Письма в ЖЭТФ, том 19, вып 1, стр. 76 – 80 5 января 1974 г.

ВАРИАЦИОННЫЙ РАСЧЕТ КРИТИЧЕСКОГО РАССТОЯНИЯ МЕЖДУ ЯДРАМИ

М.С.Маринов, В.С.Попов, В.Л.Столин

Проведен вариационный расчет критического расстояния R_c между сталкивающимися ядрами, при котором основной терм квазимолекулы (Z, Z, e) опускается до границы нижнего континуума и начинается спонтанное образование позитронов.

В связи с обсуждением [1 – 4] по спонтанному рождению позитронов в столкновениях тяжелых ядер с зарядами $Z_1 + Z_2 > Z_c \approx 170$ возникла необходимость решения задачи двух центров для уравнения Дирака[1]. Результаты такого расчета весьма существенны для постановки эксперимента, так как сечение рождения позитронов и их энергетический спектр резко зависят от расстояния R между ядрами [3, 6]. Напомним, что критическим расстоянием R_c мы называем то значение R, при котором основной терм квазимолекулы (Z_1, Z_2, e), образующейся при сближении ядер Z_1 и Z_2, опускается до границы нижнего континуума $\epsilon = -1$ (в дальнейшем $\hbar = c = m_e = 1$). Квазистатическое рождение позитронов за счет опускания незаполненного уровня в нижний континуум происходит при сближении ядер на расстояние $R < R_c$.

В физически наиболее важном случае "малой надкритичности" (т.е. при условии $Z_1 + Z_2 - Z_c << Z_c$) все величины, относящиеся к процессу спонтанного рождения позитронов, выражаются через универсальные функции отношения R/R_c, вычисленные в явном виде [6]. Тем самым вычисление R_c в известном смысле завершает теорию явлений, происходящих в сверхкритической области, и позволяет сделать необходимые предсказания для эксперимента.

Однако расчет критического расстояния R_c представляет значительные математические трудности, поскольку переменные в уравнении Дирака с потенциалом $V(\mathbf{r}) = -\alpha[(Z_1/r_1) + Z_2/r_2)]$ не разделяются ни в одной ортогональной системе координат, и получить аналитическое решение задачи представляется здесь невозможным. Для численного счета R_c был предложен вариационный принцип [7, 8]. Ниже излагаются результаты численных расчетов, проведенных вариационным методом.

Как показано в [7, 8], вычисление R_c эквивалентно нахождению минимума функционала

$$J[\psi] = \int d^3r\,[\,|\nabla\psi|^2 + 2\psi^+ U\psi], \tag{1}$$

где $\psi(\mathbf{r})$ – пробная функция (двухкомпонентный спинор), а $U(\mathbf{r})$ – эффективный потенциал в уравнении Дирака при энергии $\epsilon = -1$:

$$U = -\left(V + \frac{1}{2}V^2\right) - \frac{1}{4V}\Delta V + \frac{3}{8V^2}(\nabla V)^2 - \frac{1}{2V}\vec{\sigma}[\nabla V, \mathbf{p}]. \tag{2}$$

Здесь $V(\mathbf{r})$ – потенциал, входящий непосредственно в уравнение Дирака. Для упрощения вычислений положим $Z_1 = Z_2 = Z$ (одинаковые ядра). Тогда из соображений симметрии следует, что точное решение имеет вид:

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \chi_1(\xi, \eta) \\ \chi_2(\xi, \eta)\exp(i\phi) \end{pmatrix}, \tag{3}$$

---

[1] Возможность рождения электрон-позитронных пар из вакуума в сильном электрическом поле давно предсказана в квантовой электродинамике, однако этот эффект еще не обнаружен экспериментально. Спонтанное рождение e^+ в кулоновском поле с зарядом $Z > Z_c$ представляет интерес для проверки уравнения Дирака в сильных внешних полях и свойств физического вакуума [1, 4], а также с точки зрения проверки линейности основных уравнений квантовой электродинамики [5].

где ξ, η, ϕ – эллиптические координаты: $\xi = (r_1 + r_2)/R$, $\eta = (r_1 - r_2)/R$ $(1 \leqslant \xi < \infty, |\eta| \leqslant 1)$. Функции χ_1 и χ_2 отвечают проекциям орбитального момента $\Lambda = 0,1$ на ось квазимолекулы (ось z). При этом χ_1 – четна по η, а χ_2 – нечетна и, кроме того, обращается в нуль на оси z: $\chi_2 \sim z\rho$, где $z = \frac{1}{2} R \xi \eta$, $\rho = \frac{R}{2} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}$ – расстояние до оси z. Для достижений хорошей точности вариационных расчетов R_c необходимо, чтобы пробные функции правильно передавали характер особенности точного решения в сингулярных точках, соответствующих кулоновским центрам[1], а также на бесконечности. В данном случае вид особенностей $\psi(\mathbf{r})$ известен [7] и диктует выбор класса пробных функций.

Вблизи одного из ядер $\xi^2 - \eta^2 << 1$ и $\psi \sim (\xi^2 - \eta^2)^\sigma$, где σ зависит лишь от z. Вдали от ядер $\xi >> |\eta|$, $\psi \sim \exp(-\sqrt{8 Z a R \xi})$. Поэтому удобно перейти к переменным $x = \xi^2 - \eta^2$, $y = \eta^2/(\xi^2 - \eta^2)$ (4) $(0 < x < \infty)$. Будем искать экстремум функционала (1) на классе пробных функций

$$\chi_1 = \phi_1(x) + y\phi_2(x), \quad \chi_2 = R^{-2} \rho z \phi_3(x) . \tag{5}$$

Такой вид пробных функций позволяет вблизи одного из ядер ($x << 1$) учесть поле второго ядра, а вдали от ядер ($x >> 1$) квадрупольную поправку в двухцентровом потенциале.

Подставляя (5) в (1) имеем

$$J[\psi] = \int_0^\infty dx \, (p_{ij} \phi_i' \phi_j' + q_{ij} \phi_i \phi_j + 2 r_{ij} \phi_i' \phi_j). \tag{6}$$

Варьирование $J[\psi]$ по произвольным функциям $\phi_i(x)$ приводит к системе уравнений[2]

$$(p_{ij} \phi_j' + r_{ij} \phi_j)' - r_{ji} \phi_j' - q_{ij} \phi_j = 0. \tag{7}$$

Коэффициенты p, q и r могут быть вычислены в явном виде через элементарные функции. Например,

$$p_{11}(x) = x[(x-1) f_0 + 2x f_1],$$

---

[1] Так как заряд каждого из ядер $Z < 137$, то в кулоновском поле $-Za/r$ отсутствует "падение на центр" и ядра можно считать точечными. Поправка на конечные размеры ядра при $Z = 90 \div 100$ повышает энергию основного терма всего лишь на величину $\Delta\epsilon \sim 1{,}5 \cdot 10^{-3} < 1$ кэв (см. формулу (12) в работе [9]).

[2] По повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Решение системы (7), удовлетворяющее граничным условиям (экспоненциальное убывание на бесконечности и наименьшая сингулярность при $x \to 0$), существует лишь при дискретных значениях R, если $\zeta = 2Z/137$ фиксировано. Максимальный из этих корней определяет зависимость $R_c(\zeta)$ для основного терма.

где

$$f_0 = \ln\frac{1+\sqrt{1+x}}{1+\sqrt{1-x}}, \quad f_1 = \frac{1}{2x}(\sqrt{1+x}-\sqrt{1-x}) - \frac{1}{2}f_0 \quad \text{при } 0 < x \leqslant 1,$$

$$f_0 = \ln\frac{1+\sqrt{1+x}}{\sqrt{x}}, \quad f_1 = \frac{1}{2}\sqrt{1+\frac{1}{x}} - \frac{1}{2}f_0 \qquad \text{при } x \geqslant 1.$$

Особенностью данного метода является то, что функционал $J[\phi]$ варьируется на целом классе функций $\phi_i(x)$, т. е. подбирается пробная функция с бесконечным числом вариационных параметров. При этом зависимость $\psi(\mathbf{r})$ от существенной переменной x, по которой имеется особенность, определяется самими уравнениями (7). Эти обстоятельства обеспечивают хорошую точность расчета R_c. Заметим также, что в силу вариационного принципа истинные значения R_c могут лишь превышать вычисленные нами.

Практически, используемый метод заменяет решение системы двух уравнений в частных производных (для χ_1 и χ_2) краевой задачей для системы обыкновенных дифференциальных уравнений на полуоси $0 < x < \infty$. С вычислительной точки зрения, задача несколько усложняется из-за того, что края интервала являются особыми точками. Был найден способ, позволяющий обойти эту трудность (его описание будет опубликовано отдельно).

ядро	ζ	R_c, ф	E_t, Мэв	σ_0, бн
Th	1,314	43,5	530	30,8
U	1,343	51,3	475	53,8
Pu	1,372	59,8	425	91,0
Cm	1,401	68,7	385	146,0
Cf	1,431	78,0	355	225,0
Fm	1,460	88,0	330	341,0

Результаты численных расчетов приведены в таблице. Здесь $\zeta = 2Z/137$, $E_t = 2(Ze)^2/R_c$ — пороговая энергия падающего ядра, при которой начинается спонтанное рождение позитронов. Полное сечение рождения e^+ имеет вид $\sigma(E, Z) = \sigma_0 f(E/E_t)$, где f — некоторая универсальная функция, вычисленная в [6]; например, $f(2) = 1{,}7 \cdot 10^{-4}$. Множитель σ_0 определяет зависимость сечения от Z. Обратим внимание на быстрый рост σ_0 при увеличении Z от 90 до 100. При этом уменьшается пороговая энергия E_t, в силу чего выгодно ставить опыт с возможно более тяжелыми ядрами. Так как R_c в четыре – пять раз превышает диаметр ядра, то постановка такого эксперимента представляется вполне реальной.

Институт теоретической и экспериментальной физики

Поступила в редакцию
30 ноября 1973 г.

Литература

[1] Я.Б.Зельдович, В.С.Попов. УФН, 105, 403, 1971.

[2] S.S.Gerstein, V.S.Popov. Nuovo Cim. Lett., 6, 593, 1973.

[3] В.С.Попов. ЖЭТФ, 65, 35, 1973.

[4] B.Müller, J.Rafelski, W.Greiner. Zeits. Phys., 257, 62, 183, 1972.

[5] J. Rafelski, W. Greiner, L. P. Fulcher. Nuovo Cim., 13B, 135, 1973.

[6] В.С.Попов. Письма в ЖЭТФ, 18, 53, 1973; ЯФ, 19, 155, 1974.

[7] В.С.Попов. ЯФ, 14, 458, 1971.

[8] А.М.Переломов, В.С.Попов. ТМФ, 14, 18, 1973.

[9] В.С.Попов. ЖЭТФ, 60, 1228, 1971.