

ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ФОЛДИ-ВАУТХАЙЗЕНА

В. П. Незнамов, А. А. Садовой, А. С. Ульянов

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Проведено сравнение методов вычисления матричных элементов оператора радиальной координаты электрона в произвольной степени в представлении Фолди-Ваутхайзена и при использовании решений уравнения Дирака для 1s-состояний водородо- и гелиеподобных ионов трансурановых элементов. Полученные аналитические и численные результаты для 1s-состояний водородо- и гелиеподобных ионов подтверждают выполнение условия редукции волновой функции при переходе к представлению Фолди-Ваутхайзена и демонстрируют возможность расчета матричных элементов с использованием только одной (верхней или нижней) компоненты дираковской биспинорной волновой функции.

Введение

Исследование свойств релятивистских систем имеет теоретическое и прикладное значение. В физике элементарных частиц интенсивно изучались и изучаются различные связанные системы из лептонов и барионов. В прикладных исследованиях интерес вызывают, например, свойства тяжелых и трансурановых ионов, где существенными являются релятивистские эффекты.

Решение релятивистских уравнений связано с немалыми трудностями. Поэтому представляется актуальной проблема разработки более простых методов расчетов свойств релятивистских систем.

В данной работе используются волновые функции в представлении Фолди-Ваутхайзена (ФВ) [1, 2] и аналитические решения уравнения Дирака для водородо- и гелиеподобных ионов тяжелых и трансурановых элементов [3, 4] с целью демонстрации преимуществ представления Фолди-Ваутхайзена при вычислении матричных элементов различных операторов, в частности тех, которые могут быть представлены в виде степенного ряда по координатам электрона.

1. Некоторые свойства представления Фолди-Ваутхайзена

Представление ФВ было введено в работе [1]. Оно получено из представления Дирака соответствующим унитарным преобразованием. Для свободного движения уравнение Дирака имеет вид

$$p_0 \Psi_D(\vec{x}, t) = (H_0)_D \Psi_D(\vec{x}, t) = (\vec{\alpha} \vec{p} + \beta m) \Psi_D(\vec{x}, t). \quad (1)$$

Если ввести унитарное преобразование [1]

$$U_0 = \sqrt{\frac{E+m}{2E}} \left(1 + \frac{\beta \vec{\alpha} \vec{p}}{E+m} \right), \quad E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2},$$

то уравнение (1) преобразуется к виду

$$p_0 \Psi_{FW}(\vec{x}, t) = (H_0)_{FW} \Psi_{FW}(\vec{x}, t) = \beta E \Psi_{FW}(\vec{x}, t). \quad (2)$$

В уравнении (2)

$$(H_0)_{FW} = U_0 (H_0)_D U_0^\dagger = \beta E; \quad \Psi_{FW}(\vec{x}, t) = U_0 \Psi_D(\vec{x}, t).$$

В уравнениях (1), (2) и ниже используется система единиц $\hbar = c = 1$; скалярное произведение четырех векторов берется в виде $xy \equiv x^\mu y_\mu = x^0 y^0 - x^k y^k$; $\mu = 0, 1, 2, 3$;

$$\kappa = 1, 2, 3; \quad p^\mu = i \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \right); \quad \Psi_D(\vec{x}, t), \Psi_{FW}(\vec{x}, t) - \text{четырёх-}$$

компонентные волновые функции; $\vec{\alpha} = \beta \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$,

$\beta \equiv \gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix}$ – матрицы Дирака; σ^i – двухкомпонентные матрицы Паули.

Решениями уравнения (1) являются плоские волны с положительной и отрицательной энергией

$$\Psi_{FW}^{(+)}(x, s) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} U_s e^{-ipx}; \quad \Psi_{FW}^{(-)}(x, s) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} V_s e^{ipx};$$

$$p_0 = \sqrt{(\vec{p}^2 + m^2)}. \quad (3)$$

В выражении (3) $U_s = \begin{pmatrix} \Phi_s \\ 0 \end{pmatrix}$; $V_s = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_s \end{pmatrix}$; Φ_s и χ_s –

двухкомпонентные нормированные спиновые функции

Паули. Для U_s и V_s справедливы следующие соотношения ортонормированности и полноты:

$$\begin{aligned} U_s^\dagger U_{s'} &= V_s^\dagger V_{s'} = \delta_{ss'}; \quad U_s^\dagger V_{s'} = V_s^\dagger U_{s'} = 0; \\ \sum_s (U_s)_\gamma (U_s^\dagger)_\delta &= \frac{1}{2}(1+\beta)_{\gamma\delta}; \\ \sum_s (U_s)_\gamma (U_s^\dagger)_\delta &= \frac{1}{2}(1-\beta)_{\gamma\delta}. \end{aligned} \quad (4)$$

В выражениях (3), (4) γ , δ относятся к спинорным индексам, s – к спиновым индексам. Далее при суммировании по спинорным индексам знак суммы и сами индексы не указываются.

В случае взаимодействия дираковской частицы со статическими внешними полями замкнутое преобразование ФВ существует лишь при условии коммутации четных и нечетных частей дираковского гамильтониана [5]. По определению четный оператор не смешивает верхние и нижние компоненты волновой функции.

В общем случае взаимодействия фермиона с произвольным бозонным полем проблема перехода между представлениями Дирака и ФВ существенно усложняется. Общая форма точного ФВ-преобразования была найдена Эриксоном [6] в случае произвольных статических внешних полей. Преобразование Эриксона в один шаг переводит дираковскую волновую функцию и дираковский гамильтониан в ФВ-представление.

Другим прямым способом перехода к представлению ФВ в общем случае взаимодействия с произвольным бозонным полем является предложенный одним из авторов в работе [7] (см. также обзор [8]) способ получения релятивистского гамильтониана в виде ряда по степеням константы связи.

Кроме прямых способов получения гамильтонианов в ФВ-представлении существует много пошаговых методов построения гамильтонианов, свободных от нечетных операторов. В частности, один из таких методов использовался в классической работе Фолди–Ваутхайзена [1] для получения гамильтониана в присутствии статического внешнего электромагнитного поля в виде ряда по степеням $\frac{1}{m}$.

В работах [2, 7, 9] показано, что пошаговые методы приводят к ФВ-представлению лишь для одного, двух первых шагов.

В работе [2] исследуются основные свойства волновых функций в ФВ-представлении и устанавливается однозначная связь между волновыми функциями в дираковском и ФВ-представлениях.

Необходимым условием перехода от представления Дирака к представлению ФВ является диагонализация гамильтониана относительно верхних и нижних компонент волновой функции.

Вторым условием ФВ-преобразования является обнуление верхних и нижних компонент биспинорной волновой функции $\Psi_D(\vec{x}, t) = A \begin{pmatrix} \varphi(\vec{x}, t) \\ \chi(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$ и преобразо-

вание нормировочного оператора волновой функции $\Psi_D(x)$ в единичный оператор. В работе [2] это условие доказано и названо «условием редукции волновой функции».

Для случая, когда гамильтониан Дирака не зависит от времени (случай свободной частицы или стационарных внешних полей), это условие может быть представлено в следующей форме:

$$\begin{aligned} \Psi_D^{(+)}(\vec{x}, t) &= \\ = e^{-iEt} A_+ \begin{pmatrix} \varphi^{(+)}(\vec{x}) \\ \chi^{(+)}(\vec{x}) \end{pmatrix} &\rightarrow \Psi_{FW}^{(+)}(\vec{x}, t) = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \varphi^{(+)}(\vec{x}) \\ 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Psi_D^{(-)}(\vec{x}, t) &= \\ = e^{iEt} A_- \begin{pmatrix} \varphi^{(-)}(\vec{x}) \\ \chi^{(-)}(\vec{x}) \end{pmatrix} &\rightarrow \Psi_{FW}^{(-)}(\vec{x}, t) = e^{iEt} \begin{pmatrix} 0 \\ \chi^{(-)}(\vec{x}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

В этом уравнении E – модуль оператора энергии частицы; A_+ и A_- – нормировочные операторы, которые в общем случае могут отличаться для решений с положительными и отрицательными энергиями. Определение операторов A_+ и A_- предполагает, что волновые функции $\Psi_D^{(+)}(\vec{x}, t)$, $\Psi_D^{(-)}(\vec{x}, t)$ и спиноры $\varphi^{(+)}(\vec{x})$, $\chi^{(-)}(\vec{x})$ нормированы на единицу

$$\begin{aligned} \int \Psi_D^{(\pm)\dagger}(\vec{x}, t) \Psi_D^{(\pm)}(\vec{x}, t) dV &= 1; \quad \int \varphi^{(+)\dagger}(\vec{x}) \varphi^{(+)}(\vec{x}) dV = 1; \\ \int \chi^{(-)\dagger}(\vec{x}) \chi^{(-)}(\vec{x}) dV &= 1. \end{aligned}$$

Плюсы и минусы обозначают состояния с положительной и отрицательной энергиями соответственно.

Для свободной частицы

$$E = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}; \quad A_+ = A_- = \sqrt{\frac{E+m}{2E}}; \quad (6)$$

$\varphi^{(+)}(\vec{x}) = e^{i\vec{p}\vec{x}}\varphi$ и $\chi^{(+)}(\vec{x}) = e^{-i\vec{p}\vec{x}}\chi$ для решений с положительной и отрицательной энергиями соответственно; φ и χ – двухкомпонентные спиновые функции Паули (см. выражение (3)).

Функции $\Psi_D^{(\pm)}(\vec{x}, t)$ и $\Psi_{FW}^{(\pm)}(\vec{x}, t)$ являются соответствующими решениями уравнения Дирака и уравнения, преобразованного в представление ФВ для свободной частицы и частицы, движущейся в стационарных внешних полях. Условие редукции требует приведения волновой функции Дирака к форме $\Psi_{FW}^{(\pm)}(\vec{x}, t)$ с единичным нормировочным оператором.

В общем случае гамильтонианы Дирака и Фолди–Ваутхайзена зависят от времени. В этом случае условие редукции (5) имеет такой же смысл. Мы используем

разложения в ряд по решениям уравнения Дирака, полученных либо для свободно движущихся частиц, либо для движения в присутствии стационарных внешних полей, при решении конкретных физических задач (по крайней мере, с использованием теории возмущений).

Гамильтониан для релятивистских частиц в представлении ФВ содержит квадратный корень из операторов (см. (1) и (3)). Поэтому представление Дирака обычно более удобно, чем представление ФВ для получения собственных волновых функций и собственных значений оператора Гамильтона. Многие точные решения релятивистских волновых уравнений были получены только в дираковском представлении [10]. Тем не менее вывод уравнений движения в этом представлении значительно более сложная задача, чем в представлении ФВ [5, 6].

Использование связи между волновыми функциями в представлениях Дирака и ФВ, определенных уравнением (5), очень важно. Можно вычислить собственные волновые функции в представлении Дирака и затем получить соответствующие собственные функции в представлении ФВ. После этого можно определить ожидаемые значения требуемых операторов, соответствующих определенным классическим величинам, и получить квантовое и полуклассическое уравнения движения. Когда полуклассическое приближение недопустимо, должна быть получена квантовая формулировка, описывающая эволюцию операторов. Полуклассическая эволюция классических величин, соответствующих этим операторам, может быть получена посредством усреднения операторов по решениям квантовомеханической задачи.

Примером такой эволюции является временная зависимость средней энергии и момента в двухуровневой системе. Другой пример – это динамика спина во внешних полях. Эти задачи очень трудно решать в представлении Дирака. Очень важно, что связь волновых функций (5) является точной, поэтому с помощью (5) вышеуказанные задачи можно решить с любой требуемой точностью. Пример описания эволюции спина в представлении ФВ был дан в [11].

В дираковском представлении связь между операторами и классическими величинами довольно сложна и иногда неочевидна. Явные выражения для операторов, которые соответствуют определенным классическим величинам, известны только для свободных релятивистских частиц (см. [1]). Очевидно, что выражения для этих операторов в общем случае должны зависеть от параметров, которые характеризуют внешнее поле. Преобразование ФВ свободно от этого недостатка. Главные операторы, включающие операторы координаты, момента и спина, имеют такую же форму, как и в нерелятивистской квантовой теории.

В данной работе в дираковском и ФВ представлениях (с использованием условия (5)) рассчитываются матричные элементы оператора координат электрона в произвольной степени (r^n) с использованием дираковских волновых функций водородоподобных и гелиеподобных ионов, определенных в работах [3, 4, 12].

Фактически на этих примерах в работе еще раз тестируется условие редукции волновой функции (5) и демонстрируется более удобный способ вычисления матричных элементов с использованием лишь одной (верхней или нижней) компоненты дираковской биспинорной волновой функции.

2. Матричные элементы оператора координаты электрона в произвольной степени

2.1. Водородоподобные ионы

Волновая функция водородоподобного иона в общем виде определяется следующим образом [3]:

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} f(r)\Omega_{jlm}(\vec{\Omega}); \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} g(r)\Omega_{j'l'm}(\vec{\Omega}), \end{pmatrix} \quad (7)$$

где угловая часть $\Omega_{jlm}(\vec{\Omega})$ – трехмерные шаровые спиноры; j – полный момент; l – орбитальный момент; m – проекция полного момента; r – модуль радиальной координаты электрона.

При нормировке

$$\int_0^{\infty} (f^2 + g^2) r^2 dr = 1 \quad (8)$$

для $1s_{1/2}$ состояния функции f и g имеют вид

$$f = \frac{(2\lambda)^{3/2} \sqrt{E+2}}{\sqrt{2\Gamma(2\gamma+1)}} e^{-\lambda r} (2\lambda r)^{\gamma-1}; \quad (9)$$

$$g = -\frac{(2\lambda)^{3/2} \sqrt{-E}}{\sqrt{2\Gamma(2\gamma+1)}} e^{-\lambda r} (2\lambda r)^{\gamma-1}, \quad (10)$$

где $\lambda = \sqrt{-E(E+2)}$; $\gamma = \sqrt{1-(Z\alpha)^2}$; E – энергия связи системы в единицах mc^2 , единица длины равна классическому радиусу электрона $\frac{e^2}{mc^2} = 2,818 \cdot 10^{-13}$ см;

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,036}$ – постоянная тонкой структуры.

В случае нормировки (8) момент n -го порядка координаты электрона определяется выражением

$$\langle r^n \rangle = \int_0^{\infty} (f^2 + g^2) r^{n+2} dr = \frac{1}{(2\lambda)^n} \frac{\Gamma(2\gamma+n+1)}{\Gamma(2\gamma+1)}. \quad (11)$$

При единичной нормировке верхней компоненты $\tilde{f}(r)$ волновой функции

$$\int_0^{\infty} \tilde{f}^2(r) r^2 dr = 1 \quad (12)$$

нормировку (8) можно записать в виде

$$A^2 \int_0^{\infty} (\tilde{f}^2(r) + g^2(r)) r^2 dr = 1, \quad (13)$$

где
$$\tilde{f}(r) = \frac{(2\lambda)^{3/2}}{\sqrt{\Gamma(2\gamma+1)}} e^{-\lambda r} (2\lambda r)^{\gamma-1}, \quad (14)$$

и в виде

$$A = \sqrt{\frac{2-E}{2}}.$$

Очевидно, что при этом выражение (11) для момента $\langle r^n \rangle$ сохраняется.

Согласно условию (5), волновая функция в представлении ФВ представляет собой для нашего случая нормированную на единицу верхнюю компоненту (14) биспинорной волновой функции (7).

Вычислим моменты координаты электрона с нормировкой (12) и с использованием лишь верхней компоненты волновой функции

$$\begin{aligned} \langle r^n \rangle &= \int_0^{\infty} \tilde{f}^2 r^{n+2} dr = \frac{(2\lambda)^3}{\Gamma(2\gamma+1)} \int_0^{\infty} e^{-2\lambda r} (2\lambda r)^{\gamma-1} r^{n+2} dr = \\ &= \frac{1}{(2\lambda)^n} \frac{\Gamma(2\gamma+n+1)}{\Gamma(2\gamma+1)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Видно, что выражения (11) и (15) совпадают друг с другом.

Абсолютные значения моментов координаты электрона трансурановых элементов с $n = -2, \dots, 3$ приведены в табл. 1.

2.2. Гелиеподобные ионы

Для гелиеподобных ионов используется решение уравнения Дирака в минимальном приближении метода многомерных угловых кулоновских функций [13]. Волновая функция состояния 0^+ гелиеподобных ионов, соответствующая конфигурации $1s^2$, имеет вид

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \begin{pmatrix} \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ X(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \end{pmatrix} = \frac{1}{\rho^2} \begin{pmatrix} M(\rho) U(\vec{\Omega}_1, \vec{\Omega}_2) \\ N(\rho) W(\vec{\Omega}_1, \vec{\Omega}_2) \end{pmatrix}, \quad (16)$$

где $\vec{\rho} = \vec{r}_1 + \vec{r}_2$ – коллективная переменная и многомерные угловые функции представляют собой детерминанты Слейтера

$$U(\vec{\Omega}_1, \vec{\Omega}_2) = \sqrt{\frac{\Gamma(6)}{2!}} \begin{pmatrix} \varphi_+(\vec{\Omega}_1) & \varphi_+(\vec{\Omega}_2) \\ \varphi_-(\vec{\Omega}_1) & \varphi_-(\vec{\Omega}_2) \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$W = \sqrt{\frac{\Gamma(6)}{2!}} \begin{pmatrix} \chi_+(\vec{\Omega}_1) & \chi_+(\vec{\Omega}_2) \\ \chi_-(\vec{\Omega}_1) & \chi_-(\vec{\Omega}_2) \end{pmatrix}$$

из базисных функций соответственно

$$\varphi_{\frac{1}{2}0m}(\vec{\Omega}_i) = \sqrt{\frac{1}{\Gamma(3)}} \Omega_{\frac{1}{2}0m}(\vec{\Omega}_i); \quad (18)$$

$$\chi_{\frac{1}{2}1m}(\vec{\Omega}_i) = \sqrt{\frac{1}{\Gamma(3)}} \Omega_{\frac{1}{2}1m}(\vec{\Omega}_i),$$

где $\Omega_{jlm}(\vec{\Omega}_i)$ – трехмерные шаровые спиноры.

Таблица 1

Радиальные моменты водородоподобных ионов трансурановых элементов в состоянии $1s_{1/2}$

Название элемента	Заряд ядра Z	$\langle r^{-2} \rangle$	$\langle r^{-1} \rangle$	$\langle r^1 \rangle$	$\langle r^2 \rangle$	$\langle r^3 \rangle$
U	92	2,522	0,906	1,849	4,795	16,009
Np	93	2,674	0,924	1,819	4,650	15,310
Pu	94	2,840	0,943	1,790	4,508	14,642
Am	95	3,021	0,962	1,761	4,371	14,003
Cm	96	3,219	0,982	1,733	4,238	13,393
Bk	97	3,437	1,002	1,704	4,109	12,809
Cf	98	3,677	1,023	1,677	3,984	12,25
Es	99	3,942	1,045	1,649	3,862	11,715
Fm	100	4,238	1,067	1,622	3,743	11,203
Mv	101	4,570	1,090	1,596	3,628	10,712

Магнитное квантовое число $m = \pm \frac{1}{2}$, фазовый множитель нижней компоненты равен $(-1)^{l-j+\frac{1}{2}} = (-1)^{\frac{-1+0+1}{2}} = 1$, индексы у спиноров соответствуют квантовым числам $\{j, l, j_z\}$. Верхний и нижний спиноры являются однородными полиномами одной и той же степени K .

Система уравнений для гелиеподобных ионов в состоянии 0^+ имеет вид [4]

$$\left(E\alpha + \sum_{i=1}^2 \frac{\alpha Z}{r_i} - \frac{\alpha}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Phi = -i \sum_{i=1}^2 \vec{\sigma}_i \vec{p}_i X; \quad (19)$$

$$\left((E+4)\alpha + \sum_{i=1}^2 \frac{\alpha Z}{r_i} - \frac{\alpha}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) X = -i \sum_{i=1}^2 \vec{\sigma}_i \vec{p}_i \Phi, \quad (20)$$

где ε – полная энергия системы в единицах mc^2 ; $E = \varepsilon - A < 0$ – энергия связи системы; единица длины равна классическому радиусу электрона $\frac{e^2}{mc^2} = 2,818 \cdot 10^{-13}$ см, $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,036}$ – постоянная тонкой структуры.

Умножая уравнения (19) и (20) на комплексно-сопряженную строку $(U^* \ W^*)$ и интегрируя по всем угловым переменным, для амплитуд разложения ВФ (16) по двухкомпонентным МУФ можно получить

$$M' - \frac{5}{2} \frac{1}{\rho} M - \frac{\alpha}{2} \left(E + 4 + \frac{5}{\rho} \left(Z - \frac{5}{16} \right) \right) N = 0; \quad (21)$$

$$N' + \frac{5}{2} \frac{1}{\rho} N + \frac{\alpha}{2} \left(E + \frac{5}{\rho} \left(Z - \frac{5}{16} \right) \right) M = 0. \quad (22)$$

В результате решения системы уравнений (21), (22), подробно представленного в [4], аналогично тому,

как приводится в [3] для водородоподобных ионов, для энергии связи гелиеподобных ионов тяжелых элементов получено

$$E = 2 \left(\sqrt{1 - \alpha^2 \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2} - 1 \right). \quad (23)$$

Расчетные значения энергии связи ряда гелиеподобных ионов трансурановых элементов в состоянии 0^+ , полученные согласно (23), приведены в табл. 2.

Амплитуды разложения верхней и нижней компоненты волновой функции основного ($n_r = 0$) состояния 0^+ гелиеподобного иона тяжелого элемента, являющиеся решением системы (21), (22), с учетом нормировки

$$\int_0^\infty (M^2(\rho) + N^2(\rho)) d\rho = 1 \quad (24)$$

имеют вид

$$M(\rho) = \frac{\sqrt{\lambda} \sqrt{E+4}}{2\sqrt{\Gamma(2\gamma-1)}} e^{-\frac{\lambda\rho}{2}} (\lambda\rho)^{\gamma-1}; \quad (25)$$

$$N(\rho) = \frac{-\sqrt{\lambda} \sqrt{-E}}{2\sqrt{\Gamma(2\gamma-1)}} e^{-\frac{\lambda\rho}{2}} (\lambda\rho)^{\gamma-1}, \quad (26)$$

где $\lambda = \sqrt{-E(E+4)}$.

Следует отметить, что приведенные амплитуды разложения пропорциональны с множителем $\sqrt{\frac{E+4}{-E}}$.

Момент порядка n гелиеподобных ионов в основном состоянии 0^+ вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} \langle r^n \rangle &= \langle r^n \rangle_1 + \langle r^n \rangle_2 = \int \frac{1}{\rho^5} MU \sum_{i=1}^2 r_i^n MU d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + \\ &+ \int \frac{1}{\rho^5} NW \sum_{i=1}^2 r_i^n NW d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \end{aligned} \quad (27)$$

Таблица 2

Энергия связи E , кэВ гелиеподобных ионов трансурановых элементов в состоянии 0^+

Название элемента	Заряд ядра Z	Квантовое число n_r		
		0	1	2
U	92	-262,23	-249,69	-134,42
Np	93	-269,01	-254,74	-137,43
Pu	94	-275,92	-259,84	-140,48
Am	95	-282,97	-264,99	-143,58
Cm	96	-290,17	-270,18	-146,71
Bk	97	-297,51	-275,44	-149,89
Cf	98	-305,01	-280,74	-153,11
Es	99	-312,67	-286,10	-156,37
Fm	100	-320,48	-291,52	-159,68
Mv	101	-328,47	-296,99	-163,03

Выполняя интегрирование по угловым переменным, для первого слагаемого момента n -го порядка можно получить

$$\langle r^n \rangle_1 = \frac{\Gamma(6)\Gamma(n+3)}{\Gamma(3)\Gamma(n+6)} \int_0^\infty M^2(\rho) \rho^n d\rho. \quad (28)$$

Аналогично (28) имеем

$$\langle r^n \rangle_2 = \frac{\Gamma(6)\Gamma(n+3)}{\Gamma(3)\Gamma(n+6)} \int_0^\infty N^2(\rho) \rho^n d\rho. \quad (29)$$

В результате получено следующее выражение для момента электронного радиуса гелиеподобных ионов:

$$\langle r^n \rangle = \frac{\Gamma(6)\Gamma(n+3)}{\Gamma(3)\Gamma(n+6)} \int_0^\infty (M^2(\rho) + N^2(\rho)) \rho^n d\rho. \quad (30)$$

С использованием амплитуд (25) и (26) из формулы (30) можно получить аналитическое выражение момента n -го порядка

$$\langle r^n \rangle = \frac{1}{\lambda^n} \frac{\Gamma(6)\Gamma(n+3)}{\Gamma(3)\Gamma(n+6)} \frac{\Gamma(2\gamma+n-1)}{\Gamma(2\gamma-1)}. \quad (31)$$

Очевидно, что при этом выражение (31) для момента $\langle r^n \rangle$ сохраняется.

Аналогично выражению (15) вычислены моменты $\langle r^n \rangle$ с использованием нормированной на единицу верхней компоненты (34) биспинорной волновой функции (16).

Моменты координаты электрона с нормировкой (32) равны

$$\begin{aligned} \langle r^n \rangle &= \frac{\Gamma(6)\Gamma(n+3)}{\Gamma(3)\Gamma(n+6)} \int_0^\infty \tilde{M}^2(\rho) \rho^n d\rho = \\ &= \frac{1}{\lambda^n} \frac{\Gamma(6)\Gamma(n+3)}{\Gamma(3)\Gamma(n+6)} \frac{\Gamma(2\gamma+n-1)}{\Gamma(2\gamma-1)}, \end{aligned} \quad (35)$$

и выражение (35) совпадает с (31), как и в случае водородоподобных ионов (см. выражения (15) и (11)).

Абсолютные значения моментов различных порядков для тяжелых элементов от урана до менделевия в состоянии 0^+ представлены в табл. 3.

Таблица 3

Радиальные моменты гелиеподобных ионов тяжелых элементов в состоянии 0^+

Название элемента	Заряд ядра Z	$\langle r^{-2} \rangle$	$\langle r^{-1} \rangle$	$\langle r^1 \rangle$	$\langle r^2 \rangle$	$\langle r^3 \rangle$
U	92	1,774	0,900	1,762	4,302	13,495
Np	93	1,852	0,918	1,731	4,156	12,283
Pu	94	1,934	0,937	1,700	4,014	12,200
Am	95	2,021	0,956	1,670	3,877	11,597
Cm	96	2,112	0,975	1,640	3,743	11,023
Bk	97	2,209	0,996	1,610	3,614	10,474
Cf	98	2,312	1,016	1,581	3,489	9,951
Es	99	2,422	1,038	1,552	3,367	9,452
Fm	100	2,538	1,060	1,523	3,248	8,974
Mv	101	2,662	1,083	1,494	3,133	8,518

С единичной нормировкой верхней компоненты $\tilde{M}(r)$ волновой функции

$$\int_0^\infty \tilde{M}^2(\rho) d\rho = 1 \quad (32)$$

нормировку (24) можно записать в виде

$$A^2 \int_0^\infty (\tilde{M}^2(\rho) + N^2(\rho)) d\rho = 1, \quad (33)$$

где $A = \sqrt{\frac{4-E}{4}}$;

$$\tilde{M}(\rho) = \frac{\sqrt{\lambda}}{\sqrt{\Gamma(2\gamma-1)}} e^{-\frac{\lambda\rho}{2}} (\lambda\rho)^{\gamma-1}. \quad (34)$$

Заключение

В работе проведено сравнение методов вычисления матричных элементов оператора радиальной координаты электрона в произвольной степени в представлении ФВ и при использовании решений уравнения Дирака для $1s$ -состояний водородо- и гелиеподобных ионов трансурановых элементов.

В результате прямых вычислений получено, что для $1s$ -состояний водородо- и гелиеподобных ионов в качестве оператора координаты в представлениях Дирака и ФВ можно использовать один и тот же оператор r^n .

Как известно, в общем случае эти операторы различны в двух представлениях. Если в представлении ФВ используется оператор r_{FW}^n , то в представлении

Дирака он будет иметь вид $r_D^n = U_{FW}^+ r_{FW}^n U_{FW}$, где U_{FW} – матрица преобразования, зависящая сложным образом от внешних полей. В свободном случае \vec{r}_D представляет собой оператор Ньютона–Вигнера [1].

Полученные аналитические и численные результаты для 1s-состояний водородо- и гелиеподобных ионов подтверждают выполнение условия редукции волновой функции при переходе к представлению ФВ и демонстрируют возможность расчета матричных элементов с использованием только одной (верхней или нижней) компоненты дираковской биспинорной волновой функции.

Список литературы

1. Foldy L. L., Wouthuysen S. A. // Phys. Rev. 1950. Vol. 78. P. 29.
2. Neznamov V. P., Silenko A. J. Foldy-Wouthuysen wave functions and conditions of transformation between Dirac and Foldy-Wouthuysen representations. ArXiv: 0906.2069v1 [math.-ph.].
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учебное пособие для вузов. В 10 т. Т. 4 / В. Б. Берестецкий, Е. М. Лившиц, Л. П. Питаевский. Квантовая электродинамика. 4-е изд., испр. М.: Физматлит, 2001.

4. Садовой А. А., Ульянов А. С. Новый метод расчета свойств гелиеподобных ионов трансурановых элементов // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теор. и прикл. физ. 2007. Вып. 2–3. С. 58–67.
5. Silenko A. J. // J. Math. Phys. 2003. Vol. 44. P. 2952.
6. Eriksen E. Phys. Rev. 1958. Vol. 111. P. 1011.
7. Незнамов В. П. // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теор. и прикл. физ. 1988. Вып. 2. С. 21.
8. Neznamov V. P. // Fiz. Elem. Chastits At. Yadra. 2006. Vol. 37. P. 152 [Phys. Part. Nucl. 2006. Vol. 37. P. 86].
9. E. de Vries, Jonker J. E. // Nucl. Phys. 1968. Vol. B6. P. 213.
10. Bagrov V. G., Gitman D. M. Exact Solutions of Relativistic Wave Equations, (Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1990).
11. Silenko A. J. // Pis'ma v EChAYa. 2008. Vol. 5. P. 842. [Phys. Part. Nucl. Lett. 2008. Vol. 5. P. 501].
12. Садовой А. А., Ульянов А. С. Электронная плотность высокоионизованных ионов трансурановых элементов // VI научно-техническая конференция «Молодежь в науке». 2007.
13. Садовой А. А. Методы многомерных угловых функций в теоретической и прикладной физике. Арзамас-16: ВНИИЭФ, 1994.

Статья поступила в редакцию 06.11.2009