

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
ИМ.Б.П.КОНСТАНТИНОВА
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА
"КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ"

На правах рукописи

Попов Роман Владимирович

**Спектры позитронов в низкоэнергетических
столкновениях тяжёлых ядер как инструмент
для наблюдения спонтанного распада вакуума в
сверхкритическом кулоновском поле**

Научная специальность 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Перевод с английского языка

Научный руководитель:
Шабает Владимир Моисеевич
д-р физ.-мат. наук, проф.

Санкт-Петербург
2024

Содержание

Введение	3
Глава 1. Сверхкритический резонанс. Краткое описание	14
Глава 2. Общий формализм	21
Глава 3. Траектории столкновений	28
Глава 4. Расчёты в монопольном приближении	32
4.1 Стационарное уравнение Дирака	32
4.2 Нестационарное уравнение Дирака	38
4.3 Результаты	40
4.3.1 Вероятности рождения пар	41
4.3.2 Энергетические спектры позитронов	44
Глава 5. Расчёты за рамками монопольного приближения	53
5.1 Стационарное уравнение Дирака	53
5.2 Нестационарное уравнение Дирака	58
5.2.1 Приближение, не учитывающее вращение межъядерной оси	59
5.2.2 Учет вращения межъядерной оси	62
5.3 Результаты	65
5.3.1 Энергии основного состояния и критические межъядерные расстояния	65
5.3.2 Вероятности рождения пар	69
5.3.3 Влияние вращения межъядерной оси на вероятности рождения пар	75
5.3.4 Энергетические спектры позитронов	76
Заключение	79
Список литературы	81

Введение

Настоящая диссертация посвящена явлению спонтанной перестройки квантово-электродинамического (КЭД) вакуумного состояния, также называемого спонтанным распадом вакуума, в сверхкритических кулоновских полях. Во время этой перестройки изначально нейтральное вакуумное состояние приобретает ненулевой заряд, и испускается один или два позитрона. Согласно квантовой электродинамике, этот эффект может возникать в столкновениях тяжелых ядер с суммарным зарядом $Z_t = Z_A + Z_B$, превышающим критические значения $Z_{cr} \approx 173$. Для этого ядра должны приблизиться друг к другу на расстояние меньше критического значения R_{cr} , зависящего от Z_A и Z_B . Экспериментальное наблюдение распада вакуума в таких столкновениях сильно осложняется преобладающим динамическим (индуцированным) рождением пар, вызванным зависимостью двухцентрового потенциала ядер от времени. Целью данной работы является поиск экспериментального сценария, который позволил бы наблюдать признаки перехода к сверхкритическому режиму и спонтанного распада вакуума. С этой целью мы разработали эффективную численную методику для расчета вероятностей рождения электрон-позитронных пар и энергетических спектров позитронов, испускаемых в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер. Используя эту методику, мы исследовали столкновения тяжелых ядер в широком диапазоне параметров столкновений. Расчеты проводились как в рамках монопольного приближения, где учитывается только сферически симметричная часть двухцентрового потенциала ядер, так и за его пределами. Результаты расчетов показывают качественные изменения как вероятностей рождения позитронов, так и позитронных спектров, когда параметры столкновения достаточно глубоко погружаются в сверхкритическую область.

Актуальность темы

Спонтанный распад вакуума в сверхкритических кулоновских полях представляет собой фундаментальное непертурбативное квантово электродинамическое явление, которое, согласно теории, должно происходить в сильных электромагнитных полях. Предположение о его существовании было высказано более 50 лет назад, в 1969 году. С тех пор оно интенсивно изучалось как теоретически, так и экспериментально. Но все попытки наблюдать какие-либо проявления это-

го явления не увенчались успехом. В результате, спустя более чем 20 лет был сделан вывод, что наблюдение спонтанного рождения пар возможно только в том случае, если при столкновении ядра будут слипаться друг с другом на некоторое время под действием ядерных сил. Не так давно интерес к этому процессу вновь возрос в связи со строительством нескольких новых экспериментальных комплексов, таких как GSI/FAIR в Германии, HIAF в Китае и NICA в России. Применительно к наблюдению спонтанного рождения пар основные улучшения новых комплексов по сравнению с используемыми ранее, заключаются в двух аспектах. Во-первых, это возможность работы с ионами в значительно более высоких зарядовых состояниях и, вероятно, даже с голыми ядрами. Во-вторых, они могут сделать доступными эксперименты со скрещенными пучками вместо столкновений с неподвижной мишенью, которые использовались ранее. Оба эти фактора приводят к уменьшению заселенности квазимолекулярного $1s\sigma$ состояния. Это играет важную роль для наблюдения спонтанного распада вакуума, поскольку он может произойти только тогда, когда $1s\sigma$ состояние имеет вакансию до того, как погрузится в нижний континуум. Чем меньше заселённость этого уровня, тем больше вклад спонтанного механизма в рождение пар.

Степень разработанности темы исследования

Квантовая электродинамика в присутствии сверхсильных электромагнитных полей предсказывает ряд нелинейных и непертурбативных эффектов, таких как рассеяние света на свете, вакуумное двулучепреломление и рождение электрон-позитронных пар (см., например, обзоры [1–4]). Экспериментальное наблюдение этих эффектов осложняется чрезвычайно высокими требованиями к напряженности поля, необходимой для их проявления. Один из способов достижения таких полей основан на постоянно развивающихся лазерных технологиях. Хотя лазерное оборудование в ближайшем будущем может удовлетворить требованиям для проявления некоторых эффектов, вакуумное рождение пар все еще далеко от возможности экспериментального исследования. Альтернативный подход предполагает использование тяжелых ядер в качестве источника сильного электрического поля.

В пионерской работе [5] было показано, что уровень $1s$ водородоподобного иона с протяжённым ядром непрерывно идёт вниз с увеличением заряда ядра, пока при определенном значении Z_{cr} не достигнет границы отрицательно-

энергетического континуума. В связи с этим возник вопрос о том, что происходит со связанным состоянием, когда оно присоединяется к позитронному континууму. В работах советских и немецких физиков [6, 7] было высказано предположение, что погружение изначально незанятого связанного состояния в отрицательно-энергетический континуум может привести к самопроизвольной перестройке КЭД вакуума, сопровождаемой рождением электрон-позитронных пар (подробнее см., например, работы [8–21]). Такая перестройка вакуумного состояния происходит каждый раз, когда новое незанятое связанное состояние погружается в отрицательно-энергетический континуум. Новое вакуумное состояние приобретает заряд Ne , где N — количество погруженных связанных состояний, а e — заряд электрона.

Самым тяжелым элементом, синтезированным на сегодняшний день, является оганессон, который имеет заряд ядра $Z = 118$. Это значительно ниже минимально необходимого критического ядерного заряда Z_{cr} , который, по оценкам, приблизительно равен 173. Тем не менее, реалистичный сценарий наблюдения этого процесса может быть реализован в низкоэнергетических столкновениях двух тяжелых ядер с суммарным зарядом, превышающим критическое значение $Z_A + Z_B > Z_{cr}$ [6]. Когда во время таких столкновений ядра подходят достаточно близко друг к другу, состояние $1s\sigma$ квазимолекулы, временно образованное ими, погружается в отрицательно-энергетический континуум в виде резонанса. В результате, если состояние $1s\sigma$ было незанятым, дополнительные две дырки (из-за спинового вырождения) приносятся в нижний континуум. Изначально локализованные вблизи ядер, эти дырки могут уйти на бесконечность в виде свободных позитронов, и первоначально нейтральный вакуум приобретет заряд $2e$. Этот процесс известен как спонтанный распад нейтрального КЭД вакуума.

Спонтанный распад вакуума в столкновениях тяжелых ионов был предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований (см., например, обзоры [22–27] и ссылки в них). Первые теоретические расчеты рождения пар в сверхкритических столкновениях были выполнены в квазистатистическом приближении, согласно которому вероятность рождения пар пропорциональна интегралу по времени от ширины резонанса $\Gamma(R)$, взятому вдоль ядерной траектории $R(t)$ [28–30]. В рамках этого приближения были получены общая вероятность спонтанного рождения пар, связанная с распадом резонанса,

энергетические спектры испускаемых позитронов, а также их угловое распределение. В работе [30] также рассматривалась поправка на неадиабатичность процесса туннелирования. Однако квазистатический подход не учитывает динамическое рождение пар, вызванное зависящим от времени потенциалом движущихся ядер. Оказывается, что сверхкритический резонанс имеет довольно большое время жизни по сравнению с продолжительностью сверхкритического режима τ_{cr} . Например, в столкновениях ядер урана при энергиях, близких к кулоновскому барьеру (когда ядра соприкасаются друг с другом), время жизни резонанса примерно на два порядка больше, чем τ_{cr} . Это приводит к тому, что вероятность спонтанного рождения пар оказывается довольно малой. Более того, дополнительная ширина $\Gamma_{\text{dyn}} \sim \hbar/\tau_{\text{cr}}$, обусловленная принципом неопределенности, предотвращает появление узких резонансных структур в энергетическом распределении испускаемых позитронов, предсказываемых в квазистатическом приближении. Таким образом, чтобы проверить возможность наблюдения сигнала от распада вакуума, необходимо учитывать динамическое рождение пар.

Франкфуртская группа исследовала как спонтанный, так и динамический механизмы рождения пар. Первые попытки учесть динамическое рождение пар были основаны на временной теории возмущений [31, 32]. Позже была реализована непertурбативная процедура для решения нестационарного уравнения Дирака. В ней использовался метод связанных каналов в базисе адиабатических квазимолекулярных волновых функций, рассчитанных в монопольном приближении. Непertурбативные расчеты показали важность многоступенчатых процессов для различных аспектов ион-атомных столкновений, таких как рождение пар, возбуждение электронов и образование вакансий на $1s\sigma$ уровне, которые играют решающую роль в механизме спонтанного рождения пар (см., например, [33–36]). На основе полученных результатов в конечном итоге был сделан вывод, что экспериментальное наблюдение спонтанного распада вакуума возможно только в том случае, если сталкивающиеся ядра будут слипаться друг с другом на некоторое время за счет ядерных сил [26, 27]. Однако, поскольку на сегодняшний день не было зарегистрировано никаких свидетельств такого слипания для интересующих нас ядер, этот сценарий также не кажется многообещающим.

В свете строительства новых экспериментальных установок в Германии

(GSI/FAIR) [37, 38], Китае (HIAF) [39] и России (NICA) [40] интерес к этой проблеме возобновился. Новые исследования касались как статических, так и динамических аспектов спонтанного рождения позитронов. Свойства сверхкритического резонанса были рассмотрены для сферически симметричных [41–44] и двухцентровых [45–47] потенциалов. В серии работ (см., например, [48–50] и ссылки в них) было рассмотрено поведение энергии поляризации вакуума для сверхкритических кулоновских полей. Динамическое рассмотрение рождения пар в столкновениях тяжелых ядер было проведено в рамках монопольного приближения [51–53] и за его пределами [54–56]. Первые непертурбативные расчеты угловых спектров позитронов можно найти в работе [57]. Релятивистский квазиклассический подход к проблеме нестабильности вакуума подробно рассмотрен в работе [58].

Недавно был предложен новый способ, позволяющий увидеть признаки, указывающие на переход к сверхкритическому режиму, в котором становится возможным спонтанное рождение электрон-позитронных пар [59, 60]. В этом методе предлагается рассматривать столкновения по траекториям, соответствующим разным энергиям, но имеющим одинаковое расстояние наибольшего сближения, R_{\min} . В качестве параметров, определяющих конкретную траекторию, удобно использовать R_{\min} и отношение $\eta = E/E_0 \in [1, \infty)$ энергии столкновения E к энергии E_0 лобового столкновения с тем же R_{\min} . Идея, лежащая в основе этого, заключается в противоположной зависимости динамического и спонтанного вкладов в вероятность рождения пар от скорости ядер, характеризуемой здесь параметром η . Действительно, вклад спонтанного механизма определяется продолжительностью сверхкритического режима $\tau_{\text{ср}}$. Это время монотонно уменьшается с увеличением энергии столкновения, т.е. η , а вслед за ним уменьшается и вклад спонтанного механизма. Напротив, динамическое рождение пар должно увеличиваться с ростом η . Следовательно, повышение вероятности рождения пар при $\eta \rightarrow 1$ можно объяснить переходом в сверхкритический режим и активацией спонтанного механизма. Более подробную информацию можно найти в работе [60].

Используя вышеупомянутый подход, мы провели детальное исследование зависимости вероятности образования пар и энергетических спектров позитронов от параметра η (см. работу [60]). Расчеты проводились в рамках монопольного приближения, в котором учитывается только сферически симметричная

часть двухцентрового потенциала ядер. Свидетельства перехода к сверхкритическому режиму были обнаружены как в вероятностях рождения пар, так и в позитронных спектрах. Эти результаты были позже независимо подтверждены в работе [61]. Как было количественно продемонстрировано в работах [54–56], монопольное приближение достаточно хорошо подходит для описания процесса рождения пар. Тем не менее, важно изучить, как учет полного двухцентрового потенциала повлияет на признаки перехода к сверхкритическому режиму, упомянутые выше. Кроме того, расчеты, выходящие за рамки монопольных приближений, необходимы для получения доступа к другим важным аспектам столкновений ядер, например, к угловым распределениям позитронов. Поэтому в работе [62] мы расширили нашу численную технику за пределы монопольного приближения и выполнили расчеты вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов с учетом членов более высокого порядка в разложении потенциала ядер по сферическим гармоникам. Результаты этих расчётов показали, что все признаки перехода к сверхкритическому режиму сохраняются, а некоторые из них даже усиливаются. Расчеты производились во вращающейся системе отсчёта с осью z , направленной вдоль межъядерной оси, и началом координат, расположенным в центре масс. При этом вращательный член, который появляется в нестационарном уравнении Дирака из-за перехода в такую неинерциальную систему отсчёта (см., например, работы [63, 64]), а также магнитное поле движущихся ядер в этой работе не учитывались. Как утверждается в работах [33, 65–67], влияние этих эффектов на полную вероятность и энергетические спектры позитронов должно быть сравнительно небольшим. Чтобы количественно оценить роль вращательного члена в рождении пар, мы разработали два метода его включения в наш код. Используя эти методы, мы количественно показали, что эффектами вращения можно с уверенностью пренебречь при рассмотрении вероятности рождения пар в низкоэнергетических столкновениях с малыми прицельными параметрами. В настоящее время проводится исследование их влияния на энергетические и угловые распределения позитронов.

Цель работы

Основной целью настоящего исследования является поиск экспериментального сценария, который позволил бы наблюдать признаки перехода в сверх-

критический режим в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер. Для этого требуется разработка эффективной численной техники, позволяющей непertурбативно исследовать процесс рождения электрон-позитронных пар, происходящий в таких столкновениях. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Вывести необходимые расчетные выражения.
2. Разработать программу для численного непertурбативного решения нестационарного уравнения Дирака в монополюльном приближении и протестировать ее путем сравнения с имеющимися данными.
3. Провести обширные расчеты вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов для широкого диапазона параметров столкновений, т.е. зарядов ядер, энергий столкновений и прицельных параметров.
4. Проанализировать полученные данные с целью выявления признаков перехода к сверхкритическому режиму.
5. Расширить программу за рамки монополюльного приближения.
6. Исследовать влияние старших членов мультиполюльного разложения зависящего от времени потенциала ядер на результаты, полученные ранее в монополюльном приближении

Научная новизна

Основные результаты этого исследования, касающиеся качественных изменений как вероятностей рождения пар, так и энергетических спектров позитронов при переходе к сверхкритическому режиму в столкновениях тяжелых ядер, ранее не демонстрировались и, следовательно, являются новыми. Разработанная техника непertурбативных численных расчетов вероятностей и спектров, выходящая за рамки монополюльного приближения и позволившая нам выявить эти изменения, также является новой. Это подтверждается фактом публикации наших результатов в авторитетных научных журналах и их презентацией на национальных и международных конференциях.

Теоретическая и практическая значимость

Обнаруженные качественные изменения в поведении вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов представляют собой впервые обнаруженные признаки сверхкритического перехода, происходящего в столкновениях тяжелых ядер. Они не требуют кратковременного образования связанного ядерного соединения, также называемого ядерным слипанием, как считалось ранее. Эти признаки сверхкритического перехода могут быть экспериментально обнаружены в измерениях выхода позитронов, чувствительных к прицельным параметрам.

Методология и методы исследования

Метод расчета, численно реализованный в настоящем исследовании, основан на формализме квантовой электродинамики в картине Фарри. В рамках этого формализма интересующие нас физические величины выражаются через амплитуды одноэлектронных переходов. Одноэлектронные волновые функции находятся путем численного решения нестационарного уравнения Дирака в конечном одноцентровом стационарном базисном наборе. Радиальная часть базисных функций описывается B-сплайнами, для угловой части используются сферические спиноры.

Апробация работы

Результаты и положения работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

- 18th Topical Workshop of the Stored Particles Atomic Physics Research Collaboration (SPARC 2021), 6–9 сентября 2021.
- 56-я зимняя школа, проводимая Петербургским институтом ядерной физики им. Б. П. Константинова НИЦ "Курчатовский Институт 17–22 марта 2024.

По теме диссертации опубликовано 3 статьи в журналах, рекомендованных ВАК РФ и входящих в базы данных РИНЦ, Web of Science и Scopus:

- R. V. Popov, A. I. Bondarev, Y. S. Kozhedub, I. A. Maltsev, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, X. Ma, G. Plunien, and T. Stöhlker, *One-center calculations of*

the electron-positron pair creation in low-energy collisions of heavy bare nuclei, Eur. Phys. J. D **72**, 115 (2018).

- 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. Stöhlker, D. A. Tumakov, and V. A. Zaytsev, *How to access QED at a supercritical Coulomb field*, Phys. Rev. D **102**, 076005 (2020).
- R. V. Popov, V. M. Shabaev, I. A. Maltsev, D. A. Telnov, N. K. Dulaev, and D. A. Tumakov, *Spontaneous vacuum decay in low-energy collisions of heavy nuclei beyond the monopole approximation*, Phys. Rev. D **107**, 116014 (2023).

Личный вклад автора

Все основные результаты получены соискателем либо лично, либо при его непосредственном участии в неразделимом соавторстве.

Структура и объём работы

Диссертация состоит из Введения, пяти Глав, Заключение и Списка литературы. Работа включает 88 страниц, 25 рисунков и 4 таблицы. Список литературы состоит из 82 наименований.

- Во **Введении** мы описываем актуальность темы, ее разработанность, цели и основные задачи данного исследования, его новизну, значимость и применяемые методы. После этого формулируются основные положения, выносимые на защиту, и обсуждается апробация результатов.
- **Глава 1** содержит краткое описание сверхкритического резонанса и процесса спонтанного распада вакуума.
- В **Главе 2** кратко изложен формализм квантовой электродинамики с нестабильным вакуумом в картине Фарри, и показаны основные этапы вывода формул, лежащих в основе методики расчета.
- В **Главе 3** мы подробнее рассматриваем набор траекторий столкновений, используемых для наблюдения перехода к сверхкритическому режиму.
- **Глава 4** посвящена описанию ключевых моментов техники численного расчёта и обсуждению результатов, полученных в монопольном приближении.

- В **Главе 5** численный алгоритм расширяется за рамки монопольного приближения и исследуется влияние старших членов мультипольного разложения двухцентрового потенциала ядер.
- В **Заключении** мы резюмируем основные результаты, полученные в рамках данного исследования.

Основные научные результаты

1. Разработана программа для одноцентровых непertурбативных расчетов вероятностей рождения электрон-позитронных пар в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер за рамками монопольного приближения. Проведены расчёты вероятностей рождения электрон-позитронных пар в лобовых столкновениях ядер урана, см. работу [56] (личный вклад составляет 80%).
2. В монопольном приближении проведено исследование вероятности рождения пар и энергетических спектров позитронов для широкого диапазона зарядов ядер, энергий столкновений и прицельных параметров, включающего как докритические, так и сверхкритические значения. В энергетических спектрах позитронов обнаружены качественные изменения при переходе к сверхкритическому режиму в столкновениях тяжелых ядер с фиксированным расстоянием наибольшего сближения, см. работу [60] (личный вклад составляет 75%).
3. Проведено исследование поведения вероятности рождения электрон-позитронных пар и энергетических спектров позитронов при переходе к сверхкритическому режиму в столкновениях тяжёлых ядер за рамками монопольного приближения. Показано, что учет старших членов мультипольного разложения двухцентрового потенциала ядер сохраняет все признаки перехода к сверхкритическому режиму, обнаруженные в монопольном приближении, см. работу [62] (личный вклад составляет 90%).

Положения, выносимые на защиту

1. Разработан метод непertурбативных расчетов вероятностей рождения электрон-позитронных пар и энергетических спектров позитронов в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер за рамками монополярного приближения.
2. Исследовано поведение вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов при переходе к сверхкритическому режиму для широкого диапазона зарядов ядер, энергий столкновений и прицельных параметров.
3. Обнаружены качественные изменения в позитронных спектрах при переходе к сверхкритическому режиму для столкновений тяжелых ядер с фиксированным расстоянием наибольшего сближения.
4. Показано, что учет старших членов в мультиполярном разложении двухцентрового потенциала ядер сохраняет все признаки перехода к сверхкритическому режиму, обнаруженные в монополярном приближении.

Глава 1. Сверхкритический резонанс. Краткое описание

В этой главе мы немного подробнее остановимся на природе сверхкритического резонанса и его связи с распадом вакуума в КЭД. Мы начнем с рассмотрения поведения энергий связанных состояний водородоподобных ионов с ростом заряда ядра за предел для точечного заряда $Z = 137$. Энергия связанного состояния в случае одноэлектронного иона с точечным ядром может быть найдена аналитически с помощью хорошо известной формулы тонкой структуры Зоммерфельда

$$\varepsilon_{n\kappa} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha Z}{n - |\kappa| + \sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}} \right)^2}}. \quad (1.1)$$

Здесь n — главное квантовое число, $\kappa = (-1)^{j+l+\frac{1}{2}}(j + \frac{1}{2})$ — релятивистское угловое квантовое число, $\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры, m — масса электрона, а c — скорость света. Легко видеть, что формула (1.1) справедлива только тогда, когда квадратный корень $\sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}$ является вещественным, т.е. для $Z \leq |\kappa|/\alpha$. Состояние с наименьшей энергией $1s$ имеет $\kappa = -1$. Следовательно, можно использовать (1.1) только для $Z \leq 137$. Для $Z > 137$ стандартная процедура построения релятивистского самосопряженного оператора Гамильтона с чистым кулоновским потенциалом становится неприменимой, и приходится обращаться к специальным методам для преодоления этой проблемы (см., например, работы [68–70]). Этой проблемы можно избежать, используя более реалистичную модель распределения ядерного заряда, например, равномерно заряженную сферу, шар или модель Ферми. В своей пионерской работе [5] Померанчук и Смородинский исследовали зависимость энергий связанных состояний одноэлектронных ионов от заряда ядра, используя для описания распределения ядерного заряда модель равномерно заряженной сферы. Они выяснили, что энергия $1s$ состояния непрерывно уменьшается с увеличением Z , становится отрицательной и при некотором критическом значении $Z_{\text{кр}}$ достигает границы нижнего континуума. Хотя значение $Z_{\text{кр}}$ оказалось завышенным, эта работа поставила вопрос о том, что происходит, когда связанный энергетиче-

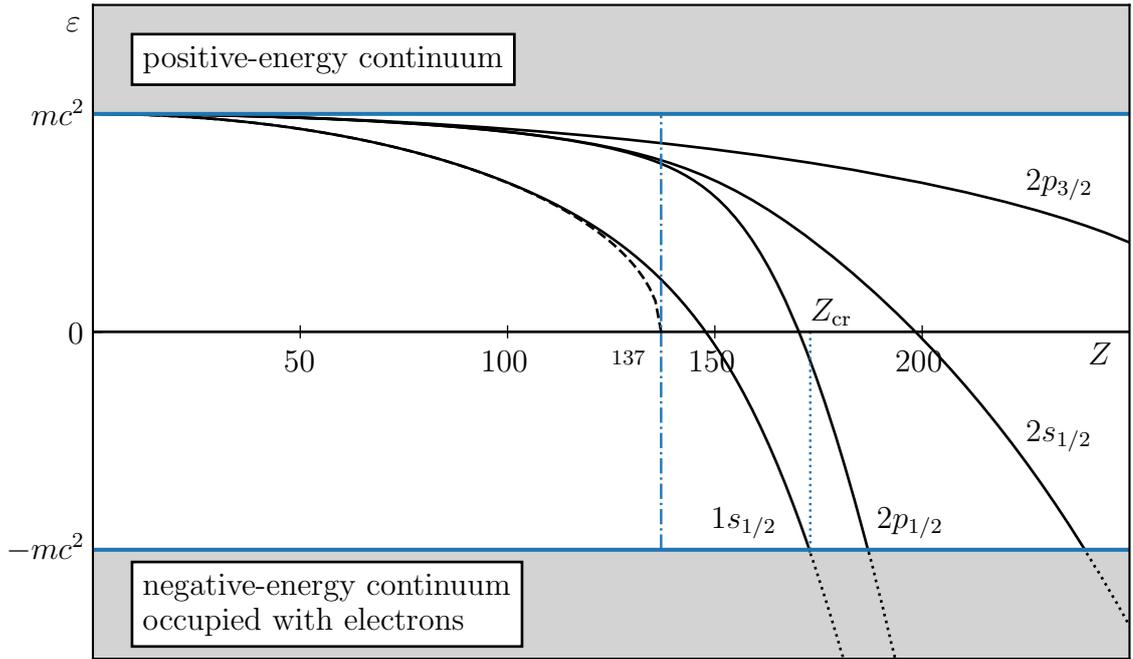


Рис. 1: Зависимость энергии низших связанных состояний водородоподобных ионов от заряда ядра Z .

ческий уровень опускается в нижний континуум при увеличении заряда ядра выше критического значения. Зависимость энергий нескольких низших связанных состояний от Z , полученная в наших расчетах с использованием ядерной модели равномерно заряженного шара, проиллюстрирована на Рис. 1. Для сравнения мы также нанесли пунктирную линию, соответствующую уровню $1s$ водородоподобных ионов с точечным ядром.

Несмотря на то, что атомов с зарядами ядер, близкими к Z_{cr} , не существует, поставленный выше вопрос сохраняет свою значимость. Это связано с тем, что сценарий перехода связанного состояния в отрицательно-энергетический континуум может быть экспериментально реализован в низкоэнергетических столкновениях двух тяжелых ионов. Для этого необходимо чтобы суммарный заряд $Z_A + Z_B$ превышал критическое значение Z_{cr} . В этом случае вместо атомных мы имеем дело с квазимолекулярными энергетическими уровнями, которые временно образуются при относительно медленном сближении ионов друг с другом. Поведение энергий некоторых низших квазимолекулярных уровней во время столкновения показано на Рис. 2. Из рисунка видно, что на короткий промежуток времени, обозначаемый как τ_{cr} , когда межъядерное расстояние $R(t)$ становится меньше определенного значения, состояние $1s\sigma$ перестает существовать, погружаясь в отрицательно-энергетический континуум. Межъ-

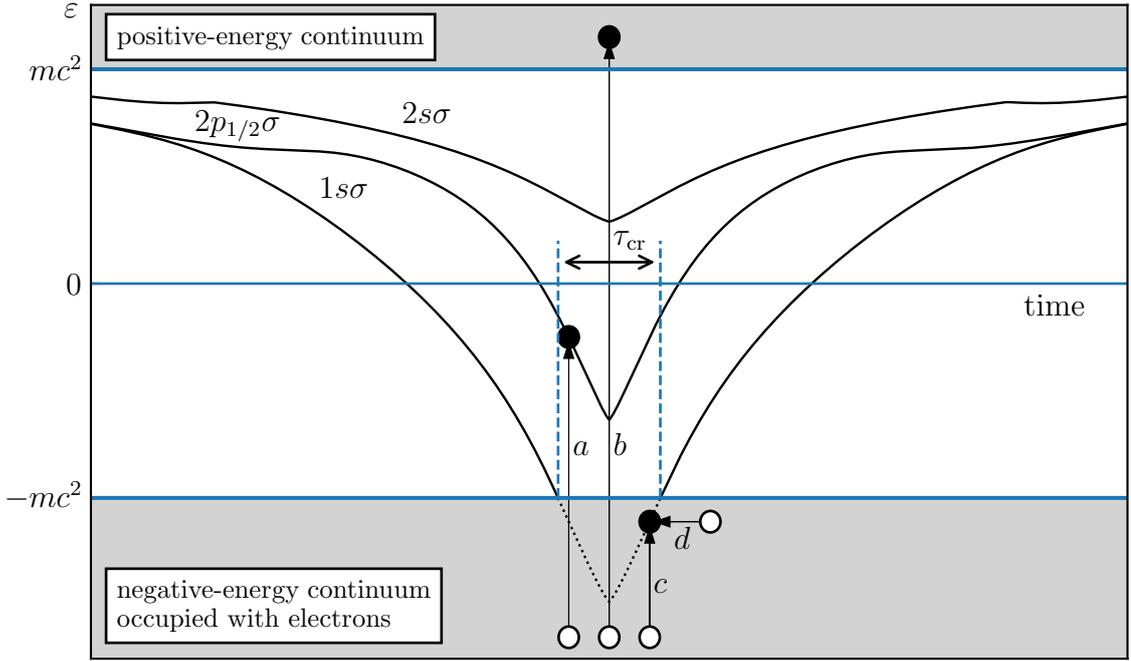


Рис. 2: Низшие энергетические уровни квазимолекулы U_2^{183+} , образующейся в низкоэнергетических столкновениях, как функция времени.

ядерное расстояние R_{cr} при котором это происходит, называется критическим. В течение этого времени соответствующий связанный энергетический уровень превращается в резонанс. Для наглядности на Рис. 2 использован нелинейный масштаб по времени, реальная продолжительность τ_{cr} существенно меньше. Возникновение резонанса связано с появлением барьера в эффективном потенциале электрона для ионов с $Z > Z_{cr}$ и $\varepsilon \lesssim -mc^2$ (см., например, работы [12, 43]). Как известно, в уравнении Дирака для сферически симметричного потенциала разделяются переменные. Стационарное уравнение Дирака в этом случае имеет вид

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m + V(r)) \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

где $\boldsymbol{\alpha}$, β — матрицы Дирака. Здесь и ниже мы используем релятивистские единицы ($\hbar = c = 1$), но в отдельных местах для наглядности оставляем скорость света c в явном виде. Решение уравнения (1.2) можно представить в виде биспинора

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \boldsymbol{\Omega}_{\kappa\mu}(\mathbf{n}) \\ iF(r) \boldsymbol{\Omega}_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}) \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

где $\Omega_{\kappa\mu}(\mathbf{n})$ — сферический спинор [71]. Подставив волновую функцию такого виде в уравнение (1.2), приходим к системе двух дифференциальных уравнений первого порядка на радиальные компоненты [72]:

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right)G - (m + \varepsilon - V)F = 0, \quad (1.4)$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r}\right)F - (m - \varepsilon + V)G = 0. \quad (1.5)$$

Используя первое уравнение, можно выразить малую компоненту волновой функции, F , через большую, G . Подставив ее затем во второе уравнение, получаем эквивалентное дифференциальное уравнение второго порядка:

$$G'' + \frac{V'}{m + \varepsilon - V} \left(G' + \frac{\kappa}{r}G\right) + \left[(\varepsilon - V)^2 - m^2 - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^2}\right]G = 0. \quad (1.6)$$

Используя подстановку $G = \chi\sqrt{m + \varepsilon - V}$, уравнение (1.6) можно записать в виде

$$\chi'' + k^2\chi = 0, \quad (1.7)$$

где $k^2 = 2(E - U_{\text{eff}})$, $E = \frac{1}{2}(\varepsilon^2 - m^2)$, и U_{eff} — эффективный потенциал, зависящий от ε . В частном случае чистого кулоновского потенциала $V = -\alpha Z/r$, $\kappa = -1$ и $\varepsilon = -m$ потенциал U_{eff} приобретает форму

$$U_{\text{eff}} = \frac{m\alpha Z}{r} - \frac{4(\alpha Z)^2 - 3}{8r^2}. \quad (1.8)$$

Как видно из Рис. 3, эффективный потенциал имеет широкий барьер.

Для того чтобы понять, что происходит с кулоновской системой, когда ее связанное состояние погружается в отрицательно-энергетический континуум, нам нужно вспомнить определение релятивистского оператора тока. Мы используем следующее определение:

$$\hat{j}^\mu(x) = \frac{e}{2} \left[\hat{\psi}(x), \gamma^\mu \hat{\psi}(x) \right], \quad (1.9)$$

где e — заряд электрона, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ обозначает коммутатор операторов \hat{A} и \hat{B} , γ^μ — 4-вектор матриц Дирака, $\hat{\psi}$ — оператор электрон-позитронного

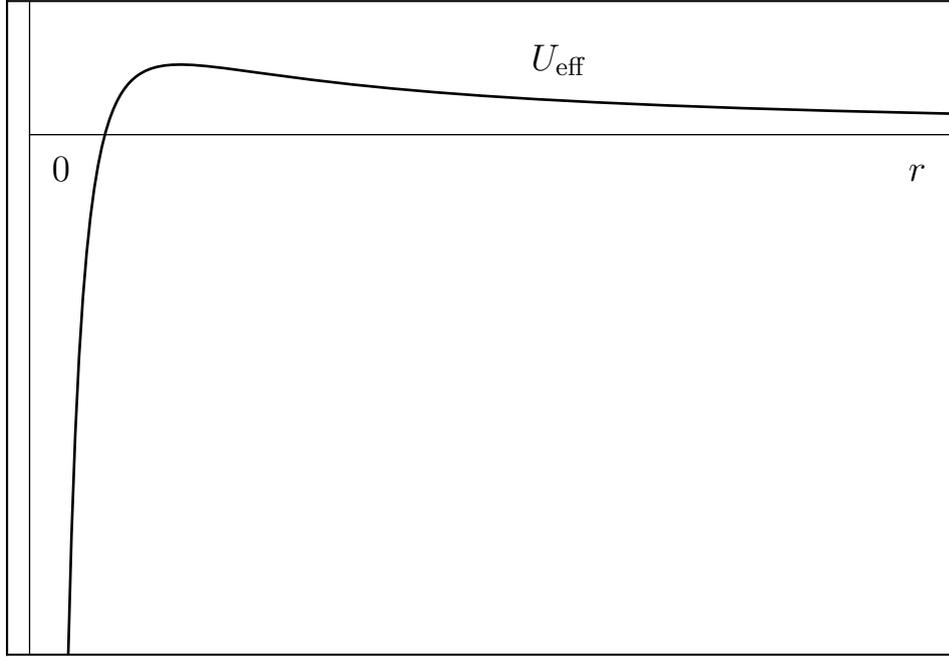


Рис. 3: Эффективный потенциал электрона с $\kappa = -1$ и $\varepsilon = -mc^2$.

поля, а $\hat{\psi} = \hat{\psi}^\dagger \gamma^0$. В частности, нас интересует нулевая составляющая вектора тока, которая представляет собой оператор плотности заряда

$$\hat{\rho}(x) = \frac{e}{2} \left[\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}(x) \right]. \quad (1.10)$$

Среднее значение $\hat{\rho}$, рассчитанное для вакуумного состояния, дает хорошо известную зарядовую плотность поляризации вакуума

$$\rho_{\text{vac}}(x) = \langle 0 | \hat{\rho}(x) | 0 \rangle = \frac{e}{2} \left[\sum_{\varepsilon_n \leq -mc^2} |\psi_n(x)|^2 - \sum_{\varepsilon_n > -mc^2} |\psi_n(x)|^2 \right]. \quad (1.11)$$

Предположим, что два ядра имеют суммарный заряд $Z_A + Z_B > Z_{\text{cr}}$. В докритическом случае, т.е. когда $R > R_{\text{cr}}$, общий заряд системы, вычисленный как интеграл по всему пространству от $\rho_{\text{vac}}(x)$, равен нулю:

$$Q_{\text{vac}} = \int d\mathbf{x} \rho_{\text{vac}}(x) = 0. \quad (1.12)$$

Таким образом, вакуум считается электрически нейтральным. Теперь давайте посмотрим, что происходит на границе сверхкритичности. Для этого удобно выделить вклад низшего связанного состояния в общую плотность заряда. Для

$R = R_{\text{cr}} + \delta R$, где δR бесконечно мало, мы имеем

$$\rho_{\text{vac}}(x) = \frac{e}{2} \left[\sum_{\varepsilon_n \leq -mc^2} |\psi_n(x)|^2 - 2|\psi_{1s\sigma}(x)|^2 - \sum_{\varepsilon_n > -mc^2; \varepsilon_n \neq \varepsilon_{1s\sigma}} |\psi_n(x)|^2 \right]. \quad (1.13)$$

Коэффициент два перед вкладом $1s\sigma$ состояния обусловлен двумя возможными проекциями полного углового момента на межъядерную ось. Поскольку плотность $\rho(x)$ непрерывно зависит от R , когда R медленно уменьшается до значения $R = R_{\text{cr}} - \delta R$, ρ_{vac} приблизительно останется неизменной

$$\rho'_{\text{vac}}(x) \approx \frac{e}{2} \left[\sum_{\varepsilon_n \leq -mc^2} |\psi_n(x)|^2 - 2|\psi_{1s\sigma}(x)|^2 - \sum_{\varepsilon_n > -mc^2; \varepsilon_n \neq \varepsilon_{1s\sigma}} |\psi_n(x)|^2 \right]. \quad (1.14)$$

Это плотность заряда докритического вакуумного состояния в сверхкритическом потенциале. Сверхкритическое вакуумное состояние определяется обычным образом как состояние, в котором все энергетические уровни с энергиями $\varepsilon_n \leq -mc^2$ заняты электронами, а уровни с $\varepsilon_n > -mc^2$ пусты. Единственное отличие от докритического случая заключается в отсутствии состояния $1s\sigma$ в энергетическом спектре. Но вклад этого состояния в плотность заряда не исчезает. Когда состояние $1s\sigma$ присоединяется к отрицательно-энергетическому континууму, волновые функции континуума искажаются таким образом, что плотность заряда, связанная с состоянием $1s\sigma$, распределяется по ним резонансным образом. Сверхкритический вакуум может быть получен из докритического состояния с занятой $1s\sigma$ оболочкой путем адиабатически медленного уменьшения межъядерного расстояния R сверх критического значения. Из-за непрерывности ρ относительно R можно приблизительно выразить плотность заряда сверхкритического вакуумного состояния $\rho_{\text{vac}}^{\text{cr}}(x)$ как

$$\rho_{\text{vac}}^{\text{cr}}(x) \approx \frac{e}{2} \left[\sum_{\varepsilon_n \leq -mc^2} |\psi_n(x)|^2 + 2|\psi_{1s\sigma}(x)|^2 - \sum_{\varepsilon_n > -mc^2; \varepsilon_n \neq \varepsilon_{1s\sigma}} |\psi_n(x)|^2 \right]. \quad (1.15)$$

Сравнивая уравнения (1.14) и (1.15), легко заметить, что $\rho_{\text{vac}}^{\text{cr}}(x)$ отличается от $\rho'_{\text{vac}}(x)$ на плотность погружающейся $1s\sigma$ оболочки $2|\psi_{1s\sigma}(x)|^2$. Хотя приближенное выражение (1.14) для плотности заряда в сверхкритическом режиме справедливо только для $R(t) \approx R_{\text{cr}}$, качественная картина остается неизменной

до тех пор, пока следующее связанное состояние не присоединится к нижнему континууму. Таким образом, для $R(t) \leq R_{cr}$ мы имеем систему в состоянии с двумя вакансиями, распределенными по нижнему континууму. Изначально эти вакансии локализованы вблизи ядер. Но в течение определенного периода времени они могут преодолеть потенциальный барьер, подобный тому, что изображен на Рис. 3, и уйти на бесконечность в виде позитронов. Этот процесс называется спонтанным рождением электрон-позитронных пар.

Однако в действительности ядерные столкновения не являются адиабатически медленными, а происходят с конечными скоростями. В этом случае существует дополнительный механизм образования пар, называемый динамическим или индуцированным. Из-за зависимости суммарного потенциала ядер от времени электроны из отрицательно-энергетического континуума могут возбуждаться в связанные состояния или положительно-энергетический континуум. Энергия, необходимая для этого перехода, берется из кинетической энергии ядер. На Рис. 2 изображены все возможные способы образования электрон-позитронной пары во время столкновения. Каналы a , b и c соответствуют динамическому механизму. Оставшийся канал d демонстрирует спонтанный механизм. Из рисунка видно, что в отличие от спонтанного рождения пар, которое может происходить только в короткий промежуток времени τ_{cr} , динамический механизм активен в течение всего столкновения.

Глава 2. Общий формализм

Для непертурбативного описания процесса рождения пар мы используем формализм квантовой электродинамики в присутствии сильного внешнего поля [23, 73]. В нашем случае это поле создаётся двумя сталкивающимися тяжёлыми ядрами, которые рассматриваются как классические частицы конечного размера, движущиеся по гиперболическим резерфордским траекториям. В рамках нулевого порядка теории возмущений относительно взаимодействия с квантованным электромагнитным полем плотность лагранжиана задается как

$$\mathcal{L} = \hat{\psi} \left(i\partial_\mu - e\mathcal{A}_\mu^{\text{ext}} \right) \gamma^\mu \hat{\psi} - m\hat{\psi}\hat{\psi}. \quad (2.1)$$

Здесь $\hat{\psi}$ представляет оператор электрон-позитронного поля, $\hat{\psi} = \hat{\psi}^\dagger \gamma^0$ — дираковский сопряженный оператор, m — масса электрона, γ^μ — матрицы Дирака, а $\mathcal{A}_\mu^{\text{ext}}$ обозначает классическое внешнее поле. Поскольку мы рассматриваем столкновения с энергиями, близкими к кулоновскому барьеру, межъядерная скорость оказывается относительно небольшой. Поэтому 4-потенциал $\mathcal{A}_\mu^{\text{ext}}$ можно с хорошей точностью аппроксимировать его скалярной частью, пренебрегая векторной составляющей

$$\mathcal{A}_0^{\text{ext}} = V(\mathbf{r}, t), \quad (2.2)$$

$$\mathcal{A}_i^{\text{ext}} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.3)$$

Здесь $V(\mathbf{r}, t)$ — зависящий от времени кулоновский потенциал сталкивающихся ядер

$$V(\mathbf{r}, t) = V_A(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_A(t)|) + V_B(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_B(t)|), \quad (2.4)$$

$$V_{A,B}(r) = \frac{e}{4\pi} \int d\mathbf{r}' \frac{\rho_{A,B}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.5)$$

где $\mathbf{R}_{A,B}(t)$ — координаты ядер, а $\rho_{A,B}(r)$ — их плотность распределения заряда. Последняя описывается моделью равномерно заряженного шара.

Согласно процедуре канонического квантования, импульсы, сопряженные

с электрон-позитронным полем, имеют вид

$$p_\psi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{\psi}} = i\hat{\psi}\gamma^0, \quad (2.6)$$

$$p_{\bar{\psi}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{\bar{\psi}}} = 0. \quad (2.7)$$

Это приводит к гамильтониану

$$\hat{H}(t) = \int d\mathbf{x} \hat{\bar{\psi}}(x) \left(-i\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\nabla} + m + e\gamma^\mu \mathcal{A}_\mu^{\text{ext}}(x) \right) \hat{\psi}(x) = \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^\dagger(x) H(t) \hat{\psi}(x), \quad (2.8)$$

где $H(t) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\beta + V(\mathbf{r}, t)$ — гамильтониан Дирака. Для того чтобы дираковское поле, описывающее частицы со спином $\frac{1}{2}$, соответствовало принципу Паули, следующие антикоммутиационные соотношения, взятые при $x_0 = y_0$, накладываются на операторы $\hat{\psi}$ и $\hat{\bar{\psi}}$:

$$\begin{cases} \left\{ \hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y) \right\} = \left\{ \hat{\bar{\psi}}(x), \hat{\bar{\psi}}(y) \right\} = 0, \\ \left\{ \hat{\psi}(x), \hat{\bar{\psi}}(y) \right\} = \gamma^0 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad x_0 = y_0. \end{cases} \quad (2.9)$$

Временная зависимость произвольного оператора \hat{A} в представлении Гейзенберга определяется уравнением

$$\partial_t \hat{A}(\mathbf{r}, t) = i \left[\hat{H}(t), \hat{A}(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (2.10)$$

Поэтому, комбинируя выражения (2.8)–(2.10), получаем следующее уравнение, описывающее временную эволюцию оператора электрон-позитронного поля $\hat{\psi}$:

$$i\partial_{x_0} \hat{\psi}(x) = H(x_0) \hat{\psi}(x). \quad (2.11)$$

Введём теперь два набора решений нестационарного уравнения Дирака

$$i\partial_{x_0} \varphi(x) = H(x_0) \varphi(x), \quad (2.12)$$

называемые in- и out-решениями. In-решения обозначим как ${}_\zeta \varphi_n(x)$, а out-решения

— как ${}_{\zeta}\varphi_n(x)$, где $\zeta = \pm$ используется для указания того, имеет ли соответствующее решение положительную энергию (+) или отрицательную (−). Разница между этими двумя наборами заключается в том, что in-решения зависят от начальных условий

$$\begin{cases} (i\partial_{x_0} - H(x_0)) {}_{\zeta}\varphi_n(x) = 0, \\ {}_{\zeta}\varphi_n(x)|_{x_0=t_{\text{in}}} = {}_{\zeta}\phi_n(\mathbf{x}), \end{cases} \quad (2.13)$$

в то время как out-решения удовлетворяют конечным условиям

$$\begin{cases} (i\partial_{x_0} - H(x_0)) {}_{\zeta}\varphi_n(x) = 0, \\ {}_{\zeta}\varphi_n(x)|_{x_0=t_{\text{out}}} = {}_{\zeta}\phi_n(\mathbf{x}). \end{cases} \quad (2.14)$$

Здесь ${}_{\zeta}\phi(\mathbf{x})$ и ${}^{\zeta}\phi(\mathbf{x})$ являются собственными состояниями гамильтониана Дирака, взятыми в моменты времени t_{in} и t_{out} , соответственно:

$$H(t_{\text{in}}) {}_{\zeta}\phi_n = {}_{\zeta}\varepsilon_n {}_{\zeta}\phi_n, \quad (2.15)$$

$$H(t_{\text{out}}) {}^{\zeta}\phi_n = {}^{\zeta}\varepsilon_n {}^{\zeta}\phi_n. \quad (2.16)$$

Наборы $\{{}_{\zeta}\varphi_n(x)\}$, $\{{}^{\zeta}\varphi_n(x)\}$ являются полными и ортонормированными в любой момент времени

$$({}_{\zeta}\varphi_n, {}_{\zeta'}\varphi_m) = ({}^{\zeta}\varphi_n, {}^{\zeta'}\varphi_m) = \delta_{\zeta\zeta'}\delta_{nm}, \quad \zeta, \zeta' = \pm, \quad (2.17)$$

$$\sum_{\zeta, n} {}_{\zeta}\varphi_n(x) {}_{\zeta}\varphi_n^{\dagger}(y) = \sum_{\zeta, n} {}^{\zeta}\varphi_n(x) {}^{\zeta}\varphi_n^{\dagger}(y) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad x_0 = y_0, \quad (2.18)$$

$$(f, g) = \int d\mathbf{x} f^{\dagger}(\mathbf{x})g(\mathbf{x}). \quad (2.19)$$

Следовательно, оператор электрон-позитронного поля $\hat{\psi}(x)$ может быть разложен по любому из них

$$\hat{\psi}(x) = \sum_n \left[\hat{a}_n(\text{in})_+ \varphi_n(x) + \hat{b}_n^{\dagger}(\text{in})_- \varphi_n(x) \right], \quad (2.20)$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_n \left[\hat{a}_n(\text{out})^+ \varphi_n(x) + \hat{b}_n^{\dagger}(\text{out})^- \varphi_n(x) \right]. \quad (2.21)$$

Соответствующее разложение сопряженного поля $\hat{\psi}(x)$ имеет вид

$$\hat{\psi}(x) = \sum_n \left[\hat{a}_n^\dagger(\text{in})_+ \bar{\varphi}_n(x) + \hat{b}_n(\text{in})_- \bar{\varphi}_n(x) \right], \quad (2.22)$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_n \left[\hat{a}_n^\dagger(\text{out})^+ \bar{\varphi}_n(x) + \hat{b}_n(\text{out})^- \bar{\varphi}_n(x) \right]. \quad (2.23)$$

Операторы $\hat{a}^\dagger(\text{in/out})$ и $\hat{a}(\text{in/out})$ называются операторами рождения и уничтожения электрона в in-/out-состоянии. Операторы $\hat{b}^\dagger(\text{in/out})$ и $\hat{b}(\text{in/out})$ представляют соответствующие операторы рождения и уничтожения позитрона в in-/out-состоянии. Используя одновременные антикоммутационные соотношения (2.9) для $\hat{\psi}$ и $\hat{\psi}$, можно получить следующие соотношения для только что введенных операторов рождения/уничтожения:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{a}_n(\text{in}), \hat{a}_m(\text{in}) \right\} &= \left\{ \hat{a}_n^\dagger(\text{in}), \hat{a}_m^\dagger(\text{in}) \right\} = \\ & \left\{ \hat{b}_n(\text{out}), \hat{b}_m(\text{out}) \right\} = \left\{ \hat{b}_n^\dagger(\text{out}), \hat{b}_m^\dagger(\text{out}) \right\} = 0, \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{a}_n(\text{in}), \hat{a}_m^\dagger(\text{in}) \right\} &= \left\{ \hat{b}_n(\text{in}), \hat{b}_m^\dagger(\text{in}) \right\} = \\ & \left\{ \hat{a}_n(\text{out}), \hat{a}_m^\dagger(\text{out}) \right\} = \left\{ \hat{b}_n(\text{out}), \hat{b}_m^\dagger(\text{out}) \right\} = \delta_{nm}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Поскольку функции ${}_c\varphi_n(x)$ и ${}^c\varphi_n(x)$ удовлетворяют тому же нестационарному уравнению Дирака, что и $\hat{\psi}(x)$, операторы рождения и уничтожения оказываются не зависящими от времени. Однако следует отметить, что они относятся к физическим частицам только в определенные моменты времени, а именно, in-операторы — при $t = t_{\text{in}}$, out-операторы — при $t = t_{\text{out}}$. Только в эти моменты времени гамильтониан (2.8) приобретает диагональную форму в терминах in-/out-операторов:

$$\hat{H}(t_{\text{in}}) = \sum_n \left[+\varepsilon_n(t_{\text{in}}) \hat{a}_n^\dagger(\text{in}) \hat{a}_n(\text{in}) + |-\varepsilon_n(t_{\text{in}})| \hat{b}_n^\dagger(\text{in}) \hat{b}_n(\text{in}) \right], \quad (2.26)$$

$$\hat{H}(t_{\text{out}}) = \sum_n \left[+\varepsilon_n(t_{\text{out}}) \hat{a}_n^\dagger(\text{out}) \hat{a}_n(\text{out}) + |-\varepsilon_n(t_{\text{out}})| \hat{b}_n^\dagger(\text{out}) \hat{b}_n(\text{out}) \right]. \quad (2.27)$$

Вакуумные состояния определяются обычным образом:

$$\hat{a}_n(\text{in})|0, \text{in}\rangle = \hat{b}_n(\text{in})|0, \text{in}\rangle = \hat{a}_n(\text{out})|0, \text{out}\rangle = \hat{b}_n(\text{out})|0, \text{out}\rangle = 0. \quad (2.28)$$

Общий вид in-/out-состояний с определёнными числами заполнения представляется как

$$|\text{in}\rangle = \hat{a}_k^\dagger(\text{in}) \dots \hat{b}_l^\dagger(\text{in}) \dots |0, \text{in}\rangle, \quad (2.29)$$

$$|\text{out}\rangle = \hat{a}_k^\dagger(\text{out}) \dots \hat{b}_l^\dagger(\text{out}) \dots |0, \text{out}\rangle. \quad (2.30)$$

Интересующие нас величины — это средние числа электронов n_m и позитронов \bar{n}_m , рождённых из вакуума в определенном состоянии m . Они определяются как

$$n_m = \langle 0, \text{in} | \hat{a}_m^\dagger(\text{out}) \hat{a}_m(\text{out}) | 0, \text{in} \rangle, \quad (2.31)$$

$$\bar{n}_m = \langle 0, \text{in} | \hat{b}_m^\dagger(\text{out}) \hat{b}_m(\text{out}) | 0, \text{in} \rangle. \quad (2.32)$$

Для того чтобы вычислить эти матричные элементы, out-операторы необходимо выразить через in-операторы. Для этого воспользуемся следующими выражениями:

$$\hat{a}_m(\text{out}) = \int d\mathbf{x} \, {}^+ \varphi_m^\dagger(x) \hat{\psi}(x), \quad (2.33)$$

$$\hat{a}_m^\dagger(\text{out}) = \int d\mathbf{x} \, \hat{\psi}^\dagger(x) {}^+ \varphi_m(x), \quad (2.34)$$

$$\hat{b}_m(\text{out}) = \int d\mathbf{x} \, \hat{\psi}^\dagger(x) {}^- \varphi_m(x), \quad (2.35)$$

$$\hat{b}_m^\dagger(\text{out}) = \int d\mathbf{x} \, {}^- \varphi_m^\dagger(x) \hat{\psi}(x). \quad (2.36)$$

Подставив сюда $\hat{\psi}(x)$, $\hat{\psi}^\dagger(x)$, записанные в терминах in-операторов (см. уравне-

ния (2.20) и (2.22)), получаем

$$\hat{a}_m(\text{out}) = \sum_n \left[G(+|+)_{mn} \hat{a}_n(\text{in}) + G(+|-)_{mn} \hat{b}_n^\dagger(\text{in}) \right], \quad (2.37)$$

$$\hat{a}_m^\dagger(\text{out}) = \sum_n \left[G(+|+)_{nm} \hat{a}_n^\dagger(\text{in}) + G(-|+)_{nm} \hat{b}_n(\text{in}) \right], \quad (2.38)$$

$$\hat{b}_m(\text{out}) = \sum_n \left[G(+|-)_{nm} \hat{a}_n^\dagger(\text{in}) + G(-|-)_{nm} \hat{b}_n(\text{in}) \right], \quad (2.39)$$

$$\hat{b}_m^\dagger(\text{out}) = \sum_n \left[G(-|+)_{mn} \hat{a}_n(\text{in}) + G(-|-)_{mn} \hat{b}_n^\dagger(\text{in}) \right], \quad (2.40)$$

где

$$G(\xi|\zeta)_{mn} = \int d\mathbf{x} \xi \varphi_m^\dagger(x)^\zeta \varphi_n(x), \quad (2.41)$$

$$G(\zeta|\xi) = G(\xi|\zeta)^\dagger, \quad \xi, \zeta = \pm. \quad (2.42)$$

Вследствие ортонормированности и полноты наборов $\{\pm\varphi(x)\}$ и $\{\pm\varphi(x)\}$, матрицы $G(\pm|\pm)$, $G(\pm|\pm)$ обладают рядом свойств:

$$\sum_{\xi=\pm} G(\pm|\xi) G(\xi|\pm) = \sum_{\xi=\pm} G(\pm|\xi) G(\xi|\pm) = I, \quad (2.43)$$

$$\sum_{\xi=\pm} G(\pm|\xi) G(\xi|\mp) = \sum_{\xi=\pm} G(\pm|\xi) G(\xi|\mp) = 0. \quad (2.44)$$

Подставляя выражения (2.37), (2.38) в (2.31) и используя перестановочные соотношения (2.24), (2.25) с определением вакуумного состояния (2.28), получаем среднее число рождённых электронов в определенном состоянии m , равное [73]

$$n_m = \left(G(+|-) G(-|+) \right)_{mm}. \quad (2.45)$$

Аналогично, для среднего числа позитронов получаем

$$\bar{n}_m = \left(G(-|+) G(+|-) \right)_{mm}. \quad (2.46)$$

Величины n_m/\bar{n}_m можно также интерпретировать как средние числа образующихся электрон-позитронных пар, в которых электрон/позитрон находится в состоянии m , при этом позитрон/электрон может занимать любое из возмож-

ных состояний. Полное количество рождённых электронов, n , и позитронов, \bar{n} , может быть представлено как

$$n = \sum_m n_m, \quad (2.47)$$

$$\bar{n} = \sum_m \bar{n}_m. \quad (2.48)$$

Можно легко показать, что полные числа электронов и позитронов совпадают, т.е. $n = \bar{n}$. В связи с тем, что вероятность образования $k + 1$ электрон-позитронных пар из вакуума на несколько порядков меньше, чем вероятность образования k пар, средние значения рождённых частиц n_m и \bar{n}_m в основном определяются вероятностью образования одной пары. По этой причине в диссертации мы используем выражения «вероятность рождения пар» и «среднее число рождённых пар» взаимозаменяемо, но фактические значения всегда рассчитываются по формулам (2.45)–(2.48).

Следует отметить, что индексы в суммах и матрицах, приведенных выше, являются не только дискретными, но и охватывают непрерывный набор значений. Однако, поскольку в численных расчетах мы используем конечный базисный набор, фактически мы имеем дело с чистым дискретным спектром. Таким образом, прямое вычисление энергетических спектров испускаемых частиц по формулам (2.45) и (2.46) не представляется возможным. По этой причине, дифференциальные вероятности $dP/d\varepsilon$ вычисляются с использованием модифицированной версии процедуры Стилтеса [55]

$$\frac{dP}{d\varepsilon} \left(\frac{\varepsilon_p + \varepsilon_{p+s-1}}{2} \right) = \frac{1}{\varepsilon_{p+s-1} - \varepsilon_p} \left(\frac{\bar{n}_p + \bar{n}_{p+s-1}}{2} + \sum_{i=1}^{s-2} \bar{n}_{p+i} \right). \quad (2.49)$$

Здесь s определяет количество дискретных энергетических собственных значений ε_i , участвующих в вычислении одной точки энергетического спектра позитронов. При $s = 2$ уравнение (2.49) переходит в обычную формулу Стилтеса [52, 53, 74].

Глава 3. Траектории столкновений

В рамках нашего метода расчета ядра рассматриваются классически как равномерно заряженные шары. Движение ядер определяется нерелятивистской классической механикой, которая предписывает им следовать по гиперболическим резерфордским траекториям. Обычно траектории рассеяния параметризуются при помощи энергии столкновения E и прицельного параметра b . В настоящем исследовании мы будем изучать поведение вероятности рождения электрон-позитронных пар и энергетических спектров позитронов, полученных в столкновениях с разными энергиями E , но соответствующих одному и тому же расстоянию наибольшего сближения R_{\min} . Поэтому, оказывается удобным задавать конкретную траекторию с помощью R_{\min} и параметра $\eta = E/E_0$, который представляет собой отношение энергии столкновения E к энергии E_0 лобового столкновения с тем же R_{\min} . При фиксированном значении R_{\min} прицельный параметр b связан с энергией столкновения E в системе отсчета центра масс посредством уравнения

$$b^2 = R_{\min}^2 - \frac{\alpha Z_A Z_B}{E} R_{\min}, \quad (3.1)$$

где $\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры, а Z_A, Z_B — заряды сталкивающихся ядер. Учитывая, что для лобовых столкновений $E_0 = \alpha Z_A Z_B / R_{\min}$, и используя определение параметра $\eta = E/E_0$, можно получить следующее взаимнозначное соответствие между традиционными параметрами траектории (E, b) и нашими новыми параметрами (R_{\min}, η)

$$E = \eta E_0, \quad (3.2)$$

$$b = R_{\min} \sqrt{1 - 1/\eta}. \quad (3.3)$$

Угол рассеяния θ оказывается функцией только η и выражается как

$$\theta = \pi - 2 \arccos(1/(2\eta - 1)). \quad (3.4)$$

Решая уравнение (3.1) относительно R_{\min} , получаем обратное преобразование от (E, b) к (R_{\min}, η)

$$R_{\min} = \frac{\alpha Z_A Z_B}{E} \eta, \quad (3.5)$$

$$\eta = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \left(\frac{2bE}{\alpha Z_A Z_B} \right)^2} \right). \quad (3.6)$$

Используя уравнение (3.4), η можно представить в виде функции угла рассеяния θ как

$$\eta = \frac{1}{2} \left(1 + \left[\cos \left(\frac{\pi - \theta}{2} \right) \right]^{-1} \right). \quad (3.7)$$

Примеры траекторий, соответствующих столкновениям $U^{92+}-U^{92+}$ с различными энергиями, E , и прицельными параметрами, b , но имеющих одинаковое расстояние наибольшего сближения $R_{\min} = 17.5$ фм, представлены на Рис. 4. Все траектории такого рода касаются окружности диаметром $d = R_{\min}$.

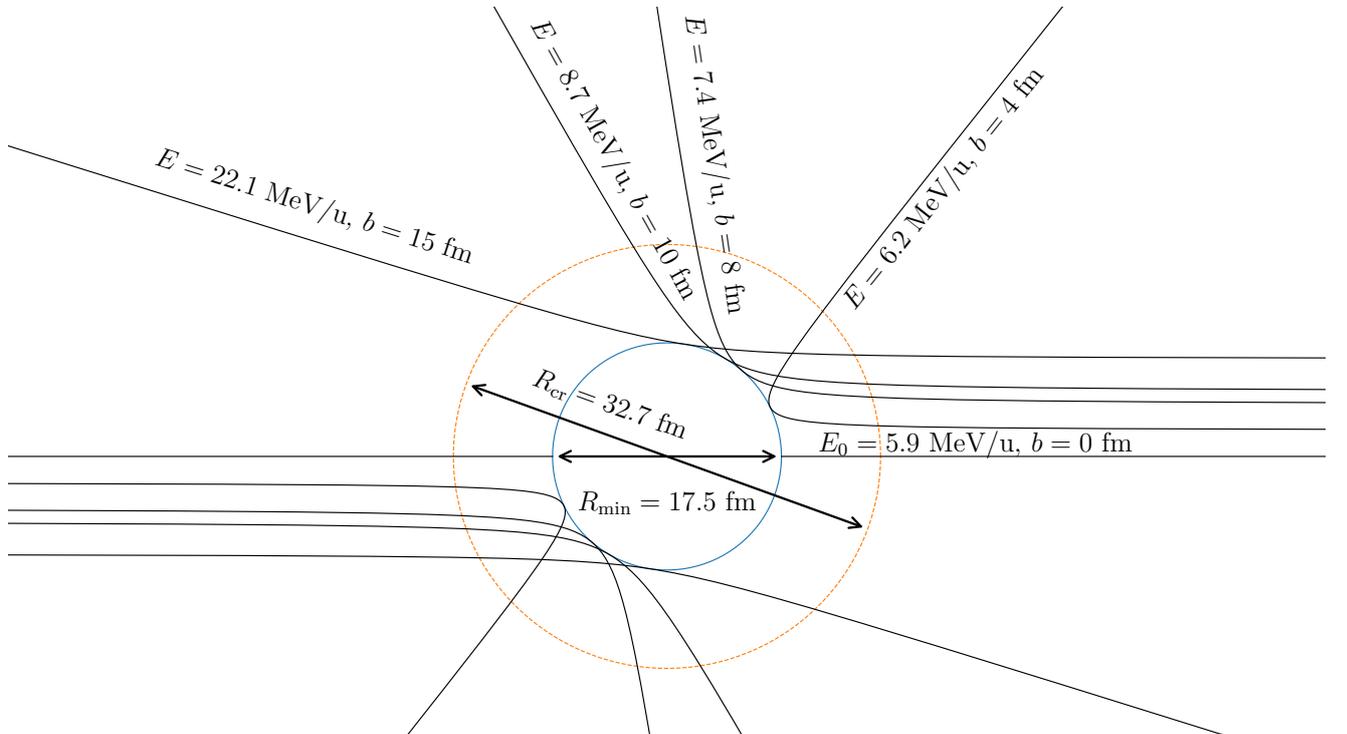


Рис. 4: Пример рассматриваемых траекторий рассеяния $U^{92+}-U^{92+}$ с $R_{\min} = 17.5$ фм. Внешняя окружность $R_{cr} = 32.7$ фм очерчивает границу сверхкритической области.

На Рис. 4 эта окружность изображена сплошной синей линией. Вторая окружность, нарисованная пунктирной оранжевой линией, очерчивает область сверхкритических межъядерных расстояний. Это означает, что когда ядра находятся внутри области $R(t) \leq R_{\text{cr}}$, в нижнем континууме появляется резонанс, происходящий из наинизшего квазимолекулярного связанного состояния, достигшего энергии $\varepsilon_{1s\sigma}(Z_A, Z_B, R_{\text{cr}}) = -mc^2$. Для столкновений голых ядер урана, рассматриваемых в монопольном приближении, критическое межъядерное расстояние $R_{\text{cr}} = 32.7$ фм.

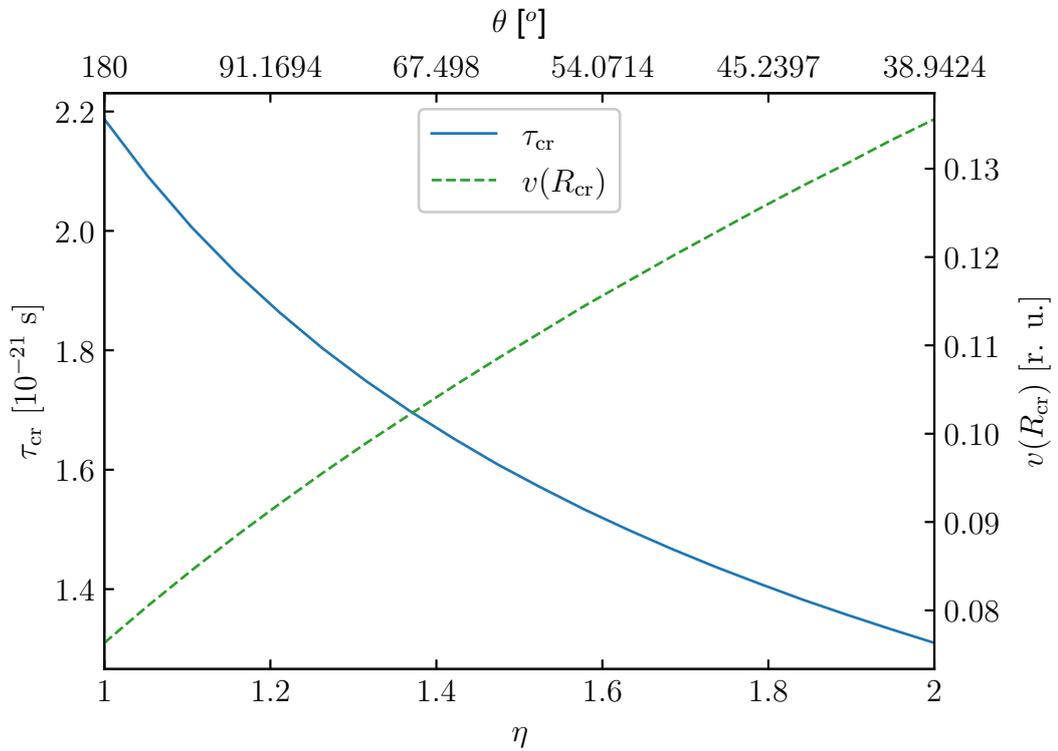


Рис. 5: Продолжительность сверхкритического режима и скорость ядер в точке $R = R_{\text{cr}}$ в столкновениях $U^{92+}-U^{92+}$ с $R_{\text{min}} = 17.5$ фм как функции $\eta = E/E_0$ и соответствующего угла рассеяния θ .

Продолжительность сверхкритического режима определяется временем, которое ядра проводят в кольце $R_{\text{min}} \leq R(t) < R_{\text{cr}}$ (см. также Рис. 2). Это время монотонно уменьшается с ростом η . Фактическая зависимость τ_{cr} от η для случая столкновений $U^{92+}-U^{92+}$ с $R_{\text{min}} = 17.5$ фм показана на Рис. 5. На рисунке также представлена относительная скорость ядер на границе сверхкритической области, т.е. когда $R(t) = R_{\text{cr}}$, как функция η . В отличие от τ_{cr} , эта скорость монотонно возрастает с увеличением $\eta = E/E_0$. Из общих соображений ясно, что при фиксированном значении R_{min} обычное динамическое рождение пар должно усиливаться с ростом скорости ядер, характеризуемой в данном случае

параметром η , и уменьшаться с ее уменьшением. С другой стороны, снижение скорости положительно влияет на спонтанный механизм, увеличивая временной интервал, когда он активен. Следовательно, оставляя в стороне вопрос интерференции между двумя механизмами, увеличение вероятности рождения пар при $\eta \rightarrow 1$ следует рассматривать как признак перехода в сверхкритический режим, в котором становится возможным спонтанный распад вакуума.

Глава 4. Расчёты в монопольном приближении

В этом разделе мы рассмотрим процесс рождения электрон-позитронных пар в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер в рамках монопольного приближения, которое учитывает только сферически симметричную часть двухцентрового потенциала ядер. Сначала мы опишем процедуру, используемую для решения стационарного уравнения Дирака. Она необходима для задания начальных условий для зависящих от времени волновых функций. После этого мы перейдем к описанию основных частей вычислительной техники, разработанной для решения нестационарного уравнения Дирака. И, наконец, мы представим и обсудим результаты расчетов вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов в столкновениях тяжелых ядер в широком диапазоне параметров столкновений. Результаты исследования, описанные в настоящей главе, были опубликованы в работе [60].

4.1 Стационарное уравнение Дирака

Для того чтобы задать начальную точку для интегрирования нестационарного уравнения Дирака для наборов in-/out-решений, представленных выше, необходимо найти собственные состояния гамильтониана Дирака, взятого в момент времени $t_{\text{in}}/t_{\text{out}}$. Зависимость гамильтониана от времени полностью содержится в члене с потенциальной энергией. В монопольном приближении суммарный потенциал ядер имеет вид

$$V^{\text{mon}}(r, t) = \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{n} V(\mathbf{r}, t), \quad (4.1)$$

$$V(\mathbf{r}, t) = V_A(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_A(t)|) + V_B(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_B(t)|), \quad (4.2)$$

$$V_{A,B}(r) = \frac{e}{4\pi} \int d\mathbf{r}' \frac{\rho_{A,B}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (4.3)$$

где $V(\mathbf{r}, t)$ — суммарный двухцентровый потенциал ядер, расположенных в точках $\mathbf{R}_{A,B}(t)$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$ — единичный вектор, направленный вдоль \mathbf{r} . Плотность распределения заряда ядер, $\rho_{A,B}(r)$, описывалась с помощью модели однородно

заряженного шара, согласно которой

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{\alpha Z}{R_{\text{nucl}}} \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R_{\text{nucl}}} \right)^2 \right), & \text{для } r \leq R_{\text{nucl}}, \\ -\frac{\alpha Z}{r}, & \text{для } r > R_{\text{nucl}}, \end{cases} \quad (4.4)$$

где $\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры, Z — заряд ядра, а R_{nucl} — его зарядовый радиус. Радиусы ядер вычислялись по приближённой формуле $R_{\text{nucl}} = 1.2 \times A^{1/3}$ фм, где $A = 2.5Z$ — атомное массовое число. Расположенное на расстоянии d от начала координат однородно заряженное сферически симметричное ядро создаёт потенциал со следующей монополюсной частью

$$V^{\text{mon}}(r; d) = \begin{cases} -\frac{\alpha Z}{d}, & \text{для } r \leq r_-, \\ -\frac{\alpha Z}{R_{\text{nucl}}^3 d} \left[\frac{1}{16r} (d - R_{\text{nucl}})^3 (d + 3R_{\text{nucl}}) \right. \\ \quad \left. - \frac{1}{4} r_+^2 (d - 2R_{\text{nucl}}) + \frac{3}{8} (d^2 - R_{\text{nucl}}^2) \right. \\ \quad \left. - \frac{1}{4} dr^2 + \frac{1}{16} r^3 \right], & \text{для } r_- < r < r_+, \\ -\frac{\alpha Z}{r}, & \text{для } r \geq r_+, \end{cases} \quad (4.5)$$

где

$$r_+ = d + R_{\text{nucl}}, \quad (4.6)$$

$$r_- = d - R_{\text{nucl}}. \quad (4.7)$$

Для симметричных столкновений, рассматриваемых в системе отсчета центра масс, параметр d равен половине межъядерного расстояния $R(t)$. Если сталкивающиеся ядра отличаются, то каждое из них будет иметь свое собственное значение расстояния d , определяемое по формуле

$$d_A = \frac{M_B}{M_A + M_B} R(t), \quad (4.8)$$

$$d_B = \frac{M_A}{M_A + M_B} R(t), \quad (4.9)$$

где M_A и M_B обозначают соответствующие массы ядер.

Поскольку монополярный потенциал (4.1) зависит от времени только посредством межъядерного расстояния $R(t)$, которое имеет одинаковые значения в моменты времени t_{in} и t_{out} , мы имеем

$$H(t_{\text{in}}) = H(t_{\text{out}}). \quad (4.10)$$

Следовательно, необходимо построить только один набор собственных состояний. Как было указано выше, процесс столкновения ядер рассматривается в рамках метода конечного базисного набора. Радиальная часть базисных функций описывается В-сплайнами [75], в то время как угловая часть представлена сферическими спинорами $\mathbf{\Omega}_{\kappa\mu}(\mathbf{n})$ [71]. Чтобы избавиться от ложных состояний, мы использовали метод дуального кинетического баланса (ДКВ) [76].

Стационарное уравнение Дирака для сферически симметричного потенциала $V(r)$ имеет вид

$$H_0\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}), \quad (4.11)$$

$$H_0 = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\beta + V(r), \quad (4.12)$$

где $\boldsymbol{\alpha}$, β — матрицы Дирака. Как известно, для сферически симметричных полей стационарная волновая функция φ может быть записана в виде одного биспинора

$$\varphi_{n\kappa\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G_{n\kappa}(r)\mathbf{\Omega}_{\kappa\mu}(\mathbf{n}) \\ iF_{n\kappa}(r)\mathbf{\Omega}_{-\kappa\mu}(\mathbf{n}) \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

где n — главное квантовое число, $\mathbf{\Omega}_{\kappa\mu}(\mathbf{n})$ — сферический спинор с релятивистским квантовым угловым числом $\kappa = (-1)^{j+l+\frac{1}{2}}(j + \frac{1}{2})$ и z -проекцией полного углового момента μ . Такая форма волновой функции позволяет исключить угловые переменные из уравнения (4.11). Представив теперь двухкомпонентный массив из функций $G(r)$ и $F(r)$ как

$$\phi(r) = \begin{pmatrix} G(r) \\ F(r) \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

получим радиальное уравнение Дирака в виде

$$H_\kappa \phi = \varepsilon \phi, \quad (4.15)$$

где

$$H_\kappa = \begin{pmatrix} m + V(r) & -\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \\ \frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} & -m + V(r) \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

При использовании метода конечного базисного набора функция $\phi(r)$ приближенно записывается в виде конечной суммы

$$\phi(r) = \sum_{i=1}^{2n} c_i u_i(r) \quad (4.17)$$

линейно независимых и квадратично интегрируемых двухкомпонентных функций $u_i(r)$. Таким образом, радиальное уравнение Дирака (4.15) преобразуется в обобщенную задачу на собственные значения

$$H_\kappa \mathbf{c} = \varepsilon S_\kappa \mathbf{c}, \quad (4.18)$$

где $\mathbf{c} = \{c_1, \dots, c_{2n}\}$ обозначает массив коэффициентов разложения, $H_{\kappa;ij} = \langle u_i | H_\kappa | u_j \rangle$ — матрица гамильтониана, а $S_{\kappa;ij} = \langle u_i | u_j \rangle$ — матрица перекрытия. Решив задачу (4.18), получим набор собственных значений ε_i и собственных векторов \mathbf{c}_i ($i = 1, \dots, 2n$), которые представляют дискретизированную версию спектра оператора H_0 .

Суть метода ДКВ заключается в специальном выборе базисных функций $u_i(r)$, учитывающем связь между верхней и нижней компонентами биспиноров Дирака, а именно,

$$u_i(r) = \begin{pmatrix} \pi_i(r) \\ \frac{1}{2m} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) \pi_i(r) \end{pmatrix}, \quad i \leq n, \quad (4.19)$$

$$u_i(r) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2m} \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) \pi_{i-n}(r) \\ \pi_{i-n}(r) \end{pmatrix}, \quad i > n. \quad (4.20)$$

Использование базисных функций такого вида гарантирует, что матрицы H_κ и $H_{-\kappa}$ в общем случае будут иметь разные наборы собственных значений, сохраняя симметрии, присущие уравнению Дирака, например, симметрию зарядового сопряжения. Следует отметить, что метод ДКВ применим только для потенциалов, которые не имеют сингулярностей в начале координат. Кулоновский потенциал точечного заряда не относится к этой категории из-за сингулярности при $r \rightarrow 0$. Однако это не вызывает у нас никаких сложностей, поскольку рассматриваемый нами суммарный потенциал ядер является конечным в любой точке пространства. В реальных вычислениях в качестве функций $\pi_i(r)$ использовались В-сплайны.

Термин В-сплайны является сокращением от «базисные сплайны», что означает, что произвольная сплайн-функция может быть однозначно представлена в виде линейной комбинации В-сплайнов того же порядка. Сплайн-функция n -го порядка, в свою очередь, является кусочно-полиномиальной функцией, определенной на заданной сетке узлов. На каждом интервале сетки эта функция имеет вид полинома n -й степени. Для данной сетки узлов $\{t_i\}_{i=0}^N$ В-сплайны порядка p представляет собой набор кусочно-полиномиальных функций $B_{i,p}(t)$ степени p , которые имеют очень компактный носитель. А именно, $B_{i,p}(t)$ равен нулю везде, за исключением области $t_i \leq t \leq t_{i+p+1}$. Такая сильная локализация В-сплайнов является весьма выгодной, особенно для расчетов за рамками монопольного приближения. Причина этого заключается в том, что работа с большими, но разреженными матрицами, возникающими в таких вычислениях, может быть оптимизирована с помощью численных алгоритмов, специально разработанных для эффективной работы с такого рода матрицами.

Функции $B_{i,p}(t)$ могут быть определены рекурсивно с помощью соотношений

$$B_{i,0}(t) = \begin{cases} 1, & \text{если } t_i \leq t < t_{i+1}, \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} \quad (4.21)$$

и

$$B_{i,k}(t) = \frac{t - t_i}{t_{i+k} - t_i} B_{i,k-1}(t) + \frac{t_{i+k+1} - t}{t_{i+k+1} - t_{i+1}} B_{i+1,k-1}(t). \quad (4.22)$$

Пример В-сплайнов 3-го порядка, построенных на сетке $t_i = [0, 0, 0, 1, 2, 3, 4, 5,$

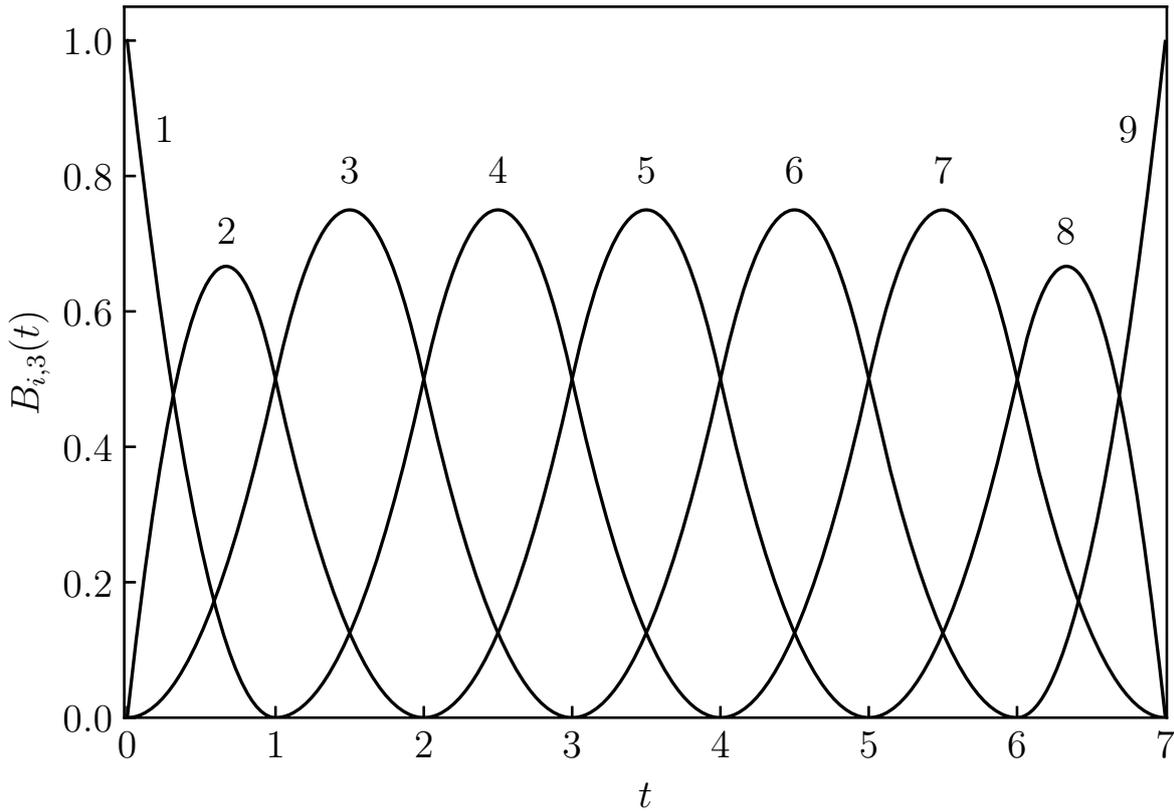


Рис. 6: Пример В-сплайнов 3-го порядка, построенных на сетке $t_i = [0, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 7, 7]$

6, 7, 7, 7], показан на Рис. 6. Для простоты здесь выбрана равномерная сетка. Из рисунка видно, что первый сплайн равен 1 в начале первого интервала. То же самое верно и для последнего сплайна в конце последнего интервала. Второй и предпоследний сплайны в этих точках имеют ненулевые производные. Другие В-сплайны имеют нулевые значения и первые производные в начале и в конце своих интервалов. Сумма всех В-сплайнов заданной степени равна единице

$$\sum_i B_{i,k}(t) = 1. \quad (4.23)$$

В-сплайны могут использоваться для аппроксимации функций с различной гладкостью в узлах. Число непрерывных производных, задаётся соответствующим количеством повторяющихся узлов в сетке. Чем больше узлов совпадает, тем менее гладкая получается функция. Чтобы удовлетворить нулевым граничным условиям, наложенным на волновые функции, мы исключаем из базисного набора первый и последний В-сплайны.

4.2 Нестационарное уравнение Дирака

Рассмотрев стационарные состояния, определяющие начальные и конечные условия, перейдем к описанию их эволюции во время столкновения. Для вычисления вероятности рождения электрон-позитронных пар по формулам (2.45)–(2.46), необходимо знать волновую функцию в момент времени t_{out} . Для этого необходимо решить нестационарное уравнение Дирака с определенными начальными условиями

$$\begin{cases} (i\partial_t - H(t)) \varphi_i(\mathbf{r}, t) = 0 \\ \varphi_i(\mathbf{r}, t_{\text{in}}) = \phi_i(\mathbf{r}), \end{cases} \quad (4.24)$$

где

$$H(t) = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\beta + V^{\text{mon}}(r, t), \quad (4.25)$$

$$H(t_{\text{in}})\phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r}) \quad (4.26)$$

и $V^{\text{mon}}(r, t)$ обозначает монопольную часть двухцентрового потенциала ядер, определяемую уравнением (4.1).

Зависящая от времени волновая функция $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ разлагается по базисному набору, состоящему из собственных состояний гамильтониана $H(t_{\text{in}})$,

$$\varphi_i(\mathbf{r}, t) = \sum_j a_{ji}(t) e^{-i\varepsilon_j t} \phi_j(\mathbf{r}). \quad (4.27)$$

Подставляя это разложение в уравнение (4.24), умножая его слева на $e^{i\varepsilon_k t} \phi_k^\dagger(\mathbf{r})$ и выполняя пространственное интегрирование, получаем систему уравнений на коэффициенты разложения $a_{ki}(t)$:

$$i\partial_t a_{ki}(t) = \sum_j V_{kj}(t) a_{ji}(t) e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon_j)t}, \quad (4.28)$$

$$V_{kj}(t) = \langle \phi_k | V^{\text{mon}}(r, t) - V^{\text{mon}}(r, t_{\text{in}}) | \phi_j \rangle. \quad (4.29)$$

Поскольку монопольный потенциал сферически симметричен, интегрирование по углам в уравнении (4.29) даёт дельта-функции Кронекера по угловым кван-

товым числам κ и μ соответствующих бра- и кет-состояний:

$$V_{kj}(t) = \delta_{\kappa_k \kappa_j} \delta_{\mu_k \mu_j} \int dr \rho_{kj}(r) [V^{\text{mon}}(r, t) - V^{\text{mon}}(r, t_{\text{in}})], \quad (4.30)$$

где

$$\rho_{kj}(r) = F_k(r)F_j(r) + G_k(r)G_j(r). \quad (4.31)$$

Оставшаяся радиальная часть матричного элемента $V_{kj}(t)$ вычисляется численно с использованием квадратур Гаусса-Лежандра.

В результате дифференциальное уравнение в частных производных (4.24) заменяется эквивалентной системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} i\partial_t \mathbf{a}_i(t) = M(t) \mathbf{a}_i(t), \\ \mathbf{a}_{ji}(t_{\text{in}}) = \delta_{ji}, \end{cases} \quad (4.32)$$

где $\mathbf{a}_i(t) = \{a_{1i}(t), \dots, a_{Ni}(t)\}$ и

$$M_{kj}(t) = V_{kj}(t) e^{i(\varepsilon_k - \varepsilon_j)}. \quad (4.33)$$

Для решения этой системы мы используем схему Кранка-Николсон [77], которая следующим образом связывает коэффициенты разложения, соответствующие смежным временным шагам, разделенным интервалом Δt :

$$\mathbf{a}_i(t + \Delta t) \approx U(t + \Delta t, t) \mathbf{a}_i(t), \quad (4.34)$$

где матрица U определена как

$$U(t + \Delta t, t) = \left[I + i \frac{\Delta t}{2} M \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) \right]^{-1} \left[I - i \frac{\Delta t}{2} M \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) \right], \quad (4.35)$$

I — единичная матрица. Преимущества этой схемы заключаются в том, что она сохраняет нормировку волновой функции не требует диагонализации матрицы $M(t)$ и обеспечивает погрешность выражения (4.34) на уровне $O(\Delta t^3)$. В реальных расчетах вместо вычисления матрицы $U(t + \Delta t, t)$ мы решаем экви-

валентную систему линейных уравнений

$$\left[I + \frac{i\Delta t}{2} M(t + \Delta t/2) \right] \mathbf{a}_i(t + \Delta t) = \left[I - \frac{i\Delta t}{2} M(t + \Delta t/2) \right] \mathbf{a}_i(t). \quad (4.36)$$

Наконец, матрицы $G(\zeta|\xi)$ в уравнениях (2.45) и (2.46) для средних чисел рожденных электронов и позитронов связаны с коэффициентами разложения $\mathbf{a}(t)$ как

$$G(\zeta|\xi)_{ij} = a_{ij}(t_{\text{out}}), \quad (4.37)$$

где $\zeta = +$, если i -е out-состояние соответствует положительной энергии, и $\zeta = -$ в противном случае. То же правило применяется для ξ и in-состояний.

4.3 Результаты

Используя описанный выше метод, мы провели исследование вероятностей рождения электрон-позитронных пар и энергетических спектров позитронов в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер в широком диапазоне параметров столкновений. Энергия квазимолекулярно связанного состояния и параметры соответствующего сверхкритического резонанса в основном определяются тремя параметрами: зарядами ядер $Z_{A,B}$ и межъядерным расстоянием R . Для того чтобы войти в сверхкритическую область, все эти параметры должны иметь соответствующие значения. Граница сверхкритической области параметров столкновения задается уравнением $\varepsilon_{1s\sigma}(Z_A, Z_B, R_{\min}) = -mc^2$. Имея это в виду, мы изучили зависимость от параметра $\eta = E/E_0$ вероятности рождения пар и энергетических спектров позитронов при переходе в сверхкритический режим путем увеличения суммарного заряда ядер Z_t сверх Z_{cr} и посредством уменьшения минимального межъядерного расстояния R_{\min} ниже R_{cr} . Базисный набор включал функции с $|\kappa| = 1$, которые, как было показано ранее, вносят основной вклад в рассматриваемый процесс. Поскольку состояния с разными значениями κ или μ не смешиваются сферически симметричным потенциалом, мы построили базисные наборы только из функций с $\mu = -\frac{1}{2}$ и провели вычисления для $\kappa = -1$ и $\kappa = 1$ отдельно. Затем полученные результаты были сложены и удвоены. Для расчета вероятностей мы использовали В-сплайны 9-го порядка, построенные на радиальной сетке с 200 узлами, распределенными экспоненци-

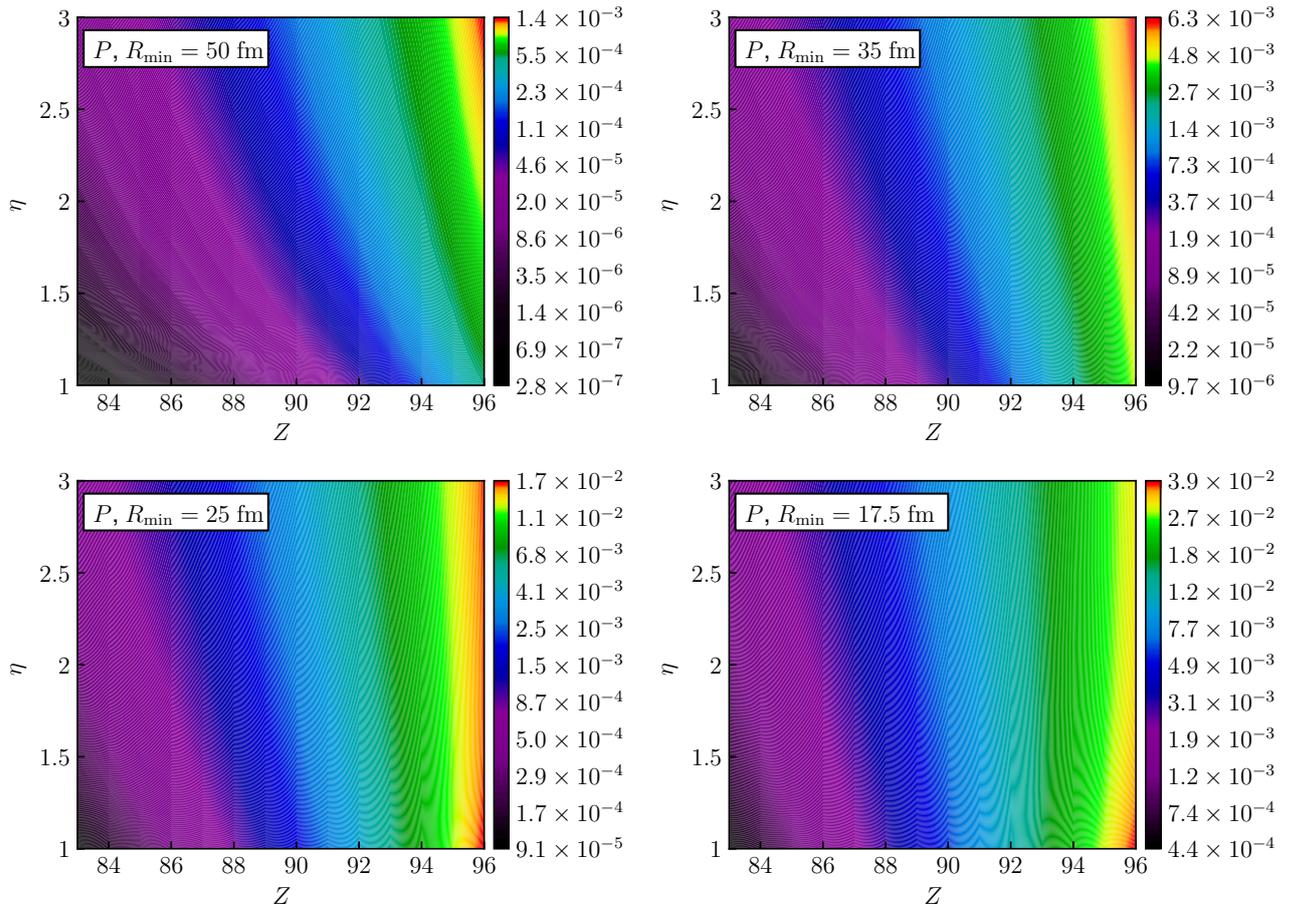


Рис. 7: Вероятность рождения e^-e^+ пар в симметричных столкновениях как функция заряда ядер Z и параметра $\eta = E/E_0$, полученная для различных расстояний наибольшего сближения R_{\min} .

ально. При расчетах позитронных спектров мы использовали В-сплайны того же порядка, построенные на полиномиальной сетке из 400 узлов.

4.3.1 Вероятности рождения пар

На рисунке 7 представлена вероятность рождения пар в зависимости от $\eta = E/E_0$ и $Z = Z_A = Z_B$ для симметричных столкновений с расстоянием наибольшего сближения $R_{\min} = 17.5, 25, 35, 50$ фм. Для самого большого заряда ядер, рассмотренного на Рис. 7, т.е. $Z = 96$, критическое значение межъядерного расстояния приблизительно равно 48 фм. Это означает, что рождение пар в столкновениях с $R_{\min} = 50$ фм имеет чисто динамическую природу. Верхняя левая панель на Рис. 7 показывает, что в этом случае вероятность рождения пар монотонно уменьшается при $\eta \rightarrow 1$ для всех Z . По мере уменьшения расстояния наибольшего сближения система сталкивающихся ядер с достаточно

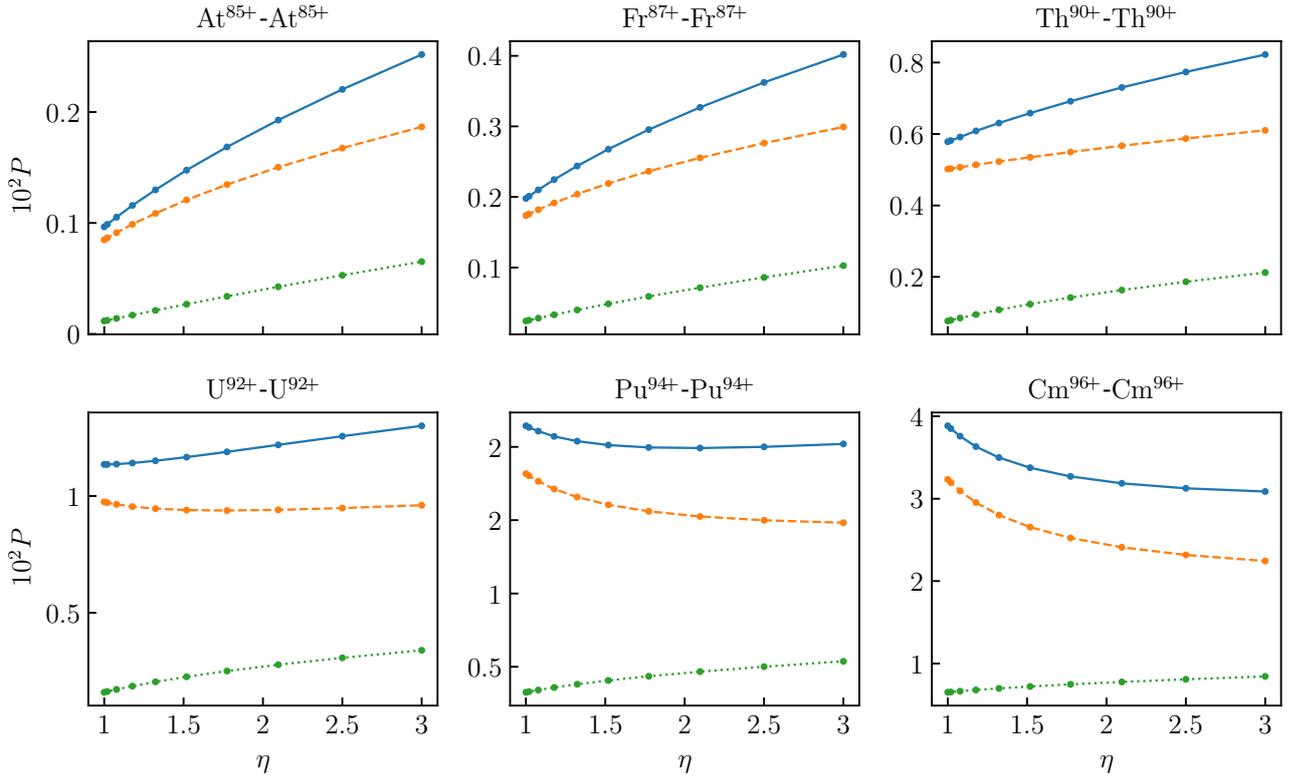


Рис. 8: Вероятность рождения e^-e^+ пар в симметричных столкновениях как функция $\eta = E/E_0$, полученная при $R_{\min} = 17.5$ фм. Зеленая пунктирная линия представляет вклад $p_{1/2}$ состояний, оранжевая штрихованная линия соответствует вкладу s состояний, и сплошная синяя кривая — это сумма вкладов s и $p_{1/2}$ состояний.

большими Z начинает проводить некоторое время в сверхкритическом режиме, т.е. с резонансом в отрицательно-энергетическом континууме. Это влечет за собой существенное изменение вероятности рождения пар в зависимости от η . Изменение наиболее заметно для наименьшего рассматриваемого значения $R_{\min} = 17.5$ фм, при котором критический заряд $Z_{\text{cr}} \approx 87.5$. Как показано на нижней правой панели Рис. 7, монотонное уменьшение вероятности рождения пар при $\eta \rightarrow 1$, характерное для $Z < Z_{\text{cr}}$, постепенно переходит в рост для достаточно больших зарядов ядер.

Этот переход от уменьшения к увеличению вероятности при $\eta \rightarrow 1$ можно более подробно проследить на Рис. 8, где показан вклад состояний s ($\kappa = -1$) и $p_{1/2}$ ($\kappa = 1$) в вероятность рождения пар в зависимости от η для ряда зарядов ядер и $R_{\min} = 17.5$ фм. Рисунок 8 показывает, что уже при $Z = 92$ вклад s состояний увеличивается при $\eta \rightarrow 1$, что компенсируется в полной вероятности уменьшением вклада $p_{1/2}$. Разница в η -зависимости вкладов s и $p_{1/2}$ состояний

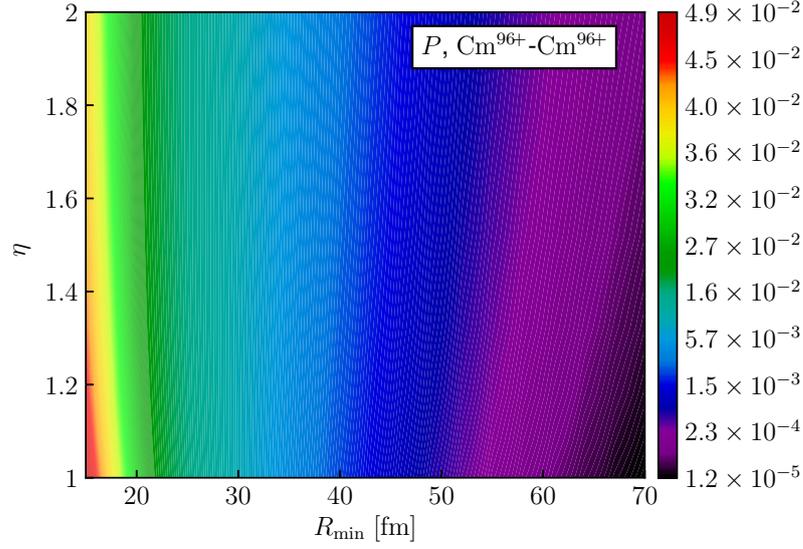


Рис. 9: Вероятность рождения e^-e^+ пар в симметричных столкновениях с $Z_A = Z_B = 96$ как функция R_{\min} и $\eta = E/E_0$.

обусловлена разными значениями критического заряда, при котором состояния $1s$ и $2p_{1/2}$ достигают границы отрицательно-энергетического континуума. Например, для $R_{\min} = 17.5$ фм это происходит при $Z_{\text{cr}}^{1s}/2 \approx 87.5$ для состояния $1s$ и при $Z_{\text{cr}}^{2p_{1/2}}/2 \approx 95$ для состояния $2p_{1/2}$.

На рисунке 9 показана зависимость вероятности рождения пар от R_{\min} и η для симметричных столкновений с $Z_A = Z_B = 96$. Как и на Рис. 7, где было зафиксировано расстояние наибольшего сближения, здесь мы видим, что уменьшение вероятности при $\eta \rightarrow 1$, характерное для динамического механизма, сменяется увеличением, когда R_{\min} становится достаточно меньше критического расстояния $R_{\text{cr}} \approx 48$ фм.

Важной характеристикой, которая более наглядно отражает тенденцию вероятности рождения пар к изменению своего поведения в сверхкритической области, является производная $dP/d\eta$ от вероятности по параметру η . На рисунке 10 представлена производная $dP/d\eta$ в зависимости от заряда ядра $Z = Z_A = Z_B$ и расстояния наибольшего сближения R_{\min} . Существует однозначное соответствие между параметром η и углом рассеяния θ , заданное уравнениями (3.4) и (3.7). Данные, приведенные на Рис. 10, соответствуют углам рассеяния $\theta = 60^\circ, 180^\circ$. Черная сплошная линия очерчивает границу сверхкритической области параметров столкновения, расположенную в правом нижнем углу. Она задаётся решением уравнения $\varepsilon_{1s}(Z_A, Z_B, R_{\min}) = -mc^2$. В соответствии с вышеизложенным, в докритической области производная $dP/d\eta$ положительна и,

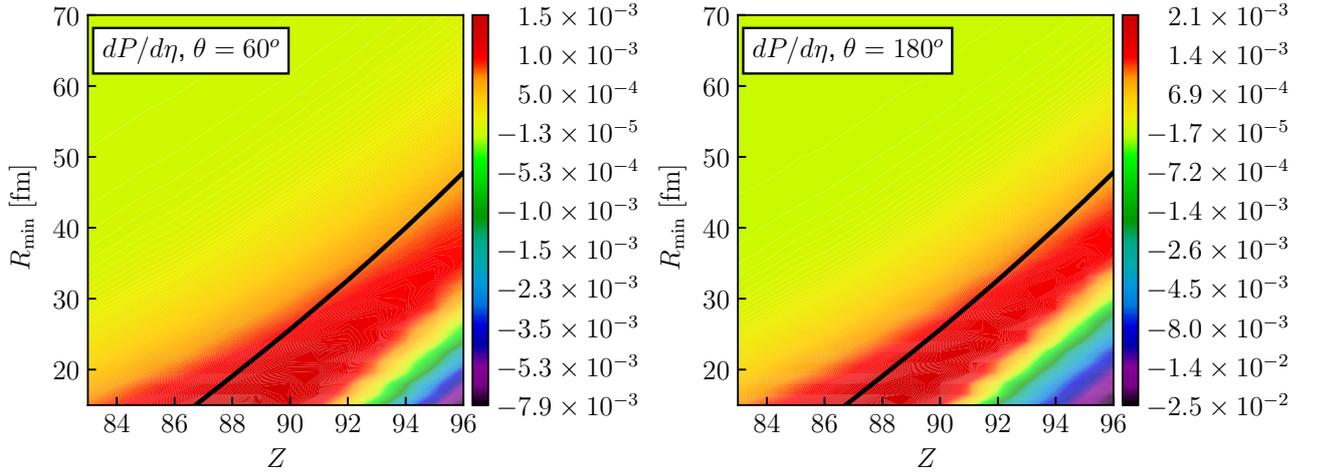


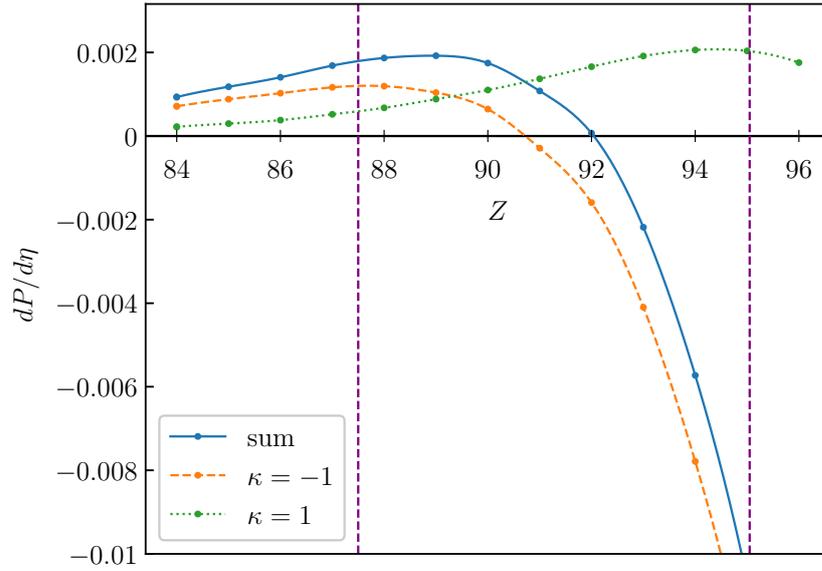
Рис. 10: Производная вероятности рождения e^-e^+ пар $dP/d\eta$ как функция $Z = Z_A = Z_B$ и R_{\min} . Черная сплошная кривая очерчивает границу сверхкритической области параметров столкновения.

кроме того, увеличивается при движении в направлении большего Z и меньшего R_{\min} . Однако после пересечения границы сверхкритической области рост $dP/d\eta$ сменяется уменьшением, и когда точка (Z, R_{\min}) находится достаточно глубоко в этой области, производная становится отрицательной.

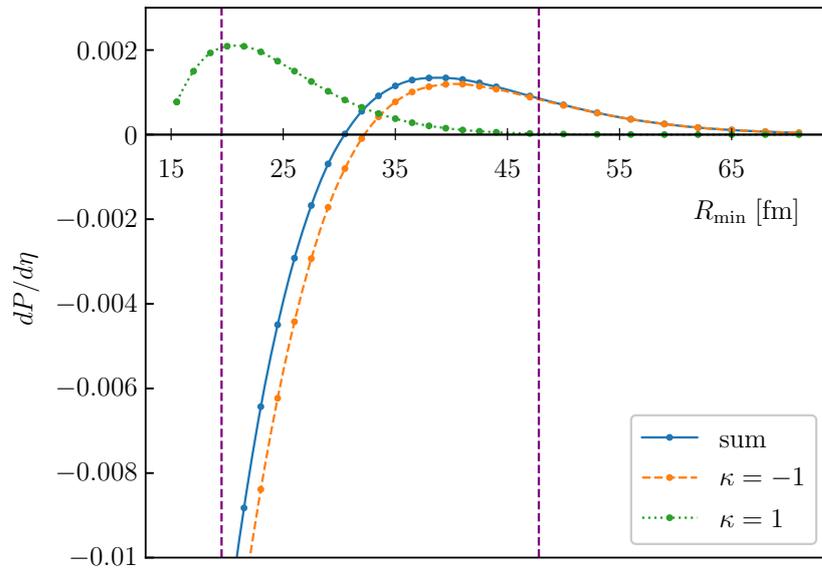
Отдельные вклады s ($\kappa = -1$) и $p_{1/2}$ ($\kappa = 1$) состояний в $dP/d\eta$ показаны на Рис. 11. На рисунке 11a эти вклады представлены как функции заряда ядер $Z = Z_A = Z_B$ при $R_{\min} = 17.5$ фм. Рисунок 11b изображает их как функции расстояния наибольшего сближения R_{\min} для $Z_A = Z_B = 96$. Оба графика ясно показывают, что поведение вклада претерпевает существенные изменения, как только соответствующее низшее состояние достигает границы отрицательно-энергетического континуума.

4.3.2 Энергетические спектры позитронов

Изучив зависимость вероятности рождения пар от параметра $\eta = E/E_0$, которая продемонстрировала значительное изменение в сверхкритической области параметров столкновений, мы исследовали η -зависимость энергетических спектров позитронов, образующихся в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер. На рисунке 12 представлены энергетические спектры позитронов, полученные для симметричных столкновений с $Z = Z_A = Z_B = 83 - 96$, $R_{\min} = 17.5$ фм и $\eta = 1, 1.1, 1.2$. Индивидуальные вклады s ($\kappa = -1$) и $p_{1/2}$ ($\kappa = 1$) состояний в спектры позитронов приведены на Рис. 13 и 14, со-



(a)



(b)

Рис. 11: Производная вероятности рождения e^-e^+ пар $dP/d\eta$ при $\eta = 1$ ($\theta = 180^\circ$) как функция: а) Z при $R_{\min} = 17.5$ фм, б) R_{\min} для $Z = 96$. Вертикальными линиями отмечены значения абсцисс, при которых энергии состояний $1s$ и $2p_{1/2}$ равны $-mc^2$. На верхней панели уровню $1s$ соответствует левая прямая, уровню $2p_{1/2}$ — правая. На нижней панели наоборот уровню $1s$ соответствует правая прямая, уровню $2p_{1/2}$ — левая.

ответственно. Как уже было сказано выше, эти каналы практически полностью определяют полную вероятность рождения пар. В случае $R_{\min} = 17.5$ фм сверхкритический режим начинается при $Z \approx 87.5$ для состояния $1s$ и при $Z \approx 95$ для состояния $2p_{1/2}$. На рисунках 13 и 14 показано существенное изменение η -зависимости позитронных спектров, как только соответствующий канал

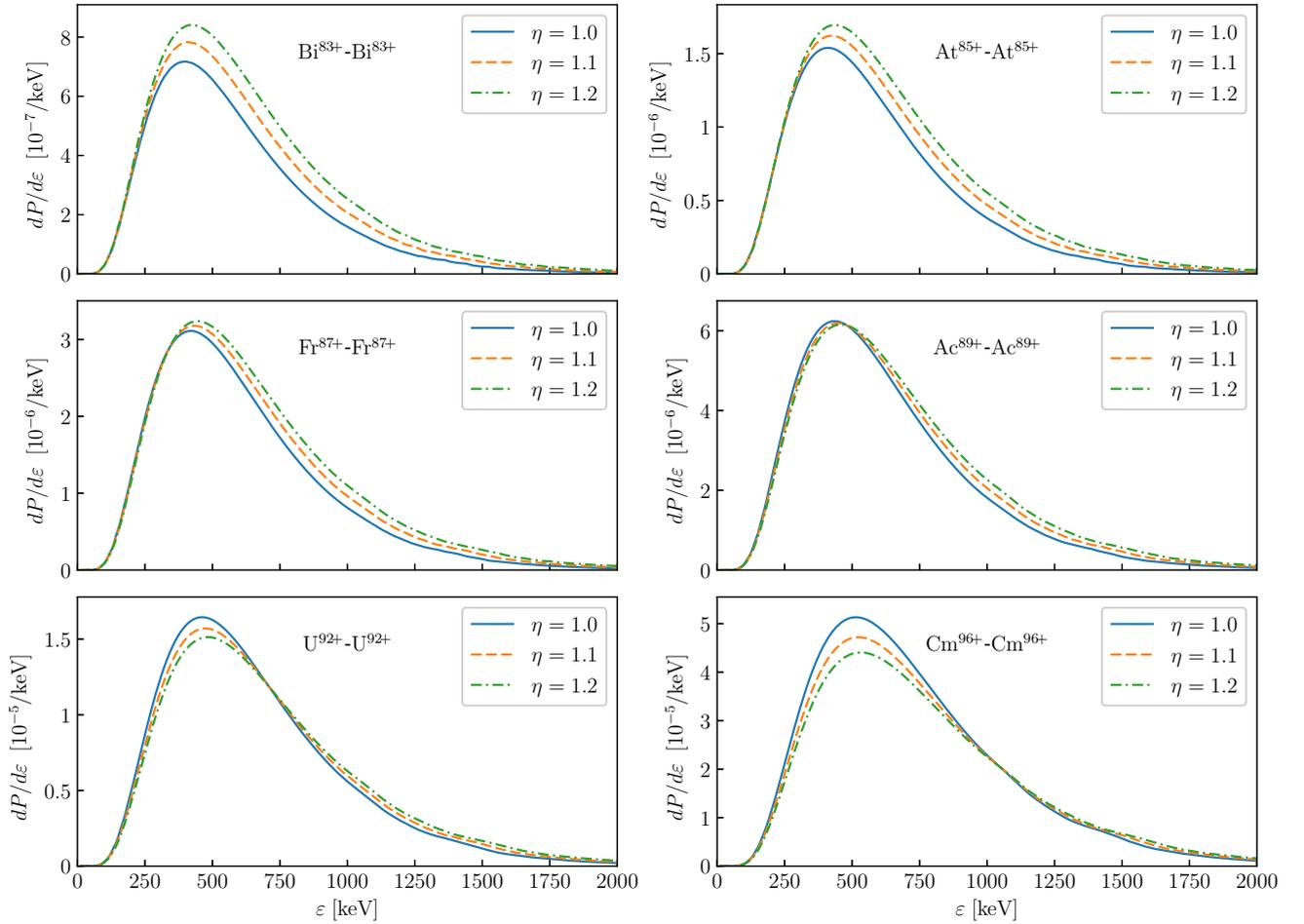


Рис. 12: Энергетические спектры позитронов, образующихся в симметричных столкновениях с $R_{\min} = 17.5$ фм.

становится сверхкритическим. А именно, для докритических значений заряда кривые, полученные для бóльших значений η , расположены над кривыми, соответствующими меньшим значениям η . Однако, как только заряд ядер превышает критическое значение, относительное положение кривых вблизи пика меняется на противоположное, и спектры, рассчитанные для бóльших η начинают располагаться ниже спектров для меньших η . Расположение же хвостов остается неизменным. Полные спектры, изображенные на Рис. 12, с основным вкладом, вносимым s состояниями, довольно точно соответствуют поведению, показанному на Рис. 13. Возможным объяснением того изменения может быть следующее. Спонтанное рождение пар, активное в сверхкритическом режиме, монотонно зависит от времени, которое связанное состояние проводит в отрицательно-энергетическом континууме в виде резонанса. Следовательно, оно более выражено при меньших значениях η (см. Рис. 5). Кроме того, энергии позитронов, образующихся в результате распада сверхкритического резо-

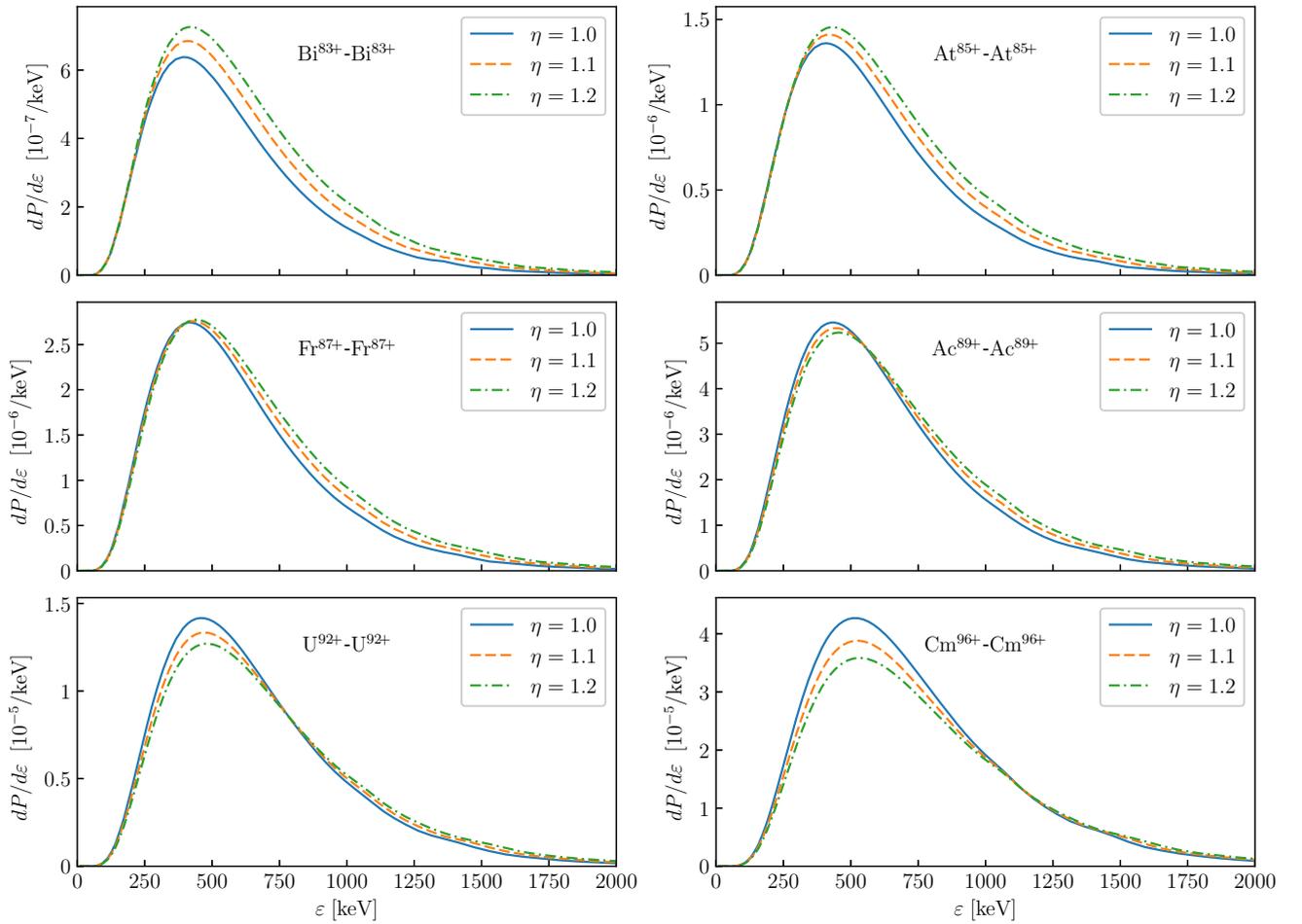


Рис. 13: Вклад s ($\kappa = -1$) состояний в спектры позитронов для симметричных столкновений с $R_{\min} = 17.5$ фм.

нанса, ограничены определенной областью. Например, в случае столкновений $U^{92+}-U^{92+}$ энергия спонтанных позитронов в основном должна не превышать предела в 600 кэВ. Действительно, давайте сначала рассмотрим гипотетическое адиабатически медленное столкновение, когда переходами, вызванными временной зависимостью потенциала ядер, можно пренебречь. В таком сценарии позитроны рождаются исключительно за счет спонтанного механизма, и их энергетическое распределение определяется положением $\varepsilon^{\text{res}}(R(t))$ и шириной $\Gamma^{\text{res}}(R(t))$ сверхкритического резонанса как сложных функций времени, $R(t)$ — это межъядерное расстояние. Качественное поведение позитронного спектра в таком случае показано, например, на Рис. 4 в работе [15]. Как энергия, так и ширина сверхкритического резонанса монотонно растут с уменьшением R . Согласно работам [46, 47], положение резонанса для двух ядер урана с $R = 16$ фм соответствует пиковой энергии испускаемых позитронов около 300 кэВ при естественной ширине менее 2 кэВ. Конечная продолжительность сверхкритического

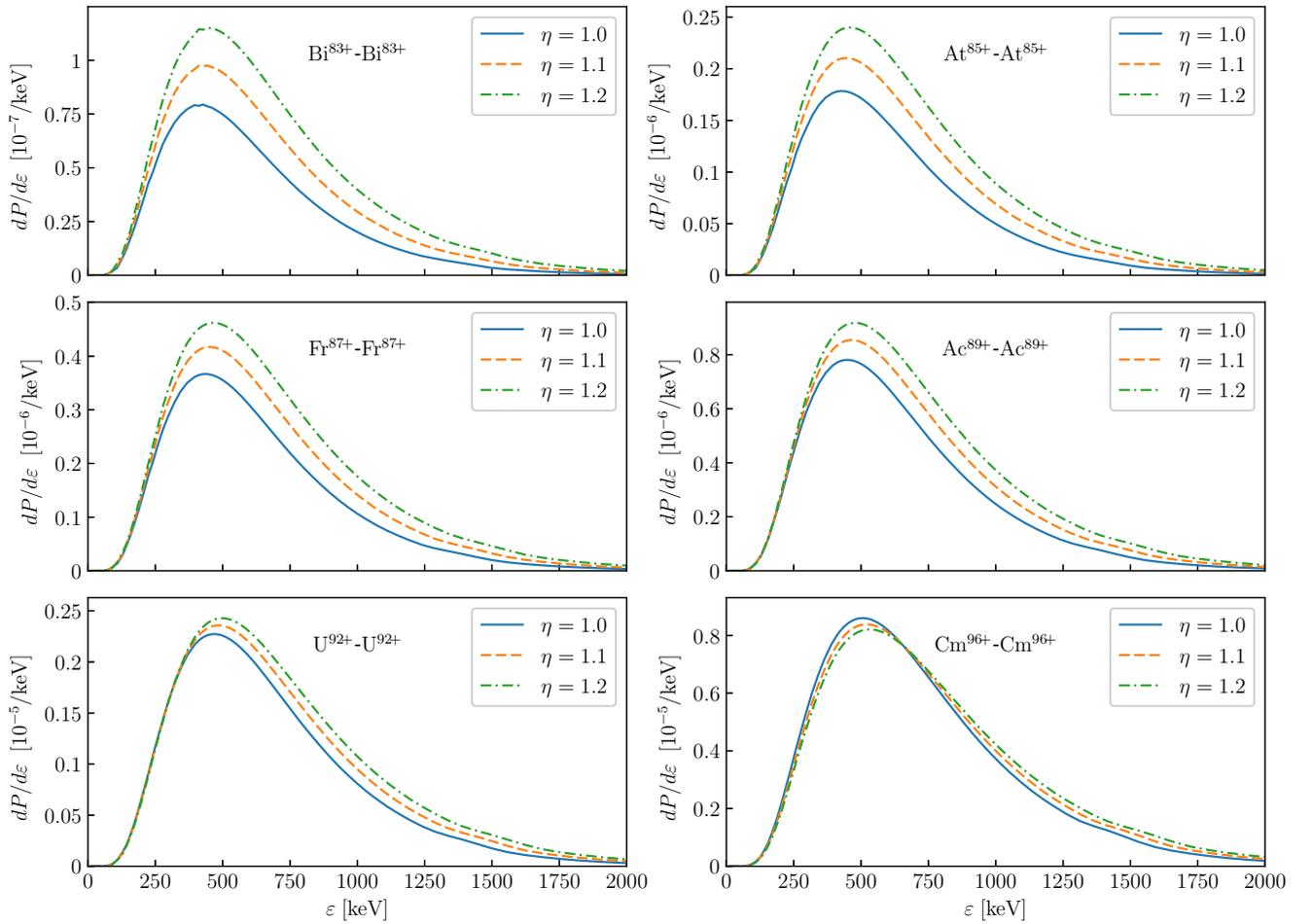


Рис. 14: Вклад $p_{1/2}$ ($\kappa = 1$) состояний в спектры позитронов для симметричных столкновений с $R_{\min} = 17.5$ фм.

режима, τ_{cr} , в реальных столкновениях приводит к появлению дополнительной ширины, которая значительно превышает естественную. Эта дополнительная ширина может быть приблизительно оценена с помощью принципа неопределенности $\Gamma_{dyn} \sim \hbar/\tau_{cr}$ и при $\tau_{cr} \sim 2 \times 10^{-21}$ с (см. Рис. 5) составляет $\Gamma_{dyn} \sim 300$ кэВ. Таким образом, энергия спонтанных позитронов сосредоточена интервале от 0 до 600 кэВ. Основным следствием такого большого значения динамической ширины является отсутствие узких резонансных структур в спектрах. Вместе с интерференцией между спонтанным и динамическим механизмами это делает переход к сверхкритическому режиму плавным. Несмотря на этот факт, качественные изменения в спектрах позитронов, особенно при сравнении докритических столкновений $Bi^{83+}-Bi^{83+}$ и сверхкритических столкновений $Cm^{96+}-Cm^{96+}$, следует рассматривать как однозначное свидетельство достижения сверхкритического режима. Это утверждение также подтверждается спектрами позитронов, полученными для лобовых столкновений $U^{92+}-U^{92+}$ с различными R_{\min} ,

показанными на Рис. 15. Как и в случае с фиксированным R_{\min} и изменяющимся Z , такое же изменение позитронных спектров происходит, когда R_{\min} опускается ниже критического значения $R_{\text{cr}} = 32.7$ фм.

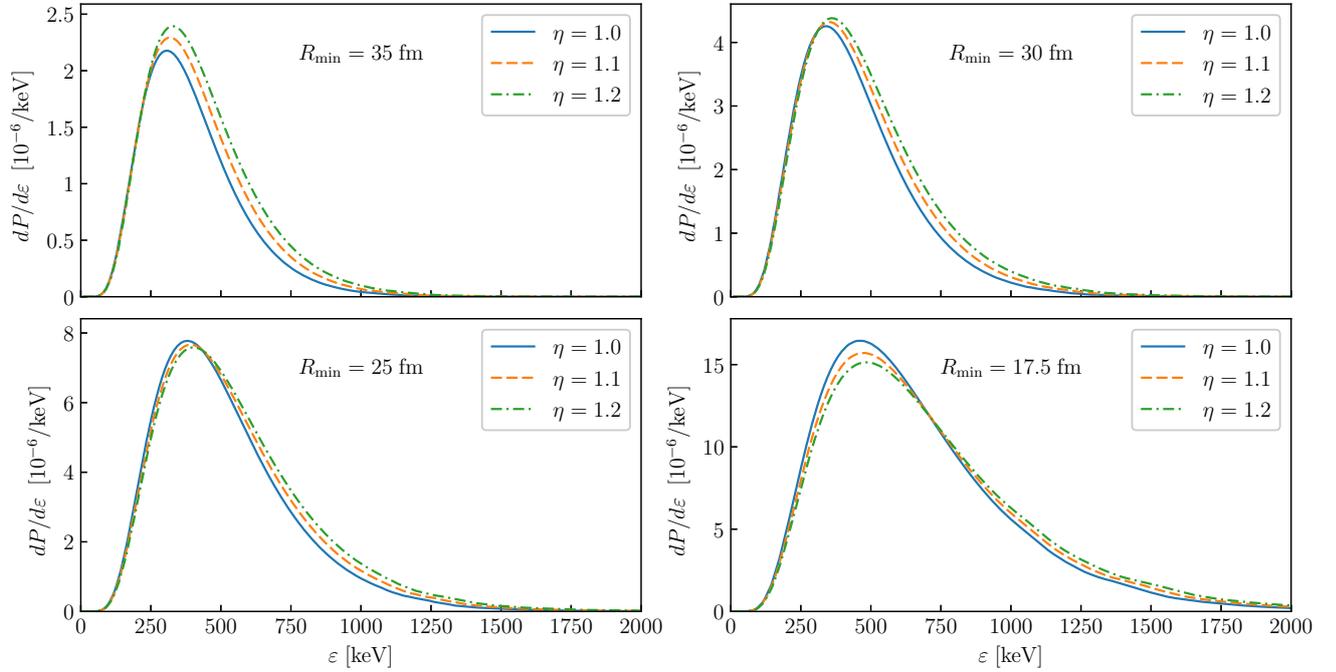


Рис. 15: Энергетические спектры позитронов, образующихся в симметричных столкновениях с $Z = Z_A = Z_B = 92$.

Глядя на Рис. 12–15, можно заметить, что изменения в позитронных спектрах, связанные с переходом в сверхкритический режим, в основном сосредоточены в области вблизи максимума и слева от него. Эта область соответствует области энергии, в которой происходит спонтанное рождение пар. Этим обстоятельством можно воспользоваться для улучшения количественной характеристики перехода к сверхкритическому режиму. Вероятность P в $dP/d\eta$ представляет собой интеграл от дифференциальной вероятности $dP/d\varepsilon$ по всему диапазону энергий позитронов

$$P = \int_0^{\infty} \frac{dP}{d\varepsilon} d\varepsilon. \quad (4.38)$$

Сосредоточившись только на энергетическом интервале, куда может вносить вклад спонтанный механизм, можно построить характеристику более чувствительную к сверхкритическому переходу по сравнению с $dP/d\eta$. С этой целью мы вводим частичную вероятность P_x , определяемую как вероятность рожде-

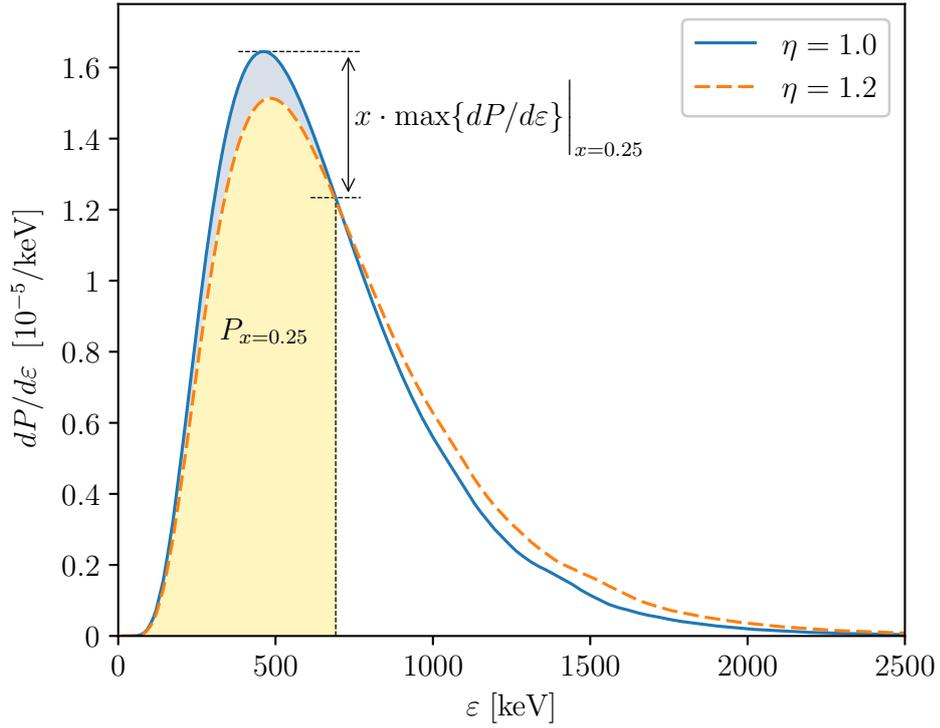


Рис. 16: Определение частичной вероятности рождения пар P_x .

ния электрон-позитронных пар с энергией позитрона в интервале $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon(x)$,

$$P_x = \int_0^{\varepsilon(x)} \frac{dP}{d\varepsilon} d\varepsilon, \quad x \in [0, 1]. \quad (4.39)$$

Здесь $\varepsilon(x)$ — это бóльшая из двух энергий позитронов, для которых дифференциальная вероятность, рассчитанная для лобового столкновения ($\eta = 1$), составляет $(1 - x)$ часть ее пикового значения, т.е. $dP/d\varepsilon|_{\varepsilon=\varepsilon(x)} = (1 - x) \max \{dP/d\varepsilon\}$. Визуальное представление этого определения P_x можно найти на Рис. 16. Согласно определению, при $x = 0$ энергия $\varepsilon(x)$ совпадает с положением пика в спектрах для лобовых столкновений. Случай $x = 1$ соответствует энергии $\varepsilon(x)$, для которой дифференциальная вероятность равна нулю. Это происходит на бесконечности, что означает, что при $x = 1$ мы возвращаемся к полной вероятности, т.е. $P_1 = P$. Параметр x следует выбирать таким образом, чтобы охватывать область шириной Γ_{dyn} вокруг положения сверхкритического резонанса. Как обсуждалось выше, для столкновений $U^{92+}-U^{92+}$ эта область простирается от 0 до 600 кэВ. Таким образом, разумно положить $x \gtrsim 0.1$, учитывая по меньшей мере около 50% от полной вероятности рождения пар.

На Рис. 17 представлена производная $d \ln P_x / d\eta$ при $x = 0.1, 0.25, 0.5, 1.0$, вычисленная для симметричных лобовых столкновений ($\eta = 1$). На рисунке

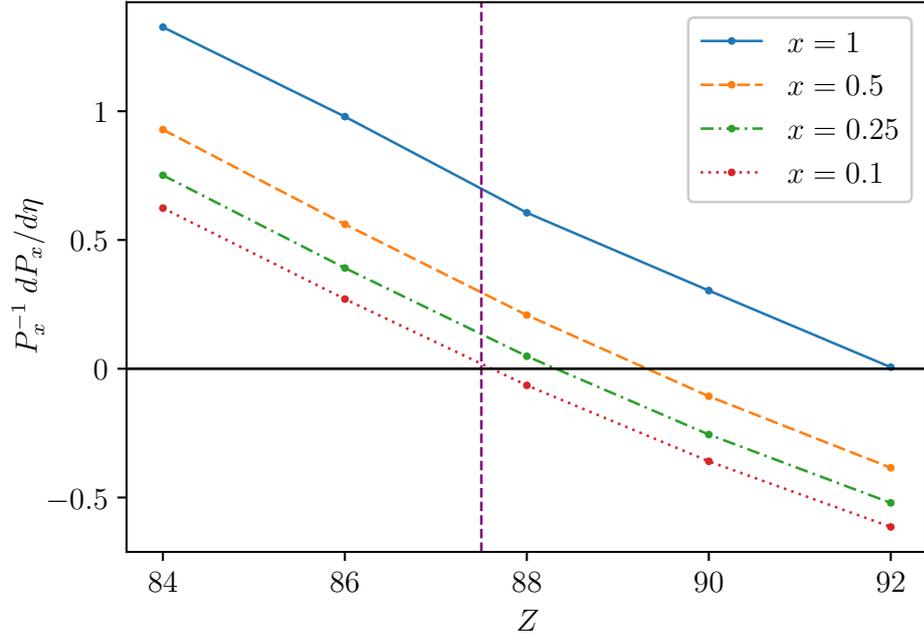


Рис. 17: Производная $d \ln P_x / d\eta$ в точке $\eta = 1$, полученная для различных x в симметричных столкновениях с $R_{\min} = 17.5$ фм. Вертикальная линия, проходящая через точку $Z \approx 87.5$ отмечает границу сверхкритической области.

показано, что применение P_x заметно усиливает признак перехода к сверхкритическому режиму, а именно изменение знака производной $dP_x/d\eta$ (и, следовательно, $d \ln P_x/d\eta$) с положительного на отрицательный. Например, в случае столкновений $U^{92+}-U^{92+}$ $d \ln P_x/d\eta|_{\eta=1}$ приблизительно равна -0.6 при $x = 0.1$, -0.5 при $x = 0.25$ и -0.4 при $x = 0.5$, тогда как производная от общей вероятности ($x = 1$) почти равна нулю. Усиление также видно на Рис. 18, где изображено отношение $P_x(\eta)/P_x(1)$ как функция заряда ядер Z для фиксированного R_{\min} (Рис. 18a) и расстояния наибольшего сближения R_{\min} для $U^{92+}-U^{92+}$ (Рис. 18b). Здесь переход к сверхкритическому режиму проявляется в переходе отношения $P_x(\eta)/P_x(1)$ через единицу в сторону меньших значений. Как видно из рисунка, для $x = 0.5, 0.25$ и 0.1 этот переход происходит при последовательно меньших значениях Z , когда R_{\min} фиксирован, и бóльших R_{\min} , когда фиксируется Z .

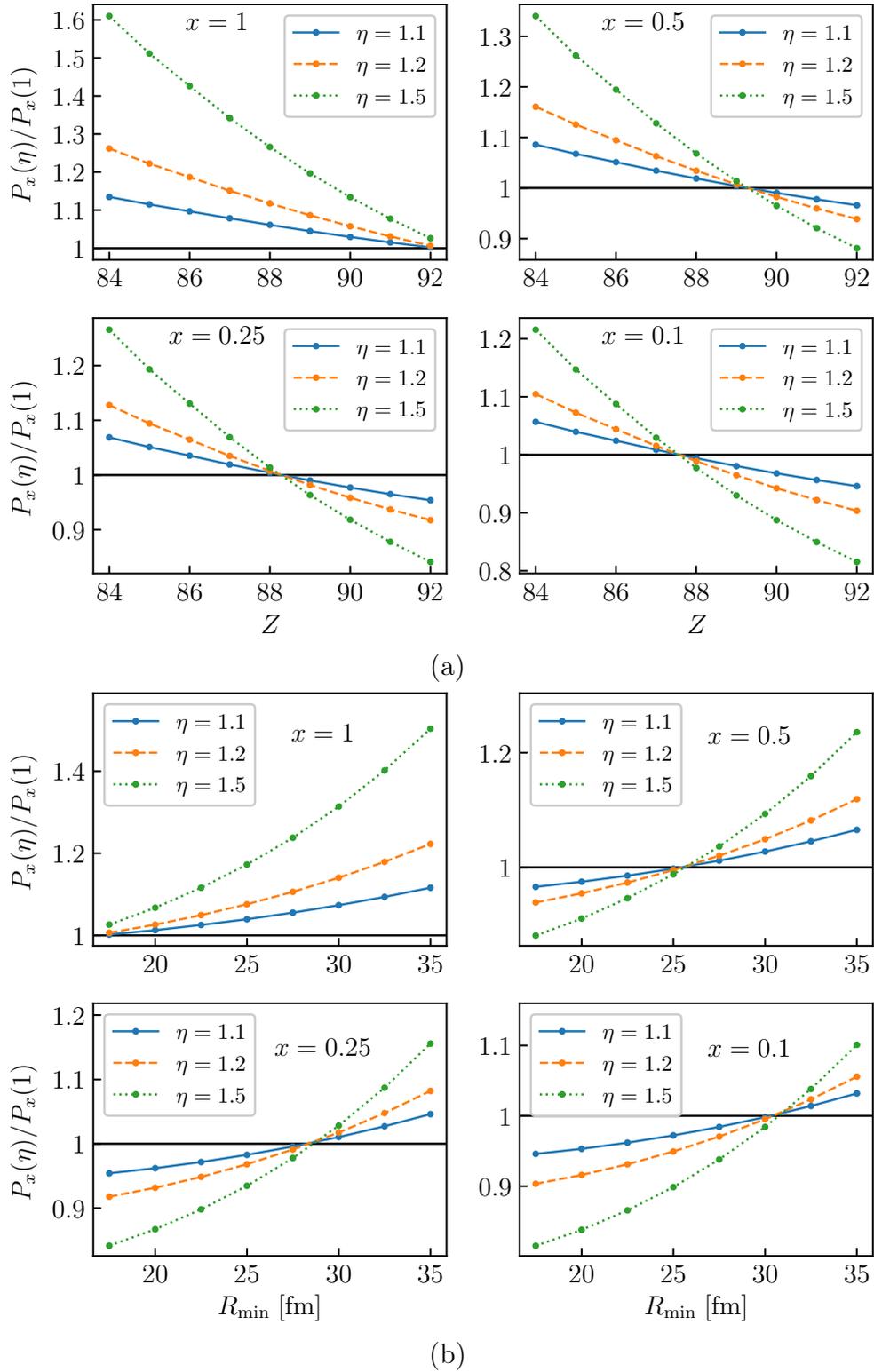


Рис. 18: Отношение $P_x(\eta)/P_x(1)$ для $\eta = 1.1, 1.2$ и 1.5 как функция: а) Z при $R_{\min} = 17.5$ фм, б) R_{\min} для $Z = 92$.

Глава 5. Расчёты за рамками монопольного приближения

В этой главе мы рассмотрим процесс рождения электрон-позитронных пар в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер за рамки монопольного приближения. Для этого мы используем мультипольное разложение двухцентрового потенциала ядер по сферическим гармоникам в системе центра масс. Мы начнём с описания процедуры, используемой для решения стационарного уравнения Дирака для аксиально-симметричных потенциалов. Эта процедура необходима для задания начальных/конечных условий для зависящих от времени волновых функций. После этого мы перейдем к изложению алгоритма решения нестационарного уравнения Дирака. Наконец, мы представим и обсудим результаты расчетов вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов. Мы изучим их сходимость по числу членов в мультипольном разложении потенциала ядер и исследуем влияние членов с $L > 0$ на признаки перехода к сверхкритическому режиму, обнаруженные в монопольном приближении. Результаты исследования, описанные в настоящей главе, были опубликованы в работах [56, 62].

5.1 Стационарное уравнение Дирака

Выход за рамки монопольного приближения означает потерю сферической симметрии, которая существенно упрощала вычисления, описанные в предыдущей главе. Теперь, если мы хотим продолжить вычисления, работая с одноцентровым базисом, последний должен содержать функции, которые по-разному преобразуются при трехмерных поворотах. Это влечет за собой резкое увеличение базисного набора, что приводит к увеличению объема необходимых вычислительных ресурсов и существенному росту времени расчетов. Особенно это касается процедуры временной эволюции, в которой на каждом временном шаге, которых могут быть десятки тысяч, необходимо решать систему линейных уравнений. К счастью, сложность задачи может быть в значительной степени уменьшена путем перехода к системе отсчета с осью z , направленной вдоль межъядерной оси и вращающейся вместе с ней. Этот переход сам по себе не является приближением, но приводит к появлению в гамильтониане нового члена,

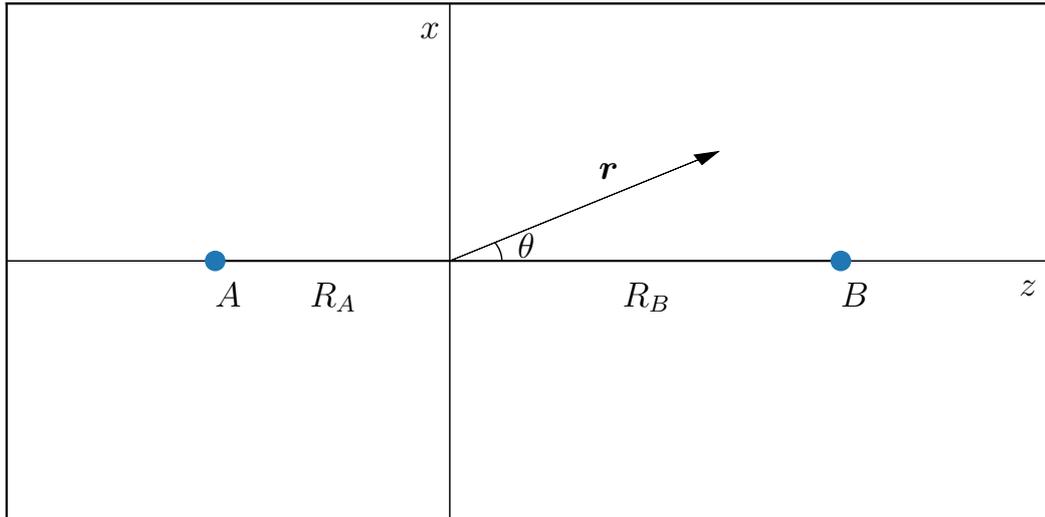


Рис. 19: Квазимолекулярная система отсчёта для общего случая ядер с разными массами.

называемого вращательной связью. Однако, пренебрегая этим членом, можно получить симметрию относительно поворотов вокруг оси z . Таким образом, функции с различными z -проекциями полного углового момента, обозначаемыми символом μ , разделяются, и их вклад в рассматриваемый процесс может быть вычислен независимо. Ограничение базисного набора одним значением μ позволяет заметно уменьшить его размер и, следовательно, значительно упростить вычисления.

Стационарное уравнение Дирака, записанное в системе отсчета с осью z , направленной вдоль межъядерной оси, имеет вид

$$H_0\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

$$H_0 = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\beta + V(r, \theta). \quad (5.2)$$

Здесь $\boldsymbol{\alpha}$, β — матрицы Дирака, m — масса электрона, $V(r, \theta)$ — функция потенциала, $r = |\mathbf{r}|$ и θ — полярный угол, т.е. угол между \mathbf{r} и осью z (см. Рис. 19). В монопольном приближении потенциал V обладал сферической симметрией и был функцией единственного аргумента r (см. уравнение (4.12)). Теперь симметрия понижается до цилиндрической, и потенциал приобретает дополнительную зависимость от полярного угла θ . Используя полный набор ортогональных полиномов Лежандра $\{P_L(x)\}_{L=0}^{\infty}$, двухцентровый потенциал ядер может быть

выражен в виде бесконечной суммы

$$V(r, \theta) = \sum_{\alpha=A,B} \sum_{L=0}^{\infty} V_L^\alpha(r, R_\alpha(t_{\text{in}})) \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} P_L(\cos \theta), \quad (5.3)$$

где

$$V_L^\alpha(r, R_\alpha(t)) = \int_0^\pi d\theta \sin \theta P_L(\cos \theta) V_\alpha(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha(t)|). \quad (5.4)$$

Для практических расчетов удобно переписать разложение (5.3) в терминах сферических гармоник $Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}})$ ($\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$):

$$V(r, \theta) = \sum_{L=0}^{\infty} V_L(r, t_{\text{in}}) Y_{L0}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (5.5)$$

$$V_L(r, t) = V_L^A(r, R_A(t)) + V_L^B(r, R_B(t)). \quad (5.6)$$

Это выражение может быть легко получено из (5.3), посредством использования следующих свойств сферических функций (см., например, [71])

$$\sum_{M=-L}^L Y_{LM}(\mathbf{n}_1) Y_{LM}^*(\mathbf{n}_2) = \frac{2L+1}{4\pi} P_L(\cos \theta_{12}), \quad (5.7)$$

$$Y_{LM}^*(\mathbf{n}) = \delta_{M0} \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} \text{ для } \mathbf{n} \text{ параллельного оси } z, \quad (5.8)$$

где θ_{12} — это угол между векторами \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 . В нашем случае $\mathbf{n}_1 = \hat{\mathbf{r}}$, $\mathbf{n}_2 = \mathbf{e}_z$ — z -орт и $\theta_{12} = \theta$.

Как и прежде, волновая функция с определенной проекцией углового момента μ аппроксимируется конечной суммой

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\kappa} \sum_{j=1}^{2n} c_j^{\kappa\mu} u_j^{\kappa\mu}(\mathbf{r}). \quad (5.9)$$

В отличие от монопольного выражения (4.17), эта сумма является двукратной, поскольку κ больше не является хорошим квантовым числом. Базисные функции $u_j^{\kappa\mu}(\mathbf{r})$ имеют вид биспиноров, радиальная часть которых представлена В-сплайнами в соответствии с методом дуального кинетического баланса

(DKB) [76]. Их угловая часть описывается сферическими спинорами. Каждый набор $u_j^{\kappa\mu}$, относящийся к определенному κ , состоит из двух поднаборов. Первый поднабор с $1 \leq j \leq n$ определяется как

$$u_j^{\kappa\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} B_j(r)\Omega_{\kappa\mu}(\hat{\mathbf{r}}) \\ \frac{1}{2m} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) B_j(r)\Omega_{-\kappa\mu}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

и второй с $n < j \leq 2n$ имеет вид

$$u_j^{\kappa\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \frac{1}{2m} \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) B_{j-n}(r)\Omega_{\kappa\mu}(\hat{\mathbf{r}}) \\ B_{j-n}(r)\Omega_{-\kappa\mu}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Здесь $B_j(r)$ — это j -й В-сплайн [75], $\Omega_{\kappa\mu}(\hat{\mathbf{r}})$ — сферический спинор [71]. Такой выбор базисных функций особенно выгоден в случае симметричных столкновений, когда нечетные гармоники в мультипольном расширении двухцентрового потенциала (5.5) сокращаются в системе центра масс. Таким образом, состояния с противоположной пространственной четностью разделяются, что вдвое уменьшает размер матриц, описывающих дискретизированные версии стационарного и нестационарного уравнений Дирака (см. ниже), значительно облегчая вычисления.

Давайте перейдем от мультииндекса $\kappa\mu j$ к одному индексу l , перенумеровав от 1 до N все базисные функции, присутствующие в (5.9). Затем, подставив разложение (5.9) в уравнение (5.1), умножив его на $u_l(\mathbf{r})$ слева и выполнив пространственное интегрирование, получаем дискретизированную версию стационарного уравнения Дирака в следующем виде

$$H\mathbf{c} = \varepsilon S\mathbf{c}, \quad (5.12)$$

где $H_{jk} = \langle u_j | H_0 | u_k \rangle$ — матрица гамильтониана, $S_{jk} = \langle u_j | u_k \rangle$ — матрица перекрытия, а $\mathbf{c} = \{c_1, \dots, c_N\}$. Решив задачу (5.12), получим набор собственных значений ε_i и собственных векторов \mathbf{c}_i ($i = 1, \dots, N$), которые представляют дискретизированную версию спектра H_0 . При вычислении матрицы H_{jk} удобно

разделить H_0 на две части

$$H_0 = h^{\text{free}} + V, \quad (5.13)$$

где h^{free} дираковский гамильтониан сводной частицы

$$h^{\text{free}} = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m\beta, \quad (5.14)$$

а V — двухцентровый потенциал. Элементы матрицы h^{free} являются диагональными по отношению к κ и уже рассматривались в предыдущей главе (см., например, уравнение (4.16)). Матрица V_{jk} имеет более сложную структуру. Ее элементы могут быть записаны в виде

$$V_{jk} = \sum_L g^{L0}(\kappa_j \mu_j, \kappa_k \mu_k) \int dr V_L(r, t_{\text{in}}) [F_j(r)F_k(r) + G_j(r)G_k(r)], \quad (5.15)$$

где функции $G_j(r)/F_j(r)$ являются верхними/нижними радиальными компонентами базисных функций $u_j(\mathbf{r})$, умноженными на r (см. определение в уравнении (4.13) и (5.10)–(5.11)). Угловые коэффициенты $g^{LM}(\kappa_j \mu_j, \kappa_k \mu_k)$ определяются как

$$\begin{aligned} g^{LM}(\kappa_j \mu_j, \kappa_k \mu_k) &= \int d\mathbf{n} \Omega_{\kappa_j, \mu_j}^\dagger(\mathbf{n}) Y_{LM}(\mathbf{n}) \Omega_{\kappa_k, \mu_k}(\mathbf{n}) \\ &= (-1)^{\frac{1}{2} + \mu_j} \sqrt{\frac{(2l_j + 1)(2l_k + 1)(2j_j + 1)(2j_k + 1)}{4\pi(2L + 1)}} C_{l_j 0, l_k 0}^{L0} C_{j_j \mu_j, j_k - \mu_k}^{LM} \begin{Bmatrix} j_j & l_j & \frac{1}{2} \\ l_k & j_k & L \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Здесь $C_{j_1 \mu_1, j_2 \mu_2}^{LM}$ — коэффициенты Клебша-Гордана, а квантовые числа l и j связаны с κ посредством выражений

$$l = \left| \kappa + \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}, \quad (5.17)$$

$$j = |\kappa| - \frac{1}{2}. \quad (5.18)$$

Используя соотношение

$$C_{l_1 0, l_2 0}^{L 0} \begin{Bmatrix} j_1 & l_1 & \frac{1}{2} \\ l_2 & j_2 & L \end{Bmatrix} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}} C_{j_1-\frac{1}{2}, j_2\frac{1}{2}}^{L 0}, & \text{если } l_1 + l_2 + L \text{ четное,} \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (5.19)$$

выражение (5.16) можно упростить и записать в виде

$$g^{LM}(\kappa_j \mu_j, \kappa_k \mu_k) = (-1)^{\frac{1}{2} + \mu_j} \sqrt{\frac{(2j_j + 1)(2j_k + 1)}{4\pi(2L + 1)}} C_{j_j-\frac{1}{2}, j_k\frac{1}{2}}^{L 0} C_{j_j \mu_j, j_k - \mu_k}^{LM}. \quad (5.20)$$

Согласно свойствам коэффициентов Клебша-Гордана, $g^{LM}(\kappa_1 \mu_1, \kappa_2 \mu_2)$ имеют ненулевые значения только для $L = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$ с четными $l_1 + l_2 + L$ и $M = \mu_1 - \mu_2$. Следовательно, для любой заданной пары базисных функций $u_j(\mathbf{r})$ и $u_k(\mathbf{r})$ сумма по L в уравнении (5.15) будет содержать конечное число слагаемых.

5.2 Нестационарное уравнение Дирака

Зависящая от времени волновая функция представлена суммой, аналогичной показанной в уравнении (5.9), но с коэффициентами, зависящими от времени

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N a_i(t) u_i(\mathbf{r}). \quad (5.21)$$

При использовании стационарного базисного набора, состоящего из неортогональных функций, нестационарное уравнение Дирака с определенными начальными условиями,

$$\begin{cases} i\partial_t \varphi_i(\mathbf{r}, t) = H(t) \varphi_i(\mathbf{r}, t), \\ \varphi_i(\mathbf{r}, t_{\text{in}}) = \phi_i(\mathbf{r}), \end{cases} \quad (5.22)$$

преобразуется в следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} iS \frac{\partial \mathbf{a}_i(t)}{\partial t} = H(t) \mathbf{a}_i(t), \\ \mathbf{a}_i(t_{\text{in}}) = \mathbf{c}_i. \end{cases} \quad (5.23)$$

Здесь $\mathbf{a}_i = \{a_{1i}, \dots, a_{Ni}\}$ обозначает массив коэффициентов разложения, \mathbf{c}_i — это i -е решение системы (5.12), соответствующее энергии ε_i , $H_{jk}(t) = \langle u_j | H(t) | u_k \rangle$ — матрица гамильтониана, а $S_{jk} = \langle u_j | u_k \rangle$ — матрица перекрытия. Для решения этой системы, мы снова используем схему Кранка-Николсон [53, 77]. На этот раз, из-за неортогональности базисных функций, матрица перекрытия S появляется в соотношении между коэффициентами разложения $\mathbf{a}_i(t)$ для соседних шагов по времени (см. уравнение (4.36))

$$\left[S + \frac{i\Delta t}{2} H(t + \Delta t/2) \right] \mathbf{a}_i(t + \Delta t) = \left[S - \frac{i\Delta t}{2} H(t + \Delta t/2) \right] \mathbf{a}_i(t). \quad (5.24)$$

После нахождения массива коэффициентов разложения, соответствующих волновой функции в момент времени t_{out} , амплитуды переходов $G(\zeta|\xi)$ вычисляются как

$$G(\zeta|\xi)_{ji} = \langle \phi_j | \varphi_i(t_{\text{out}}) \rangle = \mathbf{c}_j^\dagger S \mathbf{a}_i(t_{\text{out}}). \quad (5.25)$$

Здесь ζ и ξ соответствуют знакам энергии j -го out-состояния и i -го in-состояния. Наконец, среднее число электронов и позитронов, созданных из вакуума в определенном состоянии, находится в соответствии с уравнениями (2.45) и (2.46).

5.2.1 Приближение, не учитывающее вращение межъядерной оси

В монопольном приближении мы использовали сферическую симметрию задачи, что позволило нам значительно упростить численные расчеты. Это было достигнуто благодаря тому, что зависящий от времени потенциал в этом случае связывал только базисные функции с идентичными релятивистскими угловыми квантовыми числами κ и проекциями углового момента μ . Это позволило нам выполнять вычисления для любой разрешенной комбинации κ и μ по отдельности с относительно малоразмерными матрицами в дискретизирован-

ной версии нестационарного уравнения Дирака (см. уравнение (4.32)). Выходя за рамки монополярного приближения в задаче, зависящей от времени, мы теряем всякую симметрию, за исключением случая лобовых столкновений. Для столкновениях такого рода инерциальная система отсчета может быть выбрана таким образом, чтобы ее ось z была направлена вдоль межъядерной оси. Таким образом, мы имеем осевую симметрию и получаем возможность работать с базисными функциями, соответствующими различным значениям μ по отдельности. Расчеты для таких столкновений заметно сложнее по сравнению с монополярным приближением. В то же время они занимают значительно меньше времени, чем в общем случае, когда замешиваются функции с разными μ . Для столкновений с ненулевыми прицельными параметрами осевая симметрия может быть приближенно восстановлена если перейти во вращающуюся систему отсчета с осью z , направленной вдоль межъядерной оси. Но для этого необходимо выкинуть из рассмотрения дополнительные члены, появляющимися в гамильтониане из-за перехода в эту неинерциальной систему отсчета [63, 64]. Гамильтониан в этой системе отсчета может быть с хорошей точностью записан в виде

$$H(t) = h^{\text{free}} + V(\mathbf{r}, t) - \hat{\mathbf{J}} \cdot \boldsymbol{\omega}. \quad (5.26)$$

Здесь h^{free} — гамильтониан свободного электрона, определенный в уравнении (5.14), $V(\mathbf{r}, t)$ — зависящий от времени потенциал движущихся ядер, $\hat{\mathbf{J}}$ — оператор полного углового момента электрона, а $\boldsymbol{\omega}$ — вектор угловой скорости межъядерной оси. Есть основания полагать (см., например, работы [33, 65, 66]), что член $-\hat{\mathbf{J}} \cdot \boldsymbol{\omega}$ в гамильтониане (5.26) не может существенно повлиять на процесс рождения пар по сравнению с сильным потенциалом $V(\mathbf{r}, t)$. По этой причине его обычно исключают из рассмотрения. Пренебрегая вращательным членом, получаем аксиально-симметричный гамильтониан

$$H(t) = h^{\text{free}} + V(\mathbf{r}, t). \quad (5.27)$$

Вычисляя вклад каждого члена в правой части уравнения (5.27) независимо друг от друга, можно немного оптимизировать вычисление матрицы гамильтониана $H_{jk}(t)$. Поскольку h^{free} не зависит от времени, его матрица может быть вычислена только один раз при запуске программы, сохранена в оператив-

ной памяти и использована повторно при необходимости. С другой стороны, оставшаяся матрица $V(\mathbf{r}, t)$ должна быть вычислена на каждом межъядерном расстоянии $R(t_i + \Delta t_i/2)$, где i нумерует дискретные временные шаги и $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$. Использование сферических спиноров для описания угловой зависимости базисных функций позволяет нам вычислять угловую часть матричных элементов аналитически (см. уравнение (5.15)). Радиальное интегрирование выполняется численно. Будучи независимым от угловых переменных, h^{free} связывает только функции с одинаковой угловой симметрией. Следовательно, матрица $h_{jk}^{\text{free}} = \langle u_j | h^{\text{free}} | u_k \rangle$ является диагональной относительно квантовых чисел κ и μ . Структура матрицы $V_{jk}(t) = \langle u_j | V(\mathbf{r}, t) | u_k \rangle$ является более сложной. Она также диагональна по μ , но если количество членов в разложении (5.5) явно не ограничено, то функции с любыми значениями κ будут связаны, возможно, более чем одним членом.

Как было указано выше, корректное описание двухцентровой волновой функции в рамках одноцентрового базисного набора требует, чтобы последний содержал относительно большое количество функций, описывающих угловое движение. Таким образом, матрицы в уравнениях (5.23) и (5.24) могут достигать значительных размеров. В нашей численной процедуре радиальные интегралы потенциальной энергии, используемые для построения матрицы гамильтониана в определенный момент времени, вычисляются путем интерполяции интегралов, предварительно насчитанных для ряда точек вдоль ядерной траектории и сохраненных в массиве. Учитывая это, фактические вычисления с использованием достаточно больших базисных наборов потенциально могут потребовать значительного объема оперативной памяти. Использование В-сплайнов для работы с радиальной степенью свободы позволяет нам заметно уменьшить объем необходимой оперативной памяти. Это достигается благодаря сильной локализации В-сплайнов. А именно, В-сплайн j -го порядка имеет ненулевые значения не более чем в $j + 1$ последовательном интервале сетки. Следовательно, когда число узлов сетки велико по сравнению с порядком В-сплайнов, только небольшая часть сплайнов перекрывается, позволяя радиальным интегралам и соответствующим матричным элементам приобретать ненулевые значения. Еще одним преимуществом использования разреженных матриц в уравнении (5.24) является возможность применения алгоритмов, разработанных специально для работы с матрицами такого рода. Начиная с определен-

ного процента ненулевых элементов в матрицах, эти алгоритмы обеспечивают более высокую производительность по сравнению с аналогами, оперирующими с обычными плотными матрицами. В наших расчетах для решения систем линейных уравнений мы используем код PARDISO [78, 79].

5.2.2 Учет вращения межъядерной оси

Для того чтобы выяснить, в какой степени вращение межъядерной оси может влиять на вероятность рождения пар, мы выполнили расчеты с учётом этого вращения. Мы сделали это двумя различными способами. Первый метод аналогичен описанному в предыдущем разделе. Задача рассматривается во вращающейся системе отсчета, но на этот раз вращательный член сохраняется в гамильтониане. Во втором методе процесс столкновения рассматривается в инерциальной системе отсчета с началом координат, расположенным в центре масс. Гамильтонианом в таком случае становится зависящим от угла между межъядерной осью и осью z . Начнем с расчетов во вращающейся системе отсчета. Как было указано выше, в данном случае гамильтониан имеет вид

$$H(t) = h^{\text{free}} + V(\mathbf{r}, t) - \hat{\mathbf{J}} \cdot \boldsymbol{\omega}. \quad (5.28)$$

Первые два слагаемых уже были подробно рассмотрены в предыдущем разделе. Поэтому здесь мы сосредоточимся только на последнем. Предположим, что столкновение происходит в плоскости xz . Тогда вектор угловой скорости направлен вдоль оси y , то есть $\boldsymbol{\omega} = (0, \omega, 0)$, и скалярное произведение сводится к

$$-\hat{\mathbf{J}} \cdot \boldsymbol{\omega} = -\hat{J}_y \omega. \quad (5.29)$$

Оператор \hat{J}_y y -проекции полного углового момента электрона может быть выражен в терминах лестничных операторов \hat{J}_+/\hat{J}_- , которые повышают/понижают z -проекцию полного углового момента μ . Эти операторы определяются как

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \quad (5.30)$$

и действуют на собственные функции операторов \hat{J}^2 и \hat{J}_z , т.е. сферические спиноры $\Omega_{\kappa,\mu}(\mathbf{n})$ в случае электронов, согласно

$$\hat{J}_{\pm}\Omega_{\kappa,\mu}(\mathbf{n}) = \sqrt{(j \mp \mu)(j \pm \mu + 1)}\Omega_{\kappa,\mu \pm 1}(\mathbf{n}), \quad (5.31)$$

где j — квантовое число полного углового момента, связанное с κ посредством уравнения (5.18). Таким образом, вращательный член в (5.28) может быть записан как

$$-\hat{\mathbf{J}} \cdot \boldsymbol{\omega} = \frac{i\omega}{2} (\hat{J}_+ - \hat{J}_-). \quad (5.32)$$

Тогда для матричных элементов получаем

$$\begin{aligned} \langle u_i^{\kappa_a \mu_a} | -\hat{\mathbf{J}} \cdot \boldsymbol{\omega} | u_j^{\kappa_b \mu_b} \rangle &= i\delta_{\kappa_a \kappa_b} \frac{\omega}{2} S_{ij}^{\kappa_a} \\ &\times \left(\delta_{\mu_a, \mu_b + 1} \sqrt{(j_b - \mu_b)(j_b + \mu_b + 1)} - \delta_{\mu_a, \mu_b - 1} \sqrt{(j_b + \mu_b)(j_b - \mu_b + 1)} \right), \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$S_{ij}^{\kappa} = \int dr \left[G_i^{\kappa}(r)G_j^{\kappa}(r) + F_i^{\kappa}(r)F_j^{\kappa}(r) \right], \quad (5.34)$$

где $G_i^{\kappa}(r)/F_i^{\kappa}(r)$ — верхняя/нижняя радиальные компоненты базисных функций $u_i^{\kappa\mu}(r)$, умноженные на r (см. уравнения (5.10)–(5.11)). Как видно из уравнения (5.33) вращательный член является диагональным по отношению к κ и связывает только функции с $\Delta\mu = \pm 1$.

С другой стороны, вращение межъядерной оси можно также учесть в инерциальной системе отсчета, представленной на Рис. 20. Начало координат этой системы отсчета находится в центре масс, а ее ось z направлена вдоль вектора начальной скорости ядра А. Гамильтониан в этом случае приобретает явную зависимость от угла $\theta_{AB}(t)$ между осью z и межъядерной осью (см. Рис. 20). В инерциальной системе отсчета гамильтониан имеет простой вид

$$H(t) = h^{\text{free}} + V(\mathbf{r}, t). \quad (5.35)$$

Двухцентровый потенциал ядер можно выразить в виде, подобном уравнению

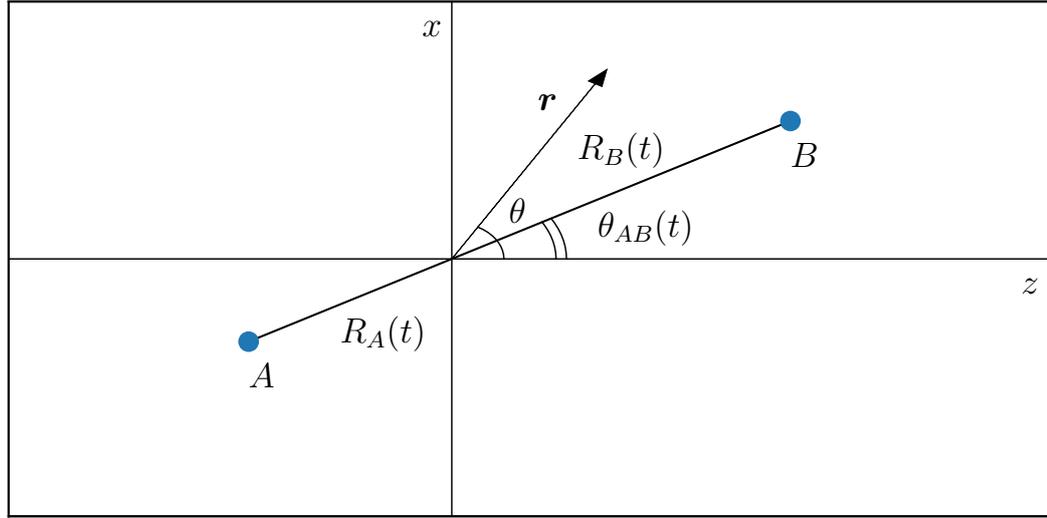


Рис. 20: Инерциальная система отсчета для общего случая ядер с разными массами.

(5.3)

$$V(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha=A,B} \sum_{L=0}^{\infty} V_L^{\alpha}(r, R_{\alpha}(t)) \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} P_L(\cos(\theta - \theta_{AB}(t))), \quad (5.36)$$

где

$$V_L^{\alpha}(r, R_{\alpha}(t)) = \int_{\theta_{AB}(t)}^{\theta_{AB}(t)+\pi} d\theta \sin(\theta - \theta_{AB}(t)) P_L(\cos(\theta - \theta_{AB}(t))) V_{\alpha}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}(t)|). \quad (5.37)$$

Снова используя свойство (5.7) полиномов Лежандра, приходим к следующему разложению потенциала $V(\mathbf{r}, t)$ по сферическим гармоникам:

$$V(\mathbf{r}, t) = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L V_L(r, t) Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{R}}_B(t)), \quad (5.38)$$

$$V_L(r, t) = V_L^A(r, R_A(t)) + V_L^B(r, R_B(t)). \quad (5.39)$$

В отличие от уравнения (5.5), все гармоники присутствуют в разложении (5.38), что означает, что потенциал связывает функции со всеми возможными парами κ и μ . Вся зависимость $V(\mathbf{r}, t)$ от угла поворота межъядерной оси содержится в последнем множителе уравнения (5.38), то есть $Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{R}}_B(t))$. Матричные элементы двухцентрового потенциала (5.38) очень похожи на показанные в урав-

нении (5.15). Однако теперь в дополнение к сумме по L мы также получаем сумму по M , и каждый LM -член в сумме умножается на соответствующую сферическую гармонику $Y_{LM}^* \left(\hat{\mathbf{R}}_B(t) \right)$:

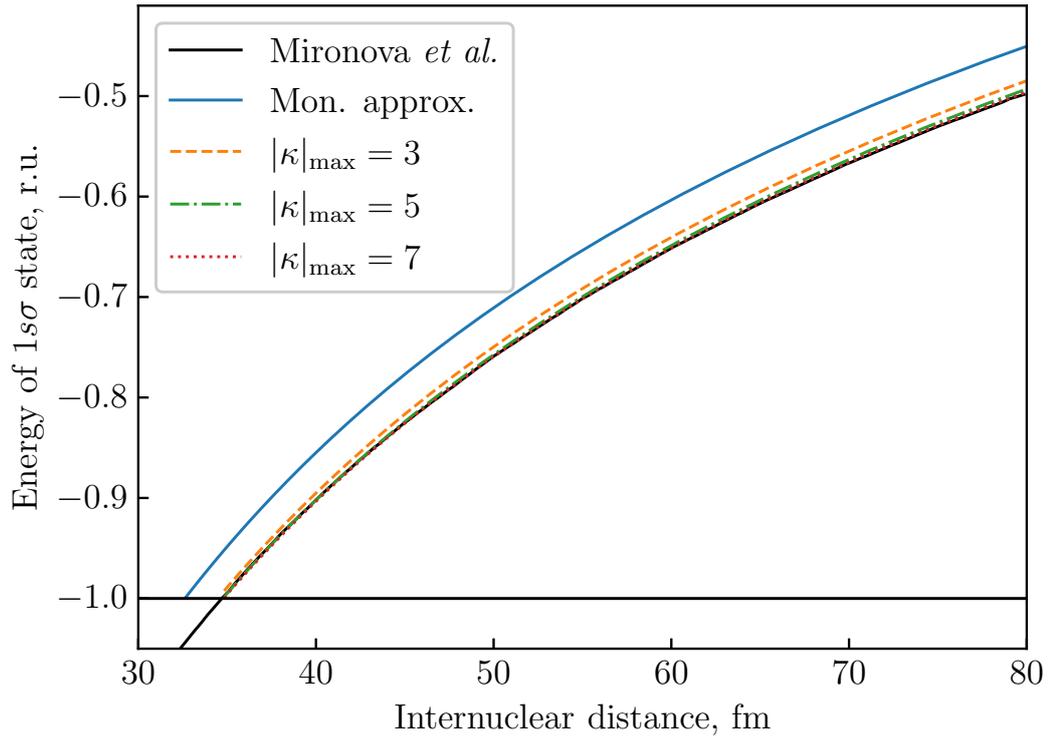
$$V_{jk} = \sum_{LM} g^{LM}(\kappa_j \mu_j, \kappa_k \mu_k) Y_{LM}^* \left(\hat{\mathbf{R}}_B(t) \right) \int dr V_L(r, t) [F_j(r) F_k(r) + G_j(r) G_k(r)]. \quad (5.40)$$

5.3 Результаты

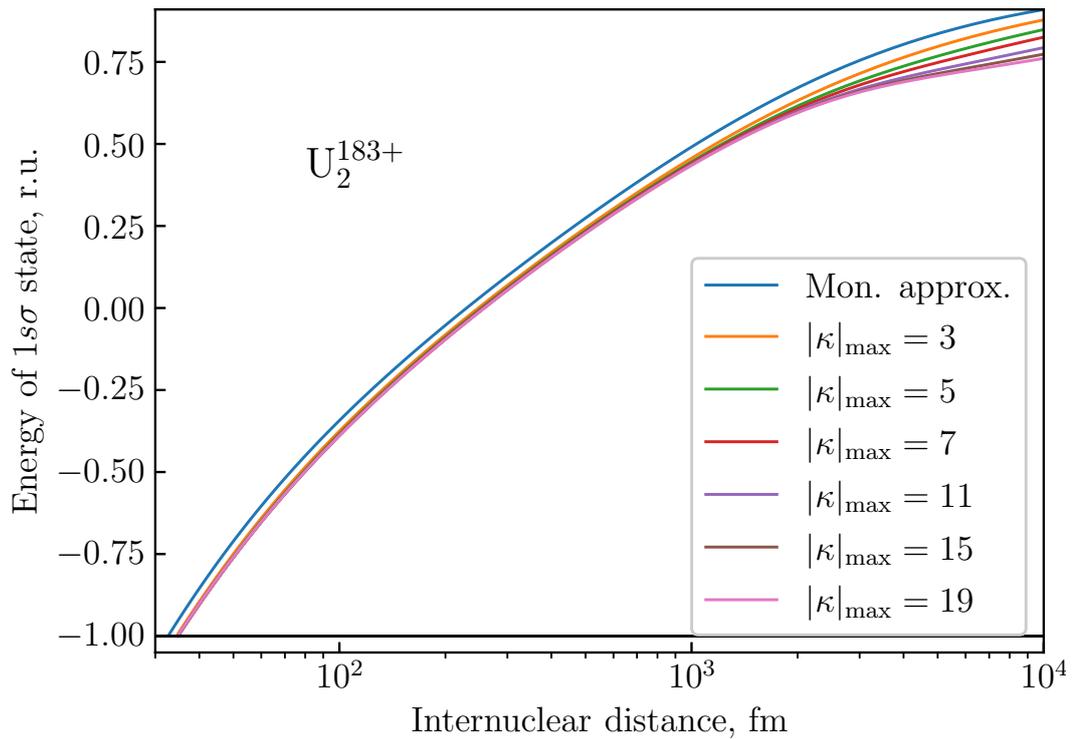
Следуя описанному выше методу, мы исследовали, как включение в потенциал сферических гармоник старшего порядка влияет на результаты, полученные в рамках монопольного приближения. С этой целью мы выполнили расчеты энергии основного состояния, критических межъядерных расстояний, вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов для различного числа мультиполей, учтённых в разложении двухцентрового потенциала ядер.

5.3.1 Энергии основного состояния и критические межъядерные расстояния

На Рис. 21а изображена энергия основного состояния квазимолекулы U_2^{183+} в зависимости от межъядерного расстояния в диапазоне от 30 до 80 фм. На рисунке приведены кривые, соответствующие монопольному приближению ($|\kappa|_{\max} = 1$), $|\kappa|_{\max} = 3$ и $|\kappa|_{\max} = 5$. Для сравнения мы также включили результат, полученный в работе [80] с использованием метода Дирака-Штурма, в котором двухцентровый базисный набор строится из одноцентровых орбиталей Дирака-Штурма, локализованных на ядрах. Распределение заряда ядра в работе [80] описывалось с помощью модели Ферми. Из рисунка видно, что наиболее выраженное изменение энергии основного состояния связано с переходом от монопольного приближения ($|\kappa|_{\max} = 1$) к базису с $|\kappa|_{\max} = 3$. Кривая, соответствующая $|\kappa|_{\max} = 5$, почти совпадает с кривой из [80], а при $|\kappa|_{\max} = 7$ разница с результатами [80] становится визуально незаметной в рассматриваемой области межъядерных расстояний. В более широком диапазоне межъядерных расстояний зависимость энергии основного состояния U_2^{183+} от $|\kappa|_{\max}$ можно найти



(a)



(b)

Рис. 21: Энергия $1s$ состояния квазимолекулы U_2^{183+} как функция межъядерного расстояния. Mironova *et al.* обозначает данные из работы [80].

на Рис. 21b. Там показаны результаты, полученные для $|\kappa|_{\max}$ вплоть до 19 и межъядерных расстояний в диапазоне от 30 до 10000 фм. Кривые расположены строго одна под другой, причем верхняя соответствует монополюсному прибли-

жению, а нижняя была получена в базисе с $|\kappa|_{\max} = 19$

Одной из наиболее важных характеристик, относящихся к данной паре ядер при изучении спонтанного рождения электрон-позитронных пар, является критическое межъядерное расстояние R_{cr} . Вместе с параметрами траектории, такими как энергия столкновения E и прицельный параметр столкновения b или минимальное межъядерное расстояние R_{min} и $\eta = E/E_0$, R_{cr} определяет продолжительность сверхкритического режима τ_{cr} (см., например, Рис. 4). Критическое расстояние определяется как расстояние между ядрами, при котором уровень энергии определённого квазимолекулярного связанного состояния достигает границы отрицательно-энергетического континуума. Оно зависит от зарядов ядер и имеет разные значения для разных энергетических уровней, $R_{\text{cr}} = R_{\text{cr}}^n(Z_A, Z_B)$, где n обозначает определенный энергетический уровень. Функция $R_{\text{cr}}^n(Z_A, Z_B)$ определена только для таких Z_A, Z_B , для которых существует решение уравнения $\varepsilon_n(Z_A, Z_B, R) = -mc^2$. Для рассматриваемых в настоящем исследовании ядер только низшее $1s\sigma$ состояние погружается в отрицательно-энергетический континуум на заметный промежуток времени. По этой причине ниже мы ограничимся рассмотрением R_{cr} , соответствующего только состоянию $1s\sigma$, и опустим верхний индекс.

В Таблице 1 представлена зависимость R_{cr} от количества κ -каналов, включенных в базисный набор. В таблице приведены результаты, полученные для гомоядерных квазимолекул с зарядом ядер $87 \leq Z \leq 100$. Для сравнения мы также включили значения, полученные в работах [46, 80]. Чтобы таблицу было легче читать, мы показываем значения только до тех пор пока R_{cr} не сойдётся к определённому числу, т.е. последнее значение в каждой строке соответствует сошедшемуся результату. Здесь значения среднеквадратичных зарядовых радиусов ядер $\langle r_n^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$ были взяты из работы [81], если таковые там имеются, в противном случае мы использовали значения из работы [82]. Как видно из таблицы, наши сошедшиеся значения R_{cr} находятся в отличном согласии с результатами работы [80]. Во всем диапазоне рассматриваемых значений зарядов ядер отклонение не превышает 0.02 фм, при этом наши результаты оказываются систематически меньше. Это расхождение может быть частично объяснено различными моделями распределения зарядов ядер. Мы рассматривали ядра как однородно заряженные сферы, тогда как в работе [80] использовалась модель Ферми. Скорость сходимости заметно зависит от заряда ядер Z . Количество необхо-

Таблица 1: Зависимость критического межъядерного расстояний R_{cr} для 1σ состояния от $|\kappa|_{\text{max}}$ для гомоядерных одноэлектронных квазимолекул. Верхний индекс a обозначает результаты работы [46], b – работы [80]

Z	$\langle r_n^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$ (фм)	1	3	5	7	9	11	13	15	17
87	5.5915	15.93	16.38	16.40						16.42 ^b
88	5.6079	19.13	19.82	19.87						19.89 ^b
89	5.6700	19.0799 ^a	19.7593 ^a							
89	5.6700	22.35	23.38	23.37	23.37	23.38				23.38 ^b
90	5.7848	25.61	26.82	26.94	26.95					26.96 ^b
90	5.7000	25.6651 ^a	26.8973 ^a							
91	5.7000	29.12	30.65	30.86	30.88					30.90 ^b
92	5.8571	32.56	34.39	34.67	34.70	34.71				34.72 ^b
92	5.7440	32.6217 ^a	34.4668 ^a							
93	5.7440	36.28	38.47	38.85	38.92	38.94				38.93 ^b
94	5.8601	39.98	42.49	42.96	43.06	43.09				43.10 ^b
94	5.9048	40.0043 ^a	42.5210 ^a							
95	5.8429	43.82	46.68	47.27	47.41	47.45	47.46			47.47 ^b
96	5.8160	47.82	51.07	51.78	51.98	52.04	52.05	52.06		52.06 ^b
96	5.8440	47.8263 ^a	51.0716 ^a							
97	5.8160	51.90	55.54	56.38	56.64	56.72	56.75	56.76		56.77 ^b
98	5.8440	56.06	60.09	61.07	61.39	61.49	61.54	61.55	61.56	61.56 ^b
98	5.8650	56.0564 ^a	60.0818 ^a							
99	5.8650	60.32	64.76	65.89	66.27	66.41	66.46	66.48	66.49	66.50 ^b
100	5.8860	64.68	69.55	70.81	71.26	71.44	71.51	71.54	71.55	71.57 ^b

Таблица 2: Зависимость критического межъядерного расстояний R_{cr} для $1s\sigma$ состояния от $|\kappa|_{max}$ для гетероядерных одноэлектронных квазимолекул с $Z_A = 92$. МА обозначает результаты, полученные в монополюльном приближении. Верхний индекс a обозначает результаты работы [46].

Z_B	МА	$ \kappa _{max}$							
		2	3	4	5	7	9	11	13
82	15.82	15.74	16.25	16.25	16.27				
83	17.44	17.32	17.98	17.98	18.01				
84	19.04	18.91	19.71	19.71	19.74				
85	20.69	20.54	21.49	21.49	21.55				
86	22.27	22.10	23.19	23.19	23.26				
87	23.93	23.74	25.00	25.00	25.10				
88	25.61	25.40	26.82	26.82	26.95	26.96			
89	27.34	27.10	28.71	28.70	28.87	28.88			
90	29.03	28.78	30.55	30.54	30.74	30.76			
91	30.82	30.54	32.50	32.49	32.74	32.77			
92	32.56		34.39		34.67		34.70		34.71
93	34.41	34.09	36.42	36.40	36.74	36.80	36.81		
94	36.22	35.88	38.38	38.37	38.75	38.82	38.83		
95	38.08	37.72	40.41	40.40	40.83	40.92	40.93		
96	39.99	39.62	42.51	42.50	42.99	43.10	43.12		
97	41.93	41.53	44.53	44.62	45.17	45.30	45.33	45.34	
98	43.88	43.47	46.77	46.75	47.36	47.52	47.55	47.56	47.57
	43.894 ^a	43.483 ^a	46.792 ^a	46.787 ^a					

димых κ -каналов наименьшее для более легких ядер и почти линейно растет с увеличением Z . Например, чтобы получить R_{cr} с точностью до четырех значащих цифр для $Z = 87$, достаточно иметь базис с $|\kappa|_{max} = 5$, тогда как для $Z = 100$ требуется $|\kappa|_{max} = 17$. Аналогичные расчеты были также проведены для гетероядерных одноэлектронных квазимолекул. Результаты представлены в Таблице 2.

5.3.2 Вероятности рождения пар

Изучив статические свойства одноэлектронных квазимолекул, мы перешли к динамической задаче низкоэнергетических ядерных столкновений. В

рамках этой задачи мы исследовали, как выход за пределы монополюного приближения влияет на признаки перехода к сверхкритическому режиму, описанные в предыдущей главе. С этой целью мы провели расчеты вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов в столкновениях ядер с различными зарядами. Ядра рассматривались классически как равномерно заряженные шары радиусом $R_n = 1.2A^{1/3}$ фм, где $A = 2.5Z$ — атомное массовое число. Их движение описывалось гиперболическими траекториями. Как было продемонстрировано в работе [55], в приближении, не учитывающем вращение межъядерной оси, основной вклад в вероятность вносят состояния с проекциями полного углового момента $|\mu| = \frac{1}{2}$. Влияние вращения межъядерной оси будет рассмотрено в следующем разделе. Вычисления, описанные здесь, производились без учёта вращения. Поэтому, в базисный набор были включены только состояния с $\mu = \frac{1}{2}$, и результаты удваивались. Базисные функции (5.10), (5.11) строились с использованием В-сплайнов 9-го порядка, сгенерированных на сетке размером $R_{\text{box}} = 26400$ фм. Узлы были распределены полиномиально, $r_i = R_{\text{box}} (i/(N-1))^4$. Начальное и конечное межъядерное расстояние было принято равным $R(t_{\text{in}}) = R(t_{\text{out}}) \equiv R_0 = 5000$ фм. Число развиваемых во времени электронных состояний было уменьшено за счет введения максимальной энергии $\varepsilon_c = 6mc^2$. Только состояния с энергией $\varepsilon \in (-mc^2, \varepsilon_c]$ учитывались в уравнении (2.45), обеспечивая относительную погрешность суммы на уровне 10^{-4} .

Сначала мы изучили зависимость вероятности рождения пар от количества κ -каналов, включенных в разложение (5.21) нестационарной волновой функции. Для этой цели мы рассмотрели столкновения ядер урана с энергией в системе покоя мишени, равной 6.218 МэВ/а.е.м. Таблица 3 содержит полную вероятность рождения пар P_t и вклады основного (P_g) и всех связанных состояний (P_b), полученные для нескольких прицельных параметров в диапазоне от 0 до 30 фм. Для сравнения также приведены значения, полученные в работе [55]. Таблица показывает довольно быструю сходимость общей вероятности в зависимости от числа включенных κ . Например, базис с $|\kappa|_{\text{max}} = 3$ уже обеспечивает отклонение от сошедшихся результатов менее чем на 1%. Поэтому, в дальнейших расчетах в базис были включены только функции с $|\kappa| \leq 3$.

После этого мы изучили поведение вероятности рождения пар как функции η при фиксированном R_{min} и исследовали, как учет членов с $L > 0$ в

Таблица 3: Зависимость вероятности рождения пар от $|\kappa|_{\max}$ для столкновений ядер урана с энергией в системе покоя мишени, равной 6.218 МэВ/а.е.м. P_t — полная вероятность рождения пар, P_g и P_b — вклады основного и всех связанных состояний, соответственно. Строки с $|\kappa|_{\max} = 1$ соответствуют монополюсному приближению.

	$ \kappa _{\max}$	Прицельный параметр (фм)						
		0	5	10	15	20	25	30
P_g	1	1.04×10^{-2}	8.80×10^{-3}	6.02×10^{-3}	3.84×10^{-3}	2.41×10^{-3}	1.51×10^{-3}	9.50×10^{-4}
	3	1.09×10^{-2}	9.24×10^{-3}	6.41×10^{-3}	4.15×10^{-3}	2.64×10^{-3}	1.68×10^{-3}	1.07×10^{-3}
	5	1.11×10^{-2}	9.46×10^{-3}	6.58×10^{-3}	4.27×10^{-3}	2.73×10^{-3}	1.74×10^{-3}	1.11×10^{-3}
	7	1.10×10^{-2}	9.34×10^{-3}	6.50×10^{-3}	4.23×10^{-3}	2.70×10^{-3}	1.73×10^{-3}	1.11×10^{-3}
	9	1.08×10^{-2}	9.24×10^{-3}	6.42×10^{-3}	4.18×10^{-3}	2.67×10^{-3}	1.71×10^{-3}	1.10×10^{-3}
	11	1.08×10^{-2}	9.19×10^{-3}	6.39×10^{-3}	4.16×10^{-3}	2.66×10^{-3}	1.70×10^{-3}	1.09×10^{-3}
Работа [55]		1.09×10^{-2}	9.30×10^{-3}	6.47×10^{-3}	4.21×10^{-3}	2.73×10^{-3}	1.72×10^{-3}	1.11×10^{-3}
P_b	1	1.25×10^{-2}	1.05×10^{-2}	7.03×10^{-3}	4.39×10^{-3}	2.70×10^{-3}	1.66×10^{-3}	1.03×10^{-3}
	3	1.32×10^{-2}	1.12×10^{-2}	7.63×10^{-3}	4.85×10^{-3}	3.03×10^{-3}	1.89×10^{-3}	1.19×10^{-3}
	5	1.32×10^{-2}	1.11×10^{-2}	7.62×10^{-3}	4.86×10^{-3}	3.05×10^{-3}	1.91×10^{-3}	1.21×10^{-3}
	7	1.31×10^{-2}	1.11×10^{-2}	7.59×10^{-3}	4.84×10^{-3}	3.04×10^{-3}	1.91×10^{-3}	1.21×10^{-3}
	9	1.31×10^{-2}	1.11×10^{-2}	7.58×10^{-3}	4.83×10^{-3}	3.03×10^{-3}	1.90×10^{-3}	1.21×10^{-3}
	11	1.31×10^{-2}	1.11×10^{-2}	7.58×10^{-3}	4.83×10^{-3}	3.03×10^{-3}	1.90×10^{-3}	1.20×10^{-3}
Работа [55]		1.32×10^{-2}	1.12×10^{-2}	7.64×10^{-3}	4.87×10^{-3}	3.07×10^{-3}	1.93×10^{-3}	1.23×10^{-3}
P_t	1	1.29×10^{-2}	1.08×10^{-2}	7.26×10^{-3}	4.51×10^{-3}	2.75×10^{-3}	1.69×10^{-3}	1.04×10^{-3}
	3	1.36×10^{-2}	1.15×10^{-2}	7.83×10^{-3}	4.95×10^{-3}	3.08×10^{-3}	1.92×10^{-3}	1.20×10^{-3}
	5	1.36×10^{-2}	1.15×10^{-2}	7.81×10^{-3}	4.96×10^{-3}	3.10×10^{-3}	1.94×10^{-3}	1.22×10^{-3}
	7	1.35×10^{-2}	1.14×10^{-2}	7.79×10^{-3}	4.95×10^{-3}	3.09×10^{-3}	1.94×10^{-3}	1.22×10^{-3}
	9	1.35×10^{-2}	1.14×10^{-2}	7.78×10^{-3}	4.94×10^{-3}	3.09×10^{-3}	1.93×10^{-3}	1.22×10^{-3}
	11	1.35×10^{-2}	1.14×10^{-2}	7.78×10^{-3}	4.94×10^{-3}	3.09×10^{-3}	1.93×10^{-3}	1.22×10^{-3}
Работакк [55]		1.38×10^{-2}	1.16×10^{-2}	8.01×10^{-3}	5.15×10^{-3}	3.46×10^{-3}	2.14×10^{-3}	1.42×10^{-3}

разложении потенциала (5.5) влияет на свидетельства перехода к сверхкритическому режиму, найденные в монопольном приближении. Далее, мы будем рассматривать полную вероятность рождения пар, обозначив ее P без нижнего индекса. Как было показано в предыдущей главе (см. также работы [59, 60]), в монопольном приближении вероятность рождения пар как функция η начинает увеличиваться при $\eta \rightarrow 1$, когда R_{\min} и $Z_t = Z_A + Z_B$ достаточно глубоко входят в сверхкритическую область параметров столкновений. Как показано на Рис. 22, это качественное изменение $P(\eta)$ вблизи точки $\eta = 1$ сохраняется и в расчетах с двухцентровым потенциалом ядер. Этот рисунок изображает $P(\eta)$, полученную для симметричных столкновений с $R_{\min} = 17.5$ фм ядер с докритическим ($Z = 84$) и сверхкритическим ($Z = 88, 92, 96$) зарядами. Для каждого Z построены две кривые: оранжевая пунктирная линия соответствует монопольному приближению ($|\kappa|_{\max} = 1$), а сплошная синяя линия была получена в базисе с $|\kappa|_{\max} = 3$. Сравнивая кривые, можно заметить, что эффекты, связанные с мультипольными членами более высокого порядка, несколько ускоряют появление роста $P(\eta)$ при $\eta \rightarrow 1$ для сверхкритических зарядов ядер. Например, в случае столкновений $U^{92+}-U^{92+}$ вероятность, полученная при $|\kappa|_{\max} = 3$, имеет небольшой минимум вблизи $\eta = 1$, отсутствующий в монопольном приближении.

Влияние немнопольных слагаемых потенциала становится более очевидным при рассмотрении производной вероятности рождения пар по параметру η , $dP/d\eta$, в точке $\eta = 1$. На Рис. 23 представлена эта производная и индивидуальные вклады четных ($\mathcal{P} = 1$) и нечетных ($\mathcal{P} = -1$) состояний. Рисунок 23a изображает $dP/d\eta$ как функцию Z при $R_{\min} = 17.5$ фм, а Рис. 23b, в свою очередь, изображает эту производную как функцию R_{\min} для $Z = 96$. Как видно из этих графиков, отклонение от монопольных результатов практически незаметно до тех пор, пока соответствующий канал не становится сверхкритическим, что происходит при $Z \approx 87.3$ для $\mathcal{P} = 1$ и $Z \approx 94.8$ для $\mathcal{P} = -1$. В сверхкритической области значения $dP/d\eta$, полученные при $|\kappa|_{\max} = 3$, лежат ниже, чем монопольные значения. Такое поведение $dP/d\eta$ согласуется с результатами работ [46, 47], где были исследованы параметры сверхкритического резонанса за пределами монопольного приближения. Согласно исследованиям [46, 47], включение мультипольных членов более высокого порядка в разложение потенциала приводит к увеличению ширины резонанса для квазимолекулы U_2^{183+}

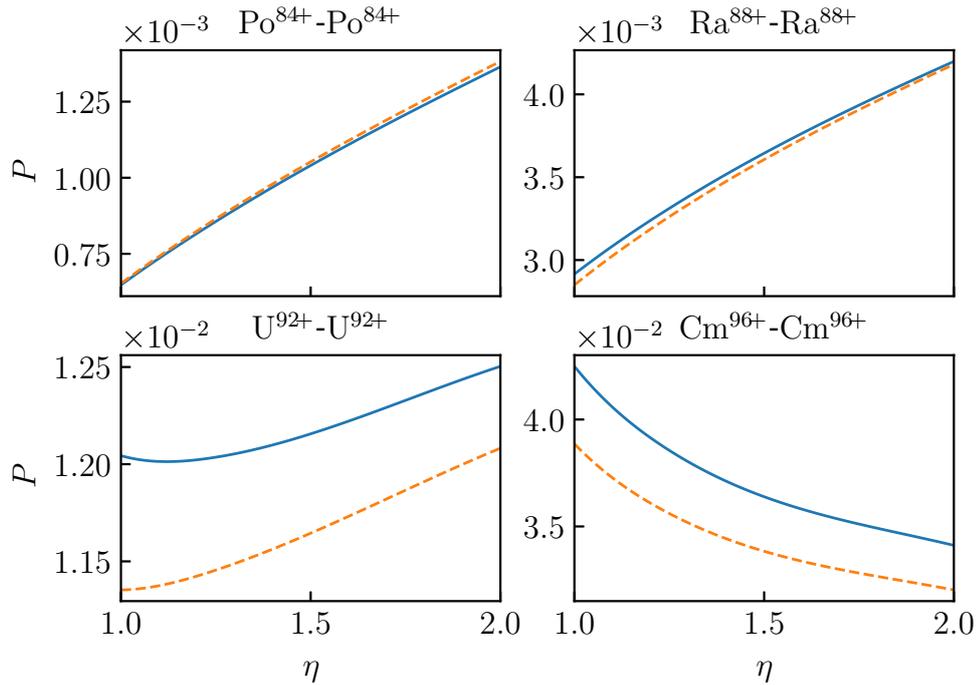
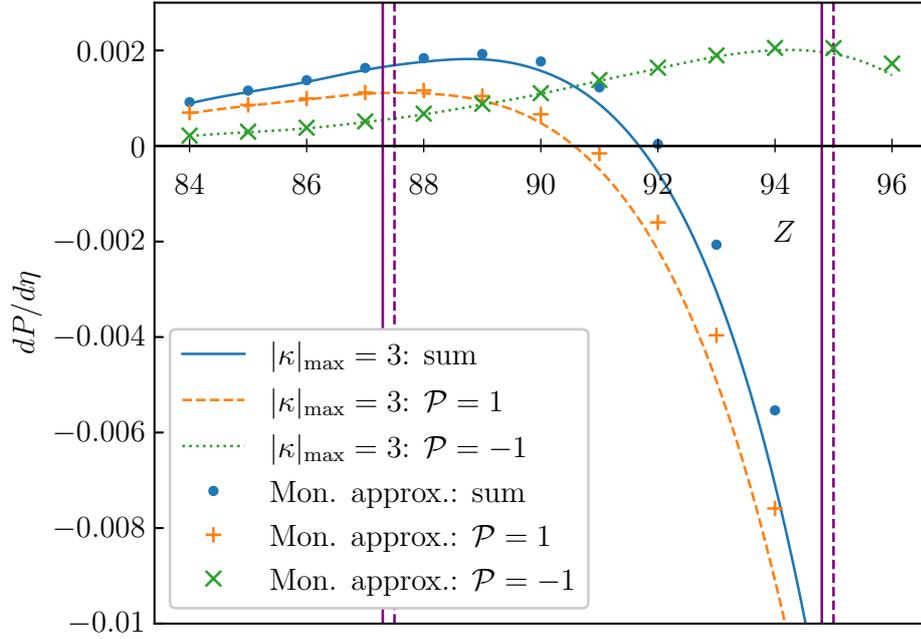
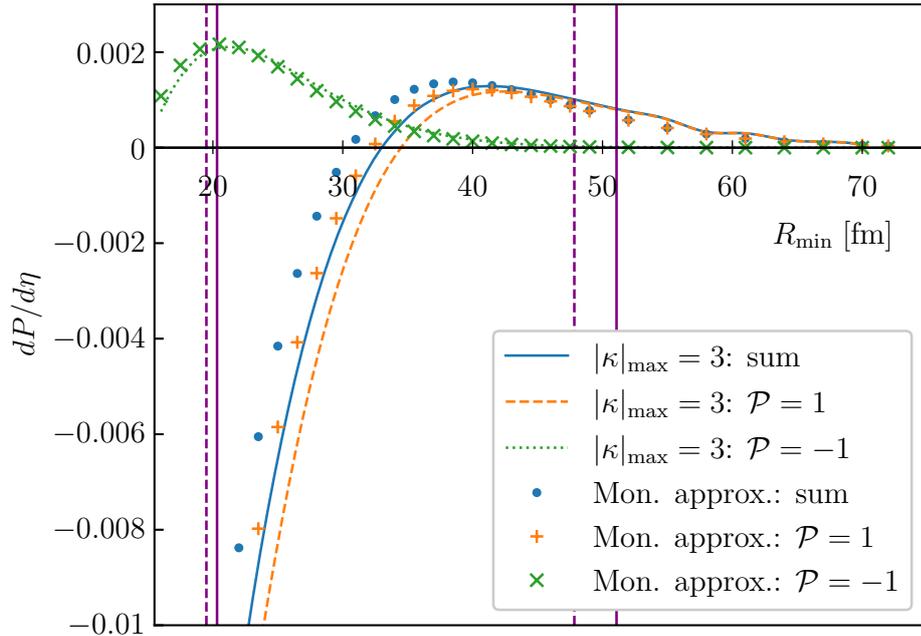


Рис. 22: Полная вероятность рождения пар как функция η при $R_{\min} = 17.5$ фм. Сплошными синими линиями показаны результаты, полученные при $|\kappa|_{\max} = 3$, пунктирные оранжевые кривые соответствуют результатам в монополюсном приближении ($|\kappa|_{\max} = 1$).

примерно на 20% при межъядерном расстоянии в 16 фм. Более того, это увеличение ширины оказывается больше при бóльших межъядерных расстояниях. Стоит отметить, что ширина сверхкритического резонанса обусловлена исключительно спонтанным рождением пар, в то время как в столкновениях тяжелых ядер как спонтанный, так и динамический механизмы дают вклад в полную вероятность рождения пар. Как видно из Таблицы 3, общее увеличение вероятности рождения пар в лобовых столкновениях ядер урана с энергией 6.218 МэВ/а.е.м. (что соответствует минимальному межъядерному расстоянию $R_{\min} \approx 16.47$ фм) составляет приблизительно 5%. Это может указывать на то, что относительный вклад спонтанного механизма в рождение пар стал больше, хотя электрон-позитронные пары в основном образуются за счёт динамического механизма. В результате можно наблюдать усиление сигнала, указывающего на переход к сверхкритическому режиму, обнаруженному в $dP/d\eta$, а именно изменение знака с положительного на отрицательный. Еще один фактор, который может играть определённую роль — это увеличение продолжительности сверхкритического режима, τ_{cr} , вследствие увеличения критического межъядерного расстояния R_{cr} (см. Таблицу 1).



(a)



(b)

Рис. 23: Производная вероятности рождения e^-e^+ пар $dP/d\eta$ в точке $\eta = 1$ ($\theta = 180^\circ$) как функция а) Z при $R_{\min} = 17.5$ фм, б) R_{\min} для $Z = 96$. Вертикальными линиями отмечены значения абсцисс, при которых энергии состояний $1s\sigma$ и $2p_{1/2}\sigma$ равны $-mc^2$. Пунктирные линии соответствуют монополюльному приближению ($|\kappa|_{\max} = 1$), сплошные линии — расчетам с $|\kappa|_{\max} = 3$.

5.3.3 Влияние вращения межъядерной оси на вероятности рождения пар

Следуя подходу, описанному в разделе 5.2.2, мы разработали численный алгоритм, реализующий обе процедуры учёта вращения межъядерной оси. Ис-

Таблица 4: Вероятность рождения пар, полученная базисе с $\kappa = -1, 2, -3$. P_b — вероятность рождения пар с электроном в связанном состоянии, P_t — полная вероятность рождения пар, А — расчёт без учёта вращения межъядерной оси, В — расчёты с учётом вращения межъядерной оси: В1 — во вращающейся системе отсчета, В2 — в инерциальной системе отсчета.

R_{\min} , фм	Метод	$\eta = E/E_0$				
		1	5	10	20	
17.5	P_b	A: $ \mu \leq 3/2$	1.03×10^{-2}	7.95×10^{-3}	7.07×10^{-3}	5.94×10^{-3}
		B1: $ \mu \leq 3/2$	1.03×10^{-2}	7.96×10^{-3}	7.09×10^{-3}	5.96×10^{-3}
		B1: все μ	1.03×10^{-2}	7.96×10^{-3}	7.09×10^{-3}	5.96×10^{-3}
		B2: все μ	1.03×10^{-2}	7.96×10^{-3}	7.09×10^{-3}	5.96×10^{-3}
	P_t	A: $ \mu \leq 3/2$	1.04×10^{-2}	1.04×10^{-2}	1.18×10^{-2}	1.44×10^{-2}
		B1: $ \mu \leq 3/2$	1.04×10^{-2}	1.05×10^{-2}	1.19×10^{-2}	1.46×10^{-2}
		B1: все μ	1.04×10^{-2}	1.05×10^{-2}	1.19×10^{-2}	1.47×10^{-2}
		B2: все μ	1.04×10^{-2}	1.05×10^{-2}	1.19×10^{-2}	1.47×10^{-2}
25	P_b	A: $ \mu \leq 3/2$	4.19×10^{-3}	5.15×10^{-3}	5.25×10^{-3}	4.97×10^{-3}
		B1: $ \mu \leq 3/2$	4.19×10^{-3}	5.16×10^{-3}	5.27×10^{-3}	5.00×10^{-3}
		B1: все μ	4.19×10^{-3}	5.16×10^{-3}	5.27×10^{-3}	5.00×10^{-3}
		B2: все μ	4.19×10^{-3}	5.16×10^{-3}	5.27×10^{-3}	5.00×10^{-3}
	P_t	A: $ \mu \leq 3/2$	4.20×10^{-3}	5.88×10^{-3}	7.11×10^{-3}	8.96×10^{-3}
		B1: $ \mu \leq 3/2$	4.20×10^{-3}	5.91×10^{-3}	7.18×10^{-3}	9.15×10^{-3}
		B1: все μ	4.20×10^{-3}	5.91×10^{-3}	7.18×10^{-3}	9.17×10^{-3}
		B2: все μ	4.20×10^{-3}	5.91×10^{-3}	7.18×10^{-3}	9.17×10^{-3}

пользуя этот код, мы выполнили расчеты вероятностей рождения пар с захватом электрона в связанное состояние и полной вероятности рождения пар в симметричных столкновениях ядер урана. Расчеты проводились в базисе пространственно четных функций с $\kappa = -1, 2, -3$. Количество угловых проекций μ , включенных в базис, варьировалось для разных методов. Расчеты во вращающейся системе отсчета без учета вращения проводились независимо для $\mu = 1/2$ и $\mu = 3/2$. Затем результаты суммировались и умножались на два. Вычисления в той же системе отсчета, но с учётом вращения выполнялись в двух базисных наборах. Первый из них включал функции с $|\mu| \leq 3/2$. Второй содержал функции со всеми возможными проекциями углового момента для заданного набора κ , то есть $|\mu| \leq 5/2$ в нашем случае. Наконец, расчеты в инерциальной системе отсчета были выполнены в базисе с $|\mu| \leq 5/2$. Результаты расчетов для $R_{\min} = 17.5$ и 25 фм приведены в Таблице 4. Из таблицы видно, что оба метода учета вращения дают идентичные результаты в наибольшем рассматриваемом

базисе с $|\mu| \leq 5/2$. Небольшая разница в последней значащей цифре результатов, полученных во вращающейся системе отсчета, для базисных наборов с $|\mu| \leq 3/2$ и $|\mu| \leq 5/2$ присутствует только при большом значении параметра η , а именно $\eta = 20$. Этот факт показывает преимущество расчетов во вращающейся системе отсчета по сравнению с инерциальной. В дополнение к большей разреженности матриц, упомянутой выше, расчёт во вращающейся системе отсчета также позволяет работать с матрицами меньшего размера, используя базисные наборы с меньшим количеством проекций углового момента. Принимая во внимание связь между прицельным параметром и новыми параметрами столкновения (R_{\min}, η) , заданную уравнением (3.3), можно ясно видеть, что при рассмотрении вероятности рождения пар в низкоэнергетических столкновениях с малыми прицельными параметрами эффектами вращения можно смело пренебречь. Именно этот тип столкновений используется для поиска спонтанного рождения пар. Для $R_{\min} = 17.5$ фм влияние вращения начинает проявляться только при $\eta = 5$. Как и ожидалось, их влияние возрастает с увеличением прицельного параметра и энергии.

5.3.4 Энергетические спектры позитронов

Еще один признак перехода к сверхкритическому режиму, обнаруженный в предыдущей главе, касается η -зависимости максимума энергетических спектров позитронов, полученных в столкновениях с фиксированным R_{\min} . Как было показано в разделе 4.3.2 в монопольном приближении, в случае докритических столкновений спектры, соответствующие большей η , обладают более высокими пиковыми значениями, тогда как для сверхкритических столкновений зависимость обратная, и пиковые значения уменьшаются с увеличением η . Расположение хвостов спектров при этом остается неизменным. В этом разделе мы рассмотрим, сохраняется ли это поведение за рамками монопольного приближения. Сначала рассмотрим столкновения ядер урана с энергией 6.218 МэВ/а.е.м. Спектры позитронов для лобовых столкновений, вычисленные в рамках монопольного приближения и за его пределами, показаны на Рис. 24. Кривая, полученная в базисе с $|\kappa|_{\max} = 3$, полностью согласуется с данными из работы [55]. Учёт в разложении потенциала ядер сферических гармоник с $L > 0$ приводит к увеличению спектра вблизи пика, оставляя хвостовую часть практически неизменной.

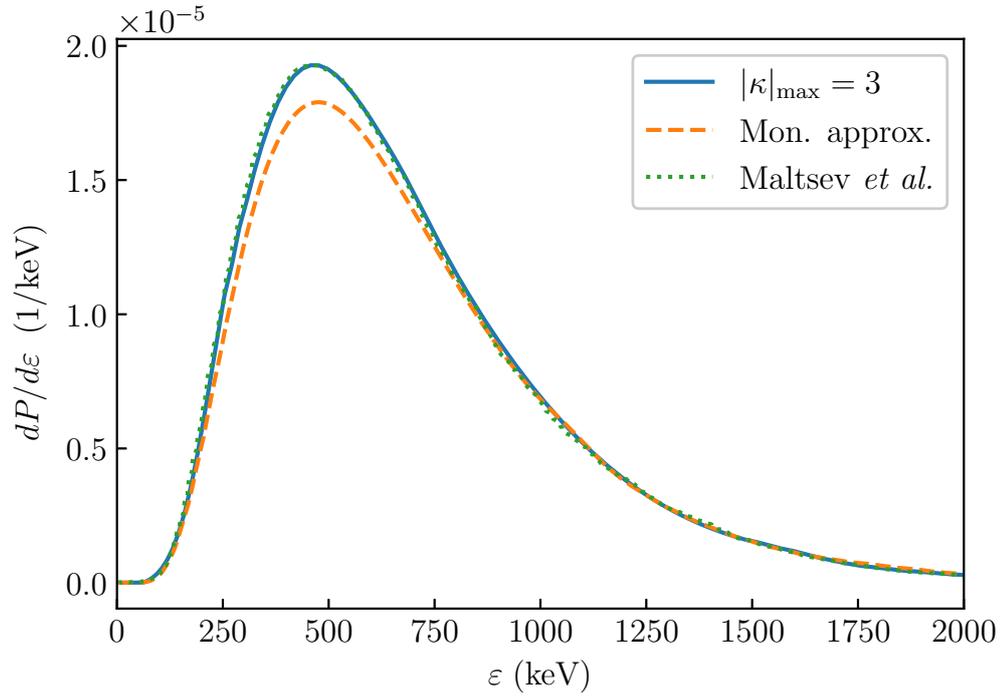


Рис. 24: Энергетические спектры позитронов рождённых в столкновениях U^{92+} - U^{92+} с энергией $E = 6.218$ МэВ/а.е.м. Maltsev *et al.* обозначает данные из работы [55].

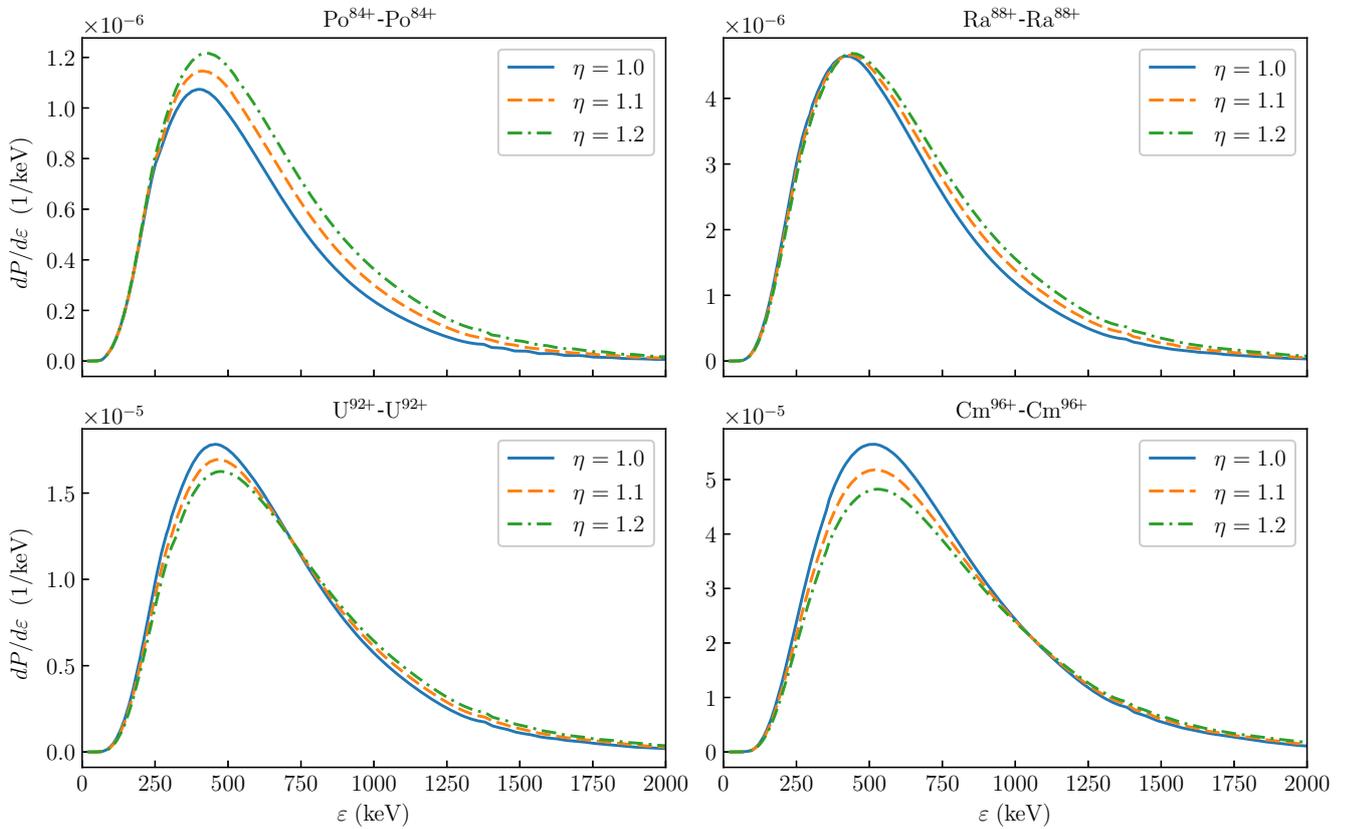


Рис. 25: Спектры позитронов для симметричных столкновений с $Z = Z_A = Z_B = 84-96$ при $R_{\min} = 17.5$ фм и $\eta = E/E_0 = 1, 1.1, 1.2$.

После этого мы изучили зависимость спектров позитронов от η для симметричных столкновений с фиксированным расстоянием наибольшего сближения, R_{\min} . На Рис. 25 представлены спектры, полученные для столкновений ядер с зарядовыми числами $Z = 84, 88, 92, 96$, $R_{\min} = 17.5$ фм, и $\eta = 1, 1.1, 1.2$. Результаты показывают, что как только суммарный заряд ядер $2Z$ превышает критическое значение, порядок кривых вблизи пика меняется на противоположный. В полном соответствии с предыдущей главой, докритическим столкновениям соответствуют более высокие пиковые значения при бóльших значениях η , в то время как в случае сверхкритических столкновений устанавливается противоположное соотношение между высотой пика и η . Такое же поведение спектров относительно η наблюдается при приближении к сверхкритической области параметров столкновения с другой стороны, а именно при уменьшении R_{\min} и фиксированном Z .

Заключение

В настоящей диссертации был исследован процесс рождения электрон-позитронных пар в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ядер. Для этого была реализована процедура численного решения нестационарного уравнения Дирака с использованием конечного не зависящего от времени базисного набора. Базисный набор состоит из биспиноров, характерных для сферически симметричных полей. Их угловая часть описывается сферическими спинорами, а радиальные компоненты построены из В-сплайнов в соответствии с методом дуального кинетического баланса, разработанным для устранения нефизических ложных состояний. Используя эту процедуру в рамках монополюсного приближения, мы выполнили непертурбативные расчеты вероятностей рождения пар и энергетических спектров позитронов для низкоэнергетических столкновений тяжелых ядер в широком диапазоне значений параметров столкновений. Для анализа полученных результатов мы ввели пару параметров (R_{\min}, η) , где R_{\min} — расстояние наибольшего сближения, а $\eta = E/E_0$ — отношение энергии столкновения E к энергии E_0 лобового столкновения с тем же R_{\min} . Наряду с энергией столкновения E и прицельным параметром, пара (R_{\min}, η) однозначно определяет траекторию столкновения. В результате анализа было обнаружено, что поведение вероятности рождения пар P относительно параметра η при фиксированном R_{\min} претерпевает качественное изменение, когда заряды ядер Z_A, Z_B и расстояние наибольшего сближения R_{\min} достаточно глубоко проникают в сверхкритическую область, граница которой определяется как решение уравнения $\varepsilon_{1s\sigma}(Z_A, Z_B, R_{\min}) = -mc^2$. Для докритических столкновений, то есть при $\varepsilon_{1s\sigma}(Z_A, Z_B, R_{\min}) > -mc^2$, вероятность рождения пар монотонно уменьшается при $\eta \rightarrow 1$. Однако, когда Z_A, Z_B и R_{\min} находятся внутри сверхкритической области на достаточном расстоянии от границы, уменьшение $P(\eta)$ при $\eta \rightarrow 1$ сменяется ростом, образуя таким образом минимум. Такое же изменение наблюдается в индивидуальных вкладах s и $p_{1/2}$ каналов, когда соответствующее состояние с наименьшей энергией опускается в нижний континуум. Энергетические спектры позитронов также показывают качественное изменение для сверхкритических столкновений. А именно, увеличение пиковых значений дифференциальной вероятности с увеличением η сменяется уменьшением в сверхкритической области. Рассмотрение части рождающихся пар,

включающей только позитроны с энергиями в области, куда может вносить вклад спонтанный механизм, позволяет усилить проявление этих признаков перехода к сверхкритическому режиму.

Достоверность признаков, найденных в рамках монопольного приближения, подтверждается расчетами с полным двухцентровым потенциалом. Используя мультипольное разложение, мы исследовали влияние старших сферических гармоник ядерного потенциала на вероятность рождения пар, энергетические спектры позитронов и их зависимость от η при фиксированном R_{\min} . Расчеты проводились во вращающейся квазимолекулярной системе отсчета, при этом вращательный член, появляющийся в гамильтониане из-за перехода к этой неинерциальной системе отсчета, не учитывался. Результаты расчетов показали те же качественные изменения $P(\eta)$ и позитронных спектров, что и в монопольном приближении. Более того, производная $dP/d\eta|_{\eta=1}$ становится отрицательной при меньших зарядах ядер Z_A, Z_B и бóльших значениях R_{\min} . Также мы количественно исследовали применимость приближения, не учитывающего вращение межъядерной оси. С этой целью мы разработали два метода расчета, в которых это вращение учитывается. Первый основан на вычислении во вращающейся квазимолекулярной системе отсчета, но с сохранением вращательного члена в гамильтониане. Во втором случае вычисления выполняются в инерциальной системе отсчета с началом координат, расположенным в центре масс. Оба метода находятся в идеальном согласии друг с другом и демонстрируют, что влияние вращения межъядерной оси на вероятность рождения пар пренебрежимо мало для низкоэнергетических столкновений с малыми прицельными параметрами. Именно этот тип столкновений используется для исследований спонтанного распада вакуума.

Список литературы

- [1] Ehlotzky F., Krajewska K., Kamiński J. Z. Fundamental processes of quantum electrodynamics in laser fields of relativistic power // Rep. Prog. Phys. — 2009. — Vol. 72, no. 4. — P. 046401.
- [2] Ruffini R., Vereshchagin G., Xue S.-S. Electron-positron pairs in physics and astrophysics: From heavy nuclei to black holes // Phys. Rep. — 2010. — Vol. 487, no. 1. — P. 1–140.
- [3] Di Piazza A., Müller C., Hatsagortsyan K. Z., Keitel C. H. Extremely high-intensity laser interactions with fundamental quantum systems // Rev. Mod. Phys. — 2012. — Vol. 84. — P. 1177–1228.
- [4] Fedotov A., Ilderton A., Karbstein F. et al. Advances in QED with intense background fields // Phys. Rep. — 2023. — Vol. 1010. — P. 1.
- [5] Pomeranchuk I., Smorodinsky J. On the energy levels of systems with $Z > 137$ // J. Phys. USSR. — 1945. — Vol. 9. — P. 97.
- [6] Герштейн С. С., Зельдович Я. Б. О рождении позитронов при взаимном сближении тяжелых ядер и поляризации вакуума // ЖЭТФ. — 1969. — Т. 57. — С. 654.
- [7] Pieper W., Greiner W. Interior electron shells in superheavy nuclei // Z. Physik A. — 1969. — Vol. 218. — P. 327.
- [8] Попов В. С. Об Уровнях энергии электронов при $Z > 137$ // Письма ЖЭТФ. — 1970. — Т. 11. — С. 254.
- [9] Попов В. С. Рождение позитронов в кулоновских полях с $Z > 137$ // ЖЭТФ. — 1970. — Т. 59. — С. 965.
- [10] Попов В. С. // Яд. Физ. — 1970. — Т. 12. — С. 429.
- [11] Попов В. С. О свойствах дискретного спектра для Z близких к 137 // ЖЭТФ. — 1971. — Т. 60. — С. 1228.
- [12] Зельдович Я. Б., Попов В. С. Электронная структура сверхтяжелых атомов // Усп. Физ. Наук. — 1971. — Т. 105. — С. 403.

- [13] Müller B., Peitz H., Rafelski J., Greiner W. Solution of the Dirac Equation for Strong External Fields // *Phys. Rev. Lett.* — 1972. — Vol. 28. — P. 1235.
- [14] Müller B., Rafelski J., Greiner W. Electron shells in over-critical external fields // *Z. Physik A.* — 1972. — Vol. 257. — P. 62.
- [15] Müller B., Rafelski J., Greiner W. Auto-ionization of positrons in heavy ion collisions // *Z. Physik A.* — 1972. — Vol. 257. — P. 183.
- [16] Мур В. Д., Попов В. С. Связанные состояния вблизи границы нижнего континуума (случай фермионов) // *ТМФ.* — 1976. — Т. 27. — С. 204.
- [17] Попов В. С., Елецкий В. Л., Мур В. Д. Свойства глубоколежащих уровней в сильных электростатических полях // *ЖЭТФ.* — 1976. — Т. 71. — С. 856.
- [18] Müller B. Positron creation in superheavy quasi-molecules // *Ann. Rev. Nucl. Sci.* — 1976. — Vol. 26. — P. 351.
- [19] Reinhardt J., Greiner W. Quantum electrodynamics of strong fields // *Rep. Prog. Phys.* — 1977. — Vol. 40, no. 3. — P. 219.
- [20] Soff G., Reinhardt J., Müller B., Greiner W. Shakeoff of the Vacuum Polarization in Quasimolecular Collisions of Very Heavy Ions // *Phys. Rev. Lett.* — 1977. — Vol. 38. — P. 592–595.
- [21] Мигдал А. Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. — Москва : Наука, 1978.
- [22] Rafelski J., Fulcher L. P., Klein A. Fermions and bosons interacting with arbitrarily strong external fields // *Phys. Rep.* — 1978. — Vol. 38, no. 5. — P. 227–361.
- [23] Greiner W., Müller B., Rafelski J. *Quantum Electrodynamics of Strong Fields.* — Berlin : Springer-Verlag, 1985.
- [24] Bosch F., Müller B. Positron creation in heavy-ion collisions // *Progress in Particle and Nuclear Physics.* — 1986. — Vol. 16. — P. 195–241.
- [25] Müller-Nehler U., Soff G. Electron excitations in superheavy quasimolecules // *Physics Reports.* — 1994. — Vol. 246, no. 3. — P. 101–250.

- [26] Reinhardt J., Greiner W. Supercritical fields and the decay of the vacuum // Proceeding of the Memorial Symposium for Gerhard Soff / Ed. by W. Greiner, J. Reinhardt. — EP Systema, Budapest, 2005. — P. 181–192.
- [27] Rafelski J., Kirsch J., Müller B. et al. Probing QED Vacuum with Heavy Ions // New Horizons in Fundamental Physics / Ed. by S. Schramm, M. Schäfer. — Cham : Springer, 2017. — P. 211–251.
- [28] Попов В. С. Спонтанное рождение подизтонов в столкновениях тяжелых ядер // ЖЭТФ. — 1973. — Т. 65. — С. 35.
- [29] Peitz H., Müller B., Rafelski J., Greiner W. Autoionization spectra of positrons in heavy-ion collisions // Lett. Nuovo Cimento. — 1973. — Vol. 8. — P. 37–42.
- [30] Попов В. С., Воскресенский Д. Н., Елецкий В. Л., Мур В. Д. О методе ВКБ при $Z > 137$ и его применении к теории сверхкритических атомов // ЖЭТФ. — 1979. — Т. 76. — С. 431.
- [31] Smith K., Peitz H., Müller B., Greiner W. Induced Decay of the Neutral Vacuum in Overcritical Fields Occurring in Heavy-Ion Collisions // Phys. Rev. Lett. — 1974. — Vol. 32. — P. 554–556.
- [32] Smith K., Müller B., Greiner W. Dynamical theory of intermediate molecular phenomena in heavy ion scattering // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. — 1975. — Vol. 8, no. 1. — P. 75.
- [33] Reinhardt J., Soff G., Müller B., Greiner W. Dynamical aspects: Coherent production of positrons in heavy ion collisions // Prog. Part. Nucl. Phys. — 1980. — Vol. 4. — P. 547.
- [34] Soff G., Reinhardt J., Müller B., Greiner W. Coupled Channel Analysis of Inner-Shell Vacancy Formation in Superheavy Quasimolecules // Z. Physik. A. — 1980. — Vol. 294. — P. 137.
- [35] Reinhardt J., Müller B., Greiner W. Theory of positron production in heavy-ion collisions // Phys. Rev. A. — 1981. — Vol. 24. — P. 103–128.
- [36] Müller U., de Reus T., Reinhardt J. et al. Positron production in crossed beams of bare uranium nuclei // Phys. Rev. A. — 1988. — Vol. 37. — P. 1449–1455.

- [37] Gumberidze A., Stöhlker Th., Beyer H. F. et al. X-ray spectroscopy of highly-charged heavy ions at FAIR // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2009. — Vol. 267, no. 2. — P. 248–250.
- [38] Lestinsky M. *et al.* Physics book: CRYRING@ESR // Eur. Phys. J. Special Topics. — 2016. — Vol. 225. — P. 797.
- [39] Ma X., Wen W. Q., Zhang S. F. et al. HIAF: New opportunities for atomic physics with highly charged heavy ions // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. — 2017. — Vol. 408. — P. 169–173.
- [40] Ter-Akopian G. M., Greiner W., Meshkov I. N. et al. Layout of new experiments on the observation of spontaneous electron-positron pair creation in supercritical Coulomb fields // Int. J. Mod. Phys. E. — 2015. — Vol. 24, no. 03. — P. 1550016.
- [41] Ackad E., Horbatsch M. Numerical calculation of supercritical Dirac resonance parameters by analytic continuation methods // Phys. Rev. A. — 2007. — Vol. 75. — P. 022508.
- [42] Кулешов В. М., Мур В. Д., Нарожный Н. Б. и др. Кулоновская задача с зарядом ядра $Z > Z_{\text{cr}}$ // Усп. Физ. Наук. — 2015. — Т. 185, № 8. — С. 845.
- [43] Godunov S. I., Machet B. M., Vysotsky M. I. Resonances in positron scattering on a supercritical nucleus and spontaneous production of e^+e^- pairs // Eur. Phys. J. C. — 2017. — Vol. 77. — P. 82.
- [44] Krylov K. S., Mur V. D., Fedotov A. M. On the resonances near the continua boundaries of the Dirac equation with a short-range interaction // Eur. Phys. J. C. — 2020. — Vol. 80. — P. 270.
- [45] Ackad E., Horbatsch M. Supercritical Dirac resonance parameters from extrapolated analytic continuation methods // Phys. Rev. A. — 2007. — Vol. 76. — P. 022503.
- [46] Marsman A., Horbatsch M. Calculation of supercritical Dirac resonance parameters for heavy-ion systems from a coupled-differential-equation approach // Phys. Rev. A. — 2011. — Vol. 84. — P. 032517.

- [47] Maltsev I. A., Shabaev V. M., Zaytsev V. A. et al. Calculation of the Energy and Width of Supercritical Resonance in a Uranium Quasimolecule // *Opt. Spectrosc.* — 2020. — Vol. 128. — P. 1100–1104.
- [48] Grashin P., Sveshnikov K. Vacuum polarization energy decline and spontaneous positron emission in QED under Coulomb supercriticality // *Phys. Rev. D.* — 2022. — Vol. 106. — P. 013003.
- [49] Krasnov A., Sveshnikov K. Non-perturbative effects in the QED-vacuum energy exposed to the supercritical Coulomb field // *Mod. Phys. Lett. A.* — 2022. — Vol. 37, no. 21. — P. 2250136. — <https://doi.org/10.1142/S021773232250136X>.
- [50] Grashin P. A., Sveshnikov K. A. The Gershtein-Greiner-Zeldovich Effect: Vacuum Charge Density and Vacuum Energy // *Lett. PEPAN.* — 2024. — Vol. 21. — P. 95–123.
- [51] Ackad E., Horbatsch M. Calculation of electron-positron production in supercritical uranium-uranium collisions near the Coulomb barrier // *Phys. Rev. A.* — 2008. — Vol. 78. — P. 062711.
- [52] Bondarev A. I., Tupitsyn I. I., Maltsev I. A. et al. Positron creation probabilities in low-energy heavy-ion collisions // *Eur. Phys. J. D.* — 2015. — Vol. 69, no. 4. — P. 110.
- [53] Maltsev I. A., Shabaev V. M., Tupitsyn I. I. et al. Electron-positron pair creation in low-energy collisions of heavy bare nuclei // *Phys. Rev. A.* — 2015. — Vol. 91. — P. 032708.
- [54] Maltsev I.A., Shabaev V.M., Tupitsyn I.I. et al. Pair production in low-energy collisions of uranium nuclei beyond the monopole approximation // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B.* — 2017. — Vol. 408. — P. 97–99.
- [55] Maltsev I. A., Shabaev V. M., Popov R. V. et al. Electron-positron pair production in slow collisions of heavy nuclei beyond the monopole approximation // *Phys. Rev. A.* — 2018. — Vol. 98. — P. 062709.
- [56] Popov R. V., Bondarev A. I., Kozhedub Y. S. et al. One-center calculations of the electron-positron pair creation in low-energy collisions of heavy bare nuclei // *Eur. Phys. J. D.* — 2018. — Vol. 72. — P. 115.

- [57] Dulaev N. K., Telnov D. A., Shabaev V. M. et al. Angular and energy distributions of positrons created in subcritical and supercritical slow collisions of heavy nuclei // *Phys. Rev. D.* — 2024. — Vol. 109. — P. 036008.
- [58] Voskresensky D. N. Electron-Positron Vacuum Instability in Strong Electric Fields. Relativistic Semiclassical Approach // *Universe.* — 2021. — Vol. 7, no. 104.
- [59] Maltsev I. A., Shabaev V. M., Popov R. V. et al. How to Observe the Vacuum Decay in Low-Energy Heavy-Ion Collisions // *Phys. Rev. Lett.* — 2019. — Vol. 123. — P. 113401.
- [60] Popov R. V., Shabaev V. M., Telnov D. A. et al. How to access QED at a supercritical Coulomb field // *Phys. Rev. D.* — 2020. — Vol. 102. — P. 076005.
- [61] de Reus T. Positron emission in elastic collisions of fully ionized high-Z heavy ions // *arXiv.* — 2022. — P. 2201.07324.
- [62] Popov R. V., Shabaev V. M., Maltsev I. A. et al. Spontaneous vacuum decay in low-energy collisions of heavy nuclei beyond the monopole approximation // *Phys. Rev. D.* — 2023. — Vol. 107. — P. 116014.
- [63] Müller B., Kent-Smith R., Greiner W. Induced radiative transitions of intermediate molecules in heavy ion collisions // *Phys. Lett. B.* — 1974. — Vol. 49, no. 3. — P. 219–223.
- [64] Müller B., Greiner W. The Two Centre Dirac Equation // *Z. Naturforsch A.* — 1976. — Vol. 31, no. 1. — P. 1–30.
- [65] Betz W., Soff G., Müller B., Greiner W. Direct Formation of Quasimolecular $1s\sigma$ Vacancies in Uranium-Uranium Collisions // *Phys. Rev. Lett.* — 1976. — Vol. 37. — P. 1046.
- [66] Soff G., Greiner W., Betz W., Müller B. Electrons in superheavy quasimolecules // *Phys. Rev. A.* — 1979. — Vol. 20. — P. 169.
- [67] Soff G., Reinhardt J. Positron creation in heavy ion collisions the influence of the magnetic field // *Phys. Lett. B.* — 1988. — Vol. 211, no. 1. — P. 179–182.

- [68] Voronov B. L., Gitman D. M., Tyutin I. V. // *Theor. Math. Phys.* — 2007. — Vol. 150. — P. 34.
- [69] Gitman D. M., Tyutin I. V., Voronov B. L. *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics: General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials.* — Boston : Birkhäuser Boston, 2012.
- [70] Gallone M., Michelangeli A. *Self-Adjoint Extension Schemes and Modern Applications to Quantum Hamiltonians.* — Cham : Springer, 2023.
- [71] А. Варшалович Д., Н. Москалёв А., К. Херсонский В. *Квантовая теория углового момента.* — Ленинград : Наука, 1975.
- [72] Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. *Квантовая электродинамика.* — Москва : Наука, 1981.
- [73] Гитман Д. М., Фрадкин Е. С., Шварцман Ш. М. *Квантовая электродинамика с нестабильным вакуумом.* — Москва : Наука, 1991.
- [74] Langhoff P. W., Sims J., Corcoran C. T. Stieltjes-integral approximations to photoabsorption and dispersion profiles in atomic helium // *Phys. Rev. A.* — 1974. — Vol. 10. — P. 829–841.
- [75] de Boor C. *A Practical Guide to Splines.* — New York : Springer-Verlag, 2001.
- [76] Shabaev V. M., Tupitsyn I. I., Yerokhin V. A. et al. Dual Kinetic Balance Approach to Basis-Set Expansions for the Dirac Equation // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93. — P. 130405.
- [77] Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type // *Proc. Cambridge Philos. Soc.* — 1947. — Vol. 43. — P. 50.
- [78] Schenk O., Gärtner K. PARDISO // *Encyclopedia of Parallel Computing* / Ed. by David Padua. — Boston : Springer US, 2011. — P. 1458–1464.
- [79] Developer Reference for Intel[®] oneAPI Math Kernel Library for Fortran. — URL: <https://www.intel.com/content/www/us/en/docs/onemkl/developer-reference-fortran/2024-1/onemkl-pardiso-parallel-direct-sparse-solver-iface.html>.

- [80] Mironova D. V., Tupitsyn I. I., Shabaev V. M., Plunien G. Relativistic calculations of the ground state energies and the critical distances for one-electron homonuclear quasi-molecules // *Chem. Phys.* — 2015. — Vol. 449. — P. 10.
- [81] Angeli I., Marinova K. P. Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update // *At. Data Nucl. Data Tables.* — 2013. — Vol. 88. — P. 69.
- [82] Johnson W. R., Soff G. The lamb shift in hydrogen-like atoms, $1 \leq Z \leq 110$ // *At. Data Nucl. Data Tables.* — 1985. — Vol. 33. — P. 405.