероятно, приближенно правильно на малых расстояниях, однако и там точность остается неопределенной, если ширина квазидискретного уровня не мала. На больших же расстояниях, скорее всего, плотность должна осциллировать, а интеграл от нее – расходиться. Поэтому остается вопрос о полном заряде в сверхкритическом потенциале, тем более что рассматривается не весь спектр энергий. Поэтому у некоторых авторов [6] появляются сомнения в рождении пар в сверхкритическом поле. Представляется, что прямое интегрирование точного выражения (1) по всему спектру уровней поможет снять эти вопросы и уточнить результаты расчетов вакуумного заряда. Численное интегрирование уравнений Дирака можно проводить для любых конечных (а не только кулоновских) потенциалов, и потому этот подход можно использовать для других задач (например, можно учесть влияние вакуумного заряда на само его распределение, т. е. решать задачу с учетом самосогласования).

Радиальные уравнения

Радиальные функции уравнения Дирака с центрально-симметричным потенциалом U(r)удовлетворяют системе уравнений [1]

$$\frac{dF}{dr} + \frac{\kappa}{r}F - (\varepsilon + 1 - U)G = 0,$$

$$\frac{dG}{dr} - \frac{\kappa}{r}G + (\varepsilon - 1 - U)F = 0.$$
(2)

Для конечных потенциалов функции *F* и *G* обращаются в нуль при r = 0. В численных расчетах для выхода из особой точки r = 0 использовалось разложение по степеням *r*. Коэффициенты разложения были получены, подставляя это разложение в (2) и учитывая, что $U(r \rightarrow 0) \equiv U_0 = \text{const}$.

На больших расстояниях волновые функции дискретного спектра экспоненциально затухают и должны быть нормированы условием: $\left\|\psi\right\|^2 dV = 1$; для функций *F* и *G* это означает

$$\int_{0}^{\infty} \left(F^{2} + G^{2} \right) dr = 1.$$
 (3)

Для удобства численных расчетов будем считать, что на больших расстояниях потенциал U(r) зануляется (для достаточно больших радиусов зануление потенциала не должно привести к большим ошибкам в определении вакуумного заряда). Тогда можно считать, что волновые функции на больших расстояниях ведут себя как волновые функции свободного движения, чем можно воспользоваться для определения нормировочного множителя. Условия для определения нормировочного множителя.

При $U(r) \equiv 0$ решение системы уравнений (2) имеет вид

$$F(r) = \sqrt{\frac{pr}{2}} \sqrt{\frac{\varepsilon+1}{\varepsilon}} J_{\left|\kappa+\frac{1}{2}\right|}(pr),$$

$$G(r) = \operatorname{sign}(\kappa) \sqrt{\frac{pr}{2}} \sqrt{\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon}} J_{\left|\kappa-\frac{1}{2}\right|}(pr),$$
(4)

где $p = \sqrt{\epsilon^2 - 1}$. Волновые функции непрерывного спектра считаем нормированными на б-функцию по импульсам

$$\int \Psi_p^* \Psi_{p'} \, dV = \delta \big(p - p' \big) \,. \tag{5}$$

Решение системы (2) на больших расстояниях для произвольного потенциала отличается от (4) только фазовыми сдвигами δ_{κ} , значения которых определяются видом поля на близких расстояниях [1]. В численных расчетах определить значения этих сдвигов с достаточной точностью затруднительно, поэтому для нормировки *F* и *G* необходимо использовать выражение, не содержащее δ_{κ} .

Функции F и G выражаются, согласно (4), через функции Бесселя с положительными индексами $\left(\text{через } J_{\frac{1}{2}} \text{ и } J_{\frac{3}{2}} \text{ в случае } |\kappa| = 1 \right)$. С помощью рекуррентного соотношения для цилиндрических функций: $z J_{p-1}(z) + z J_{p+1}(z) = 2p J_p(z)$, выразим функции Бесселя с отрицательными индексами $J_{-\frac{1}{2}}$ и $J_{-\frac{3}{2}}$ через функции Бесселя с положительными индексами $J_{\frac{1}{2}}$ и $J_{\frac{3}{2}}$. Затем, выражая функции Бесселя $J_{\frac{1}{2}}$ и $J_{\frac{3}{2}}$ через F и G, с помощью соотношения [14], справедливого для

функций Бесселя с полуцелыми индексами: $J_{\kappa-\frac{1}{2}}(z) J_{-\kappa-\frac{1}{2}}(z) + J_{\kappa+\frac{1}{2}}(z) J_{-\kappa+\frac{1}{2}}(z) = (-1)^{\kappa} \frac{2}{\pi z}$, получим, что на больших расстояниях функции *F* и *G* должны удовлетворять соотношениям

$$(\varepsilon - 1)\left(1 + \frac{1}{(pr)^2}\right)F^2 + \frac{2}{r}FG + (\varepsilon + 1)G^2 = \frac{p^2}{\pi\varepsilon} \text{ при } \kappa = -1,$$
$$(\varepsilon + 1)\left(1 + \frac{1}{(pr)^2}\right)G^2 - \frac{2}{r}FG + (\varepsilon - 1)F^2 = \frac{p^2}{\pi\varepsilon} \text{ при } \kappa = 1.$$

При возрастании энергии увеличивается частота осцилляций функций F и G согласно (4), поэтому вычисление этих функций на больших расстояниях становится затруднительным. Для определения нормировочного множителя при $|\varepsilon| >> 1$ можно воспользоваться тем, что в этом случае плотность заряда^{**}

$$\rho_{\kappa,\varepsilon}(r) \equiv \left| \Psi_{\kappa,\varepsilon}(r) \right|^{2^{**}} = \frac{1}{r^2} \left(F^2 + G^2 \right), \tag{6}$$

усредненная по осцилляциям, становится равной квазиклассическому значению (11) (см. следующий раздел) на расстояниях, гораздо меньших радиуса зануления потенциала.

Для удобства расчетов плотность заряда в непрерывном спектре для данного є находилась одновременно для электрона и позитрона, т. е. вычислялась величина

$$\tilde{\rho}_{\kappa, \varepsilon}(r) = \left| \Psi_{\kappa, \varepsilon}(r) \right|^2 - \left| \Psi_{\kappa, -\varepsilon}(r) \right|^2.$$
(7)

При заданной энергии є в отсутствие внешнего поля (при $U(r) \equiv 0$) удобнее проводить вычисления, когда плотность заряда равна нулю для любых значений энергии электрона, однако при решении системы (2) при заданном к и последующем вычислении (7) это не выполняется. Из-за симметрии системы (2) при $U(r) \equiv 0$ относительно замены $\kappa \to -\kappa$, $\varepsilon \to -\varepsilon$ этим свойством обладает сумма $\tilde{\rho}_{\kappa,\varepsilon}(r) + \tilde{\rho}_{-\kappa,\varepsilon}(r)$. Поэтому при решении системы (2) в непрерывном спектре для заданного значения энергии ε вычислялась величина $R_{\kappa,\varepsilon}(r) = r^2 \left(\left| \psi_{|\kappa|,|\varepsilon|}(r) \right|^2 + \left| \psi_{-|\kappa|,|\varepsilon|}(r) \right|^2 - \frac{1}{2} \right)$

$$-\left|\psi_{|\kappa|,-|arepsilon|}(r)
ight|^{2}-\left|\psi_{-|\kappa|,-|arepsilon|}(r)
ight|^{2}
ight).$$

На рис. 1 приведен график функции $R_{\kappa,\epsilon}(r)$ для нескольких значений энергии, показывающий характерное поведение плотности заряда в непрерывном спектре.

^{*&}lt;sup>2</sup> Здесь и далее плотность заряда и $|\psi_{\kappa,\epsilon}(r)|^2$ будем считать умноженными на 4π , учитывая интегрирование по углам.



Рис. 1 показывает, что функция $R_{\kappa,\varepsilon}(r)$ в области r > 0,1 имеет осциллирующее поведение, в котором частота осцилляций зависит от энергии ε . При интегрировании по непрерывному спектру по формуле (1) эти высокочастотные осцилляции исчезают и в результате получается функция (рис. 2, и раздел «Вычислительная методика»)

$$r^{2}\rho^{C}(r) = \sum_{\varepsilon>1} R_{\kappa,\varepsilon}(r), \qquad (8)$$

имеющая лишь небольшие затухающие колебания в области r > 0,1. Аналогичные колебания имеет функция

$$r^{2}\rho^{D}(r) = \sum_{-1<\varepsilon<1} r^{2} \left(\left| \Psi_{|\kappa|, \varepsilon}(r) \right|^{2} + \left| \Psi_{-|\kappa|, \varepsilon}(r) \right|^{2} \right), \tag{9}$$

найденная при суммировании по дискретному спектру, и связаны эти колебания с поведением волновых функций дискретного спектра. После суммирования (8) и(9) эти особенности взаимно компенсируются и получается гладкая монотонная функция $r^2\rho(r) = r^2(\rho^D(r) + \rho^C(r))$ (остаются лишь высокочастотные колебания на малых радиусах, связанные с обрезанием интегрирования в численном расчете, см. раздел «Вычислительная методика»).



Рис. 2. Функции $r^2 \rho^D(r)$ – (1), $r^2 \rho^C(r)$ – (2), $r^2 \rho(r)$ – (3) для Z = 100: ----- – 1, ----- – 2, ----- – 3

Квазиклассическое решение радиального уравнения

Рассмотрим поведение решений радиального уравнения при больших волновых числах, т. е. когда можно считать, что функции *F* и *G* ведут себя как $\exp(\pm i \int k(r) dr)$, а характерные длины волн 1/p малы по сравнению с характерными размерами задачи (квазиклассическое приближение). Тогда система уравнений (2) запишется в виде (здесь в методических целях мы сохраним единицу *m* для массы электрона)

$$\pm ikF + \frac{\kappa}{r}F - (\varepsilon + m - U)G = 0,$$

$$\pm ikG - \frac{\kappa}{r}G + (\varepsilon - m - U)F = 0$$

и из него будет следовать дисперсионное соотношение

$$\left(\varepsilon - U\right)^{2} = k^{2} + m^{2} + \frac{\kappa^{2}}{r^{2}}.$$
 (10)

Уравнение (10) показывает, что эффективная масса электронов при одномерном движении с фиксированным к равна $m\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{m^2r^2}}$ и растет с уменьшением радиуса. Это означает, что

ЭЛЕКТРОННЫЙ ВАКУУМНЫЙ ЗАРЯД ДЛЯ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ЯДРА

на малых радиусах размытие волнового пакета электрона становится меньше и электрон можно локализовать не с точностью до комптоновской длины волны, а с точностью до некоторой доли радиуса $\sim r/\kappa$.



Рис. 3. Квазиклассически разрешенные области движения электронов при к = 1, Z = 180: 1 – область верхнего континуума, 2 – дискретный спектр, 3 и 4 – области нижнего континуума

На рис. 3 изображен график эффективной потенциальной энергии: $U_{eff\pm}(r) = U(r) \pm \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}}$ ия $\kappa = 1$ и потенциала U(r), представляющего собой «обрезанный» кулоновский

для $\kappa = 1$ и потенциала U(r), представляющего собой «обрезанный» кулоновский потенциал

$$U(r) = -Z\alpha \begin{cases} r_0^{-1}, & r < r_0 \\ r^{-1}, & r > r_0, \end{cases}$$

для $r_0 = 0.031 (\approx 12\Phi)$ и Z = 180, что в этом случае несколько превышает Z_c (см. раздел «Вычислительная методика»). Выше энергий

$$\max\begin{cases} U(r) + \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}} \\ -1 \end{cases}$$

располагается квазиклассически разрешенная область движения электронов, состоящая из дискретного (при $\varepsilon < 1$) спектра и области верхнего континуума (при $\varepsilon > 1$). Квазиклассически же разрешенная область нижнего континуума (заштрихованная светло-серым цветом на рис. 3) состоит из двух доменов: области энергий $U(r) + \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}} < \varepsilon < -1$, появляющейся при Z >141.3,

и области $\varepsilon < U(r) - \sqrt{1 + \frac{\kappa^2}{r^2}}$, между которыми располагается классически запрещенная область,

соответствующая потенциальному барьеру для движения электронов между ними. Наличие этого барьера приводит к тому, что уровни в первом домене являются квазидискретными, с шириной, экспоненциально обращающейся в нуль на пороге (при $\varepsilon = -1$) [3]. Отметим, что квазиклассические условия квантования позволяют довольно точно определять положение этих уровней. Так, даже для первого уровня в этом домене условие его появления, определенное по правилам кван-

тования Бора–Зоммерфельда: $\int k \, dr = \frac{\pi}{2}$, дает для $r_0 = 0,031$ величину $Z_c = 181,42$, с хорошей точностью совпадающую с точным значением $Z_c = 177,46$ (см. следующий раздел).

Квазиклассическое пространственное распределение вероятности нахождения электрона будет пропорционально $\frac{1}{v} = \frac{dk}{d\varepsilon}$, что с учетом (10) и нормировки (5) дает

$$\rho_{\kappa,\varepsilon}^{QCl} = \frac{p}{\pi \varepsilon r^2} \frac{\varepsilon - U(r)}{\sqrt{\left(\varepsilon - U(r)\right)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}}}.$$
(11)

Коэффициент в (11) был получен при сравнении выражения $\frac{dk}{d\varepsilon}$ и усредненной по осцилляциям формулы (6) при $r \to \infty$ с учетом того, что в этом случае $U(r) \to 0$ и функции *F* и *G* из (6) удовлетворяют (4) с точностью до фазового сдвига δ_{κ} .

Вычислим, используя (11), квазиклассическую плотность распределения зарядов в поле U(r). Для этого, в соответствии с (1), надо проинтегрировать (11) по положительным энергиям и вычесть интеграл по отрицательным энергиям. Тогда плотность распределения зарядов (без учета множителя e/2) будет равна

$$\begin{split} \rho^{QCl} r^2 &= \int_{\sqrt{\epsilon_l^2 - 1}}^{\sqrt{\epsilon_l^2 - 1}} dp \Big(2\rho_{\kappa,\epsilon}^{QCl} r^2 - 2\rho_{\kappa,-\epsilon}^{QCl} r^2 \Big) = \int_{\sqrt{\epsilon_l^2 - 1}}^{\sqrt{\epsilon_l^2 - 1}} dp \frac{2\sqrt{\epsilon^2 - 1}}{\pi\epsilon} \Bigg[\frac{\epsilon - U}{\sqrt{\left(\epsilon - U\right)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}}} - \frac{\epsilon + U}{\sqrt{\left(\epsilon + U\right)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}}} \Bigg] = \\ &= \frac{2}{\pi} \Bigg[\sqrt{\left(\epsilon - U\right)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}} - \sqrt{\left(\epsilon + U\right)^2 - 1 - \frac{\kappa^2}{r^2}} \Bigg]_{\epsilon_l}^{\epsilon_l}, \end{split}$$

где ε₁ и ε₂ – пределы интегрирования по энергии (здесь для некоторой общности не конкретизируем пределы интегрирования). Если взять интеграл по всей возможной области энергий (так что ε_1 будет определяться обращением в нуль соответствующего радикала, а $\varepsilon_2 = \infty$), получим

$$\rho^{QCl} r^2 = -\frac{4}{\pi} U \,. \tag{12}$$

При вычислении $r^2 \rho^{QCl}(r)$ здесь область нижнего континуума (3) на рис. 3 (если таковая появляется при больших Z) мы относили к верхнему континууму. Эффект перехода электронов из дискретного спектра в нижний континуум при увеличении заряда ядра будем далее учитывать точно. Формула же (12) показывает, что даже при постоянной величине потенциала буквальное применение выражения (1) будет приводить к объемному вакуумному заряду. Очевидно, однако, что наличие постоянного во всем пространстве потенциала не должно приводить к объемно-заряженному вакууму.

Фактически, конечно, вакуум будет перестраиваться так, чтобы изменение потенциала на постоянную величину не приводило к объемному заряду (12), что можно обеспечить перестроением части спектра электронов при больших ε и к. Таким образом, при рассмотрении вакуумного заряда для фиксированного значения к из выражения (1) следует вычесть величину (12), так что ρ_{vac} будет определяться

$$\rho_{\text{vac}}(r) = \rho - \rho^{QCl} = e\left\{\sum_{(+)} \left|\psi_{\kappa, \varepsilon}(r)\right|^2 - \sum_{(-)} \left|\psi_{\kappa, \varepsilon}(r)\right|^2 + \frac{4}{\pi} \frac{U}{r^2}\right\}$$
(13)

(мы мы учли множитель 2 из-за двукратного вырождения по проекции момента при $|\kappa| = 1$, соответственно сумма в (13) не содержит суммирования по этим проекциям). Таким образом, предполагаем, что вычитание (12) из (1) осуществляет своеобразную перенормировку заряда. В стандартной QED процедуре перенормировки [1], когда потенциал U(r) является чисто кулоновским,

это условие является условием, налагаемым на поляризационный оператор $P(k^2): \frac{P(k^2)}{k^2} \to 0$

при $k^2 \rightarrow 0$. Наши расчеты далее покажут, что формула (13) обеспечивает нулевой заряд вакуума для любого несверхкритического потенциала и это можно рассматривать как условие «полноты» системы функций в одномерной задаче.

Если рассматривать трехмерную задачу, то, используя квазиклассическое приближение, можно увидеть, что буквальное применение формулы (1) будет приводить к расходимостям при больших энергиях, так что формулу (1) в этом случае также следует исправить, вычитая соответствующие квазиклассические выражения.

Вычислительная методика

При численном расчете системы (2) мы стартовали из точки r = 0,0001 с помощью разложения F и G по степеням и интегрировали уравнения методом Рунге–Кутта четвертого порядка. Шаг сетки по радиусу был равен $h_r = 10^{-5}$ при $r < r_0$ и $h_r = 5 \cdot 10^{-5}$ при $r > r_0$. Энергии дискретного спектра, по которым проводится суммирование в (9), находились из условия затухания волновой функции на больших расстояниях, а нормировочный коэффициент определялся из условия (3). При интегрировании по непрерывному спектру ($|\varepsilon| > 1$) мы интегрировали по импульсам и шаг по импульсам выбирался так, чтобы обеспечить сходимость выражения (8) с учетом корневой особенности при $\varepsilon \rightarrow 1$. При $1 < \varepsilon < 20$ этот шаг брался равным $h_p = 0,001$, при $20 < \varepsilon < 100$ $h_p = 0,005$, при $100 < \varepsilon < 2000$ $h_p = 0,01$. Интегрирование по энергиям в формулах (13) обрезалось при $|\varepsilon| = 2000$, поскольку вклад от энергий $|\varepsilon| > 2000$ в полный вакуумный заряд, вычисляемый с помощью (11) по формуле: $Q_{\rm vac} = \int \rho_{\rm vac}(r)r^2 dr$, становится сравнимым с погрешностью вычислений. Достижение достаточной точности контролировалось как сходимостью результатов при дроблении сеток, так и получением гладкого монотонного поведения функции $\rho(r)$ на рис. 2. Таким образом находилась функция $\rho(r)$ при $Z < Z_c$. Интегральную точность наших расчетов для определения полного вакуумного заряда можно оценить как $\sim 10^{-4}$.

При превышении критического значения заряда ядра в спектре появляется квазидискретный уровень, обусловленный погружением основного уровня дискретного спектра ε_0 в область нижнего континуума. В результате при энергиях, близких к ε_0 , у плотности $\rho_{\kappa,\varepsilon}(r)$ на радиусах $r \sim 0,1$ появляется резкий минимум, приводящий в итоге к тому, что полный вакуумный заряд Q_{vac} становится равным -2e. Характерная ширина по ε этого уровня γ зависит от Z по закону

$$\gamma \sim \exp\left(-\operatorname{const}\sqrt{\frac{Z_{c}}{Z-Z_{c}}}\right)$$
 [3], т. е. она очень мала для Z, не сильно превышающих Z_{c} (для ядер

Z = 180 и Z = 190 она оказывается равной $4 \cdot 10^{-6}$ и $5 \cdot 10^{-4}$ соответственно). Таким образом, используемая при $Z < Z_c$ сетка энергий не обеспечивает подробное описание зависимости $\rho_{\kappa,\epsilon}(r)$, необходимое для вычисления Q_{vac} с достаточной точностью. Поэтому для сверхкритических ядер сетка по энергии сильно дробилась при $\varepsilon \sim \varepsilon_0$ до величин порядка $\sim 0,01\gamma$, добиваясь сходимости по полному заряду Q_{vac} с точностью $\sim 10^{-4}$.

Результаты расчетов для ядер с различными Z

Докритические ядра с зарядами Z = 100 и 175

Рассмотрим результаты расчетов для ядра с зарядом Z = 100, заметно меньшим Z_c . Основной уровень дискретного спектра ($\kappa = -1$, $n_r = 0$) в этом случае $\varepsilon_0 = 0,6860$. На рис. 4 показаны графики плотностей $r^2 \rho^D(r)$ и $r^2 \rho^C(r)$ (8, 9), соответствующие дискретному и непрерывному спектрам, суммарной плотности заряда $r^2 \rho(r)$ и величины $r^2 \rho^{QCl}(r)$ (12).



Рис. 4. Величины, полученные для ядра с $Z = 100: 1 - r^2 \rho^D(r), 2 - r^2 \rho^C(r), 3 - r^2 \rho(r), 4 - r^2 \rho^{QCl}(r):$

Из рис. 4 видно, что для ядра с Z = 100 основной вклад в суммарную плотность заряда вносит непрерывный спектр. При r > 0,1 плотность заряда $\rho(r)$ хорошо совпадает с $\rho^{QCl}(r)$. При малых радиусах r < 0,01 функция осциллирует вокруг квазиклассического значения $-\frac{4}{\pi}U_0$. Осцилляции плотности при малых радиусах связаны с тем, что интегрирование по энергиям в формуле (8) обрезалось на уровне $|\varepsilon| = 2000$.

Распределение величины $\rho_{\text{vac}}(r)/\rho^{QCl}(r)$ представлено на рис. 5. Несмотря на то что плотность заряда $\rho(r)$ в области $r \sim r_0 = 0,031$ заметно меньше квазиклассической величины $\rho^{QCl}(r)$, полный вакуумный заряд при Z = 100 получается равным $Q_{\text{vac}} = 2,26 \cdot 10^{-5} e$ и оказывается порядка погрешности вычислений. Таким образом, можно сказать, что наши вычисления подтвердили, что для $|\kappa| = 1$ для докритического ядра $Z < Z_c$ полный заряд вакуума равен нулю.

Если сравнить точное распределение $r^2\rho(r)$ и квазиклассическое $r^2\rho^{QCl}(r)$, пропорциональное потенциалу, то, отвлекаясь от осцилляций $r^2\rho(r)$, связанных с численной неточностью и обусловленных обрезанием интегрирования на $|\varepsilon| = 2000$, можно увидеть, что квантово-механическое распределение $r^2\rho(r)$ как бы размывает квазиклассическое $r^2\rho^{QCl}(r)$, причем размытие на малых радиусах оказывается порядка r, а на больших расстояниях – порядка 1. Это как раз



связано с отмечавшейся зависимостью эффективной массы электрона от радиуса $m\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{m^2r^2}}$.

В результате поляризации вакуума отрицательный заряд, образующийся на малых радиусах, полностью компенсируется положительным зарядом, распределенным на больших r. Величина каждого из этих зарядов для Z = 100 согласно рис. 5 оказывается равной 0,134e.

Надо сказать, что распределение вакуумного заряда значительно отличается от плотности заряда в потенциале Юлинга [1]. Знак объемного заряда поляризации вакуума противоположен знаку плотности заряда в потенциале Юлинга: на малых расстояниях в нашей задаче плотность заряда отрицательна, а для потенциала Юлинга заряд на малых расстояниях положителен (и бесконечен), а на больших расстояниях наша плотность заряда положительна и убывает как $1/r^3$, тогда как для потенциала Юлинга она отрицательна и убывает экспоненциально. По-видимому, это связано с перестроением части спектра электронов при больших ε и к. Следует считать, что в линейном по Z приближении сумма вкладов от всех к дает потенциал Юлинга. Однако, можно надеяться, что нелинейные по Z вклады в поляризацию вакуума, если они будут быстро убывать на больших r, учитываются правильно и их вклады можно суммировать для разных к.

При возрастании заряда ядра Z энергия нижнего дискретного уровня уменьшается и достигает границы нижнего континуума $\varepsilon = -1$ при некотором Z_c . Значение Z_c зависит от поведения потенциала на малых расстояниях и в рассматриваемой нами модели прямоугольного обрезания получается равным $Z_c = 177, 5$, что хорошо согласуется с данными работ [8, 9]. Для ядра с зарядом Z = 175, немного меньшего Z_c , энергия нижнего уровня дискретного спектра $\varepsilon_0 = -0,8831$. Распределение плотности $\rho(r)$, полученное для Z = 175, близко по форме к распределению, найденному для Z = 100, и отличается лишь большим вкладом дискретного спектра. Это распределение представлено на рис. 5. Полный вакуумный заряд $Q_{vac} = -1,03 \cdot 10^{-4} e$, т. е. он равен нулю в пределах погрешностей вычислений. Сравнение кривых для Z = 100 и Z = 175 на рис. 5 показывает, что в диапазоне Z от 100 до 175 поляризация вакуума примерно линейна по Z. Так, суммарный вакуумный заряд, образующийся на больших радиусах, равен 0,277 е и примерно соответствует увеличенному в 1,75 раз заряду для Z = 100. Нелинейные по Z члены дают положительный вклад в величину этого заряда, и этот вклад по сравнению с линейным для Z = 175 можно оценить как ~23 %.

Полученная в расчетах для Z = 100 и Z = 175 точность вычислений показывает, что эти расчеты можно применить для нахождения вакуумного заряда для сверхкритических ядер $Z > Z_c$.

Сверхкритические ядра с зарядами Z = 180 и 190

Когда Z превышает Z_c , полный заряд вакуума должен стать равным -2e. Покажем это на примере ядра с $Z = 180 > Z_c$. Результаты расчетов для этого ядра представлены на рис. 6.



Рис. 6. Величины, полученные для ядра с $Z = 180: 1 - r^2 \rho^D(r), 2 - r^2 \rho^C(r), 3 - r^2 \rho(r), 4 - r^2 \rho^{QCl}(r):$

Рис. 6 показывает, что, в отличие от ядер с Z = 100 и 175, в сверхкритическом ядре с Z = 180 плотность заряда на радиусах ~0,1 заметно меньше $\rho^{QCl}(r)$, приближаясь к ней лишь при r > 1.

Распределение вакуумного заряда представлено на рис. 5. Величина Q_{vac} получается равной $Q_{\text{vac}} = -2,0001e$. Таким образом, подтверждается точка зрения об образовании заряженного вакуума для сверхкритических ядер.

На рис. 5 приведено распределение вакуумного заряда для Z = 190 - ядра, для которого Z значительно превышает Z_c , но границу $\varepsilon = -1$ еще не пересек следующий дискретный уровень. Сравнение кривых для Z = 180 и 190 показывает, что найденные распределения качественно и даже количественно похожи. Полный вакуумный заряд для Z = 190, как и Z = 180, получается равным $Q_{vac} = -2,0001e$, т. е. он равен -2e в пределах погрешностей вычислений.

При дальнейшем повышении заряда ядра Z границу $\varepsilon = -1$ будут пересекать следующие уровни: $2P_{1/2}$, $2S_{1/2}$, $3P_{1/2}$ и т. д., и при каждом пересечении вакуумный заряд будет возрастать на 2. Соответствующие вычисления можно проделать и для этих случаев (одновременно учитывая некоторую экранировку заряда ядра вакуумными электронами). Мы, однако, ограничимся здесь только первым уровнем, имея в виду принципиальную сторону вопроса.

Распределение вакуумного заряда

Для того чтобы различить линейные и нелинейные по Z вклады в плотность вакуумного заряда $\rho_{vac}(r)$ докритического ядра, представим $\rho_{vac}(r)$ в виде разложения (такая зависимость $\rho_{vac}(r)$ от Z была нами получена в результате интерполяции результатов расчетов с разными докритическими Z, в т. ч. и Z = 50; из-за небольшого набора данных мы имели возможность использовать только один нелинейный член)

$$\rho_{\rm vac}(r) = Z\alpha \,\rho_1(r) + (Z\alpha)^5 \,\rho_2(r), \qquad (14)$$

где $\rho_1(r)$ и $\rho_2(r)$ – универсальные функции, не зависящие от Z.

Функции $\rho_1(r)$ и $\rho_2(r)$ были найдены, используя результаты расчетов с Z = 100 и 175. Полученные функции представлены на рис. 7, для удобства показа на графике представлены функции $r^3\rho_1(r)$ и $r^3\rho_2(r)$. Высокочастотные осцилляции функций связаны с неточностями расчетов, вызванными обрезанием спектра энергий в численных расчетах. У величины $r^2\rho_1(r)$ виден излом на радиусе $r_0 = 0,031$, отражающий поведение потенциала U(r) в этой точке. Рисунок показывает, что нелинейный вклад в поляризацию вакуума даже для Z, близких к критическим, мал по сравнению с линейным.



Рис. 7. Функции $r^{3}\rho_{1}(r) - (1)$ и $r^{3}\rho_{2}(r) - (2)$, (3) – асимптотика (15) функции $\rho_{1}(r)$, (4) – асимптотика (16) функции $\rho_{2}(r)$: — 1, — 2, — 3, — 4

На расстояниях r >> 1 функции $r^2 \rho_1(r)$ и $r^2 \rho_2(r)$ спадают по следующим законам:

$$r^2 \rho_1(r) \sim r^{-3},$$
 (15)

$$r^{2}\rho_{2}(r) \sim \exp(-ar), \quad a = 1, 43.$$
 (16)

Если нелинейный по Z вклад в поляризацию вакуума определяется правильно, то из-за противоположного знака объемному заряду потенциала Юлинга он для больших Z будет в некоторой степени компенсировать влияние этого объемного заряда.

В сверхкритическом ядре к выражению (14) добавляется слагаемое, отвечающее за дополнительный вакуумный заряд $Q_{\text{vac}} = -2e$ (назовем ее плотностью заряда вакуумной оболочки $\rho_0(r)$):

$$\rho_{\rm vac}(r) = Z\alpha \rho_1(r) + (Z\alpha)^4 \rho_2(r) + \rho_0(r).$$
(17)

Плотность заряда вакуумной оболочки $r^2 \rho_0(r)$, полученная для Z = 180 и 190 с помощью формулы (17), представлена на рис. 8.



Рис. 8. Плотность заряда вакуумной оболочки $r^2 \rho_0(r)$ для Z = 180 и 190 и эта же величина на больших расстояниях. Пунктирными линиями показаны асимптотики $r^2 \rho_0(r) \sim \exp(-C\sqrt{r})$

Из рис. 8 видно, что, в соответствии с данными работы [3], заряд вакуумной оболочки локализован в пределах области r < 1. Его распределение весьма похоже на распределение заряда вакуумной оболочки, приведенное в работе [5] и полученное приближенно. Наше распределение кажется несколько более широким: так, наш максимум плотности соответствует примерно в 1,3 большим радиусам, чем для распределения, приведенного в работе [5]. Рис. 8 показывает, что при увеличении Z происходит некоторое сжатие вакуумной оболочки.

Оказывается, что на больших радиусах плотность заряда вакуумной оболочки хорошо описывается зависимостью

$$r^{2}\rho_{0}\left(r\right) \sim \exp\left(-C\sqrt{r}\right),\tag{18}$$

которая соответствует спаду плотности для дискретного уровня на границе нижнего континуума [3]. Для Z = 180 такой спад плотности в зависимости от радиуса для представленных на рис. 8 радиусов можно было бы объяснить квазиклассическим подбарьерным затуханием волновой функции для квазидискретного уровня и соответствующим спадом плотности $\sim \exp(-\int |k| dr)$, где k определяется формулой (10), в которой ε – энергия квазидискретного уровня: $\varepsilon_0 = -1,127$. Однако, для Z = 190 квазидискретный уровень $\varepsilon_0 = -1,685$ находится довольно далеко от границы $\varepsilon = -1$, барьер для него невысок, заканчивается на радиусе r = 2,3 и никак не может дать спада плотности сти рис. 8. Тем не менее, величина $r^2 \rho_0(r)$ соответствует асимптотике (18) даже несколько луч-

ше, чем в случае Z = 180. Постоянная C: C = 6,0 для Z = 180 (величина $4\sqrt{2Z\alpha} = 6,48$), C = 5,7 для Z = 190 (величина $4\sqrt{2Z\alpha} = 6,66$). Таким образом, постоянная C примерно соответствует аналогичной величине $4\sqrt{2Z\alpha}$ из работы [3], но, в отличие от [3], уменьшается при увеличении Z. Интересно было бы выяснить причины асимптотического поведения (18) плотности заряда ваку-умной оболочки.

Заключение

Используя формулу (1), в которой производятся суммирование и интегрирование по энергиям для фиксированного значения к (т. е. для одномерной задачи), рассматривается поляризация вакуума, возникающая в конечном заданном потенциале, в т. ч. и в потенциале, соответствующем сверхкритическому заряженному ядру, для которого дискретные уровни опускаются в нижний континуум. Показано, что в этом случае необходимо модернизировать эту формулу, вычитая из нее выражение, которое дает эта формула для постоянного потенциала на каждом радиусе. Тогда для докритических зарядов ядер полный заряд вакуума оказывается равным нулю, а для сверхкритических ядер он становится кратным удвоенному (из-за вырождения по направлениям момента) числу уровней, перешедших из дискретного спектра в нижний континуум. Однако, линейный по Z вклад в поляризацию вакуума имеет знак, противоположный знаку объемного заряда в потенциале Юлинга, что можно объяснить перестроением электронного спектра при высоких энергиях и больших к. Можно надеяться, однако, что нелинейный по Z вклад, который спадает по радиусу довольно быстро, и распределение по радиусу заряда вакуумных оболочек, которые получаются в этом подходе, описываются правильно. Учет же потенциала Юлинга в полную поляризацию вакуума можно производить отдельно, после суммирования нелинейных вкладов и вкладов вакуумных оболочек от всех к.

Произведены численные расчеты поляризации вакуума для обрезанного кулоновского потенциала для ряда докритических и сверхкритических Z: 100, 175, 180, 190. Расчеты показали, что для докритических Z поляризация вакуума в нашем подходе пропорциональна разнице между размытым потенциалом и точным, причем степень размытия на малых радиусах – порядка доли радиуса, а на больших расстояниях – порядка комптоновской длины волны электрона. Величина нелинейного по Z вклада в поляризацию вакуума оказывается небольшой и, например, для Z = 175, близкого к Z_c , для полного заряда вакуума на больших расстояниях составляет ≈ 23 %. Для $Z > Z_c$ вакуум перестраивается и полный заряд вакуума становится равным -2e. Плотность

этого заряда на больших расстояниях спадает как $\exp\left(-C\sqrt{r}\right)$.

Список литературы

1. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989.

2. Pomeranchuk I., Smorodinsky Ya. On energy levels in systems with Z > 137 // J. Phys. USSR. 1945. Vol. 9. P. 97–100.

3. Зельдович Я. Б., Попов В. С. Электронная структура сверхтяжелых атомов // Успехи физических наук. 1971. Т. 105, № 3. С. 403–440.

4. Мигдал А. Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. М.: Наука, 1978.

5. Greiner W., Muller B., Rafelski J. Quantum electrodynamics of strong fields. Berlin: Springer-Verlag, 1985.

6. Nenciu G. Existence of the spontaneous pair creation in the external field approximation of Q.E.D. // Commun. Math. Phys. 1987. 109. P. 303–312.

7. Pickl P., Dürr D. Adiabatic pair creation // Ibid. 2008. 282. P. 161–198.

8. 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. 2017. C 77(11). P. 782.

9. Кулешов В. М., Мур В. Д., Нарожный Н. Б. и др. Кулоновская задача с зарядом ядра Z > Z_{cr} // Успехи физических наук. 2015. Т. 185, № 8. С. 845–852.

10. Воронов Б. Л., Гитман Д. М., Левин А. Д., Феррейра Р. Особенности энергетического спектра электрона в кулоновском поле сверхтяжелого ядра // Теоретическая и математическая физика. 2016. Т. 187, № 2. С. 213–231.

11. Dirac P. A. M. Discussion of the infinite distribution of electrons in the theory of the positron // Proc. Cambridge Phil. Soc. 1934. 30. P. 150–163.

12. Wichmann E. H., Kroll N. M. Vacuum polarization in a strong Coulomb field // Phys. Rev. 1956. 101. P. 843–859.

13. Muller B., Rafelski J., Greiner W. Electron wave functions in over-critical electrostatic potentials // Nuovo Cimento. 1973. A 18. P. 551–573.

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

Electronic Vacuum Charge for a Supercritical Nucleus

S. F. Garanin, E. M. Kravets

The Dirac equation is solved taking into account the finite size of the nucleus. In this case a solution of the Dirac equation can be constructed for any energy, both positive and negative. We consider nuclei with different charges Z, both $Z < Z_c$ and $Z > Z_c$, where $Z = Z_c$, is the «critical» charge,

at which the energy of the lowest discrete state reaches the boundary of the lower continuum $\varepsilon = -mc^2$. Polarization of vacuum is determined, and the vacuum charge for several values of Z is found. For an undercritical nuclear charge, $Z < Z_c$, the total vacuum charge appears to be zero, while for $Z > Z_c$, the vacuum gets rearranged, and the total vacuum charge becomes equal to -2e. The vacuum charge distribution for j = 1/2 for both undercritical and overcritical nuclei is calculated.