

Ю.В. Дубровская, к.ф.-м.н., доц., И.Н. Серга, асс., Н.В. Мудрая, асс.
Одесский государственный экологический университет

НОВЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ ПОДХОД К ВЫЧИСЛЕНИЮ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ ФЕРМИ: ОБЛАСТЬ ФОРМИРОВАНИЯ

Предложен новый численный подход к вычислению интегральной функции Ферми в теории бета распада, базирующийся на КЭД теории возмущений с использованием оптимизированных базисов дирак-фоковских релятивистских функций. Приведена численная оценка области формирования искомой функции.

Ключевые слова: теория возмущений, интегральная функция Ферми, новый релятивистский подход

Введение. К числу актуальных и крайне важных вычислительно-математических задач современной теории бета распада, а также многочисленных смежных проблем в теории ядра относится разработка неэмпирического высокоточного метода (или существенное усовершенствование существующих) определения функции Ферми, интегральной функции Ферми, вероятностей соответствующих β -, γ - и других переходов [1-20]. Существующие методики, как правило, основываются на использовании базисов релятивистских функций типа Дирака-Фока или Дирака-Фока-Слэтера [1-12]. В более простых численных схемах применяются базисы нерелятивистских функций типа Хартри-Фока, Хартри-Фока-Слэтера [5,7]. В последнем методе учет обменных эффектов выполнен с помощью введения локального потенциала, зависящего от плотности- потенциала Слэтера с учетом конечного размера ядра. В ряде работ (см., напр., [5-7]) конечные размеры ядра учитывались в виде поправки к кулоновским расчетам, а для учета экранирования применялись дополнительные таблицы, вычисленные на основе атомного потенциала Хьюльтона, с подгонкой коэффициентов в нем по другим теоретическим оценкам. В наиболее обширных расчетах характеристик вероятностей и периодов полураспада бета процессов использовался метод вычисления релятивистских атомных полей как с приближенным учетом обмена по Хартри-Фоку-Слейтеру (с учетом релятивистских эффектов по теории возмущений) или по Дираку-Фоку-Слэтеру, так и с полным, без какой-либо аппроксимации, учетом обмена методом Дирака-Фока [1-7]. Кроме того, в искомых методах предусмотрена возможность вычисления волновых функций непрерывного спектра как в поле Хартри-Фока-Слэтера, так и в поле Дирака-Фока с полным учетом обмена рассматриваемого электрона непрерывного спектра со всеми электронами атома. Следует также отметить развитые в последнее десятилетие усовершенствованные комплексы программ на основе различных версий Дирака-Фока, включая так называемый метод мега-Дирак-Фок и Дирак-Фок-Брейт (комплексы "Beta", "GRASP", "BERTHA", "QED", "Superatom-ISAN") [10-12, 20]. Хотя в этих новых методах достигнуто определенная минимизация перечисленных выше недостатков, тем не менее, существенно улучшить методы с целью обеспечения достаточно высокой точности расчета различных характеристик атомно-ядерных систем, включая, характеристики бета распада не удалось. И, в частности, речь по-прежнему идет о неполном учете межчастичных корреляций (включая вклад так называемых ядерных остов-поляризационных эффектов, индуцируемых валентными протонами ядра), не полном выполнении принципа калибровочной инвариантности и соответственно недостаточной корректности волновых функций т.д. В данной работе изложен новый численный подход к вычислению интегральной функции Ферми в

теории β -распада, базирующийся на КЭД теории возмущений с использованием оптимизированных дирак-фоковских базисов релятивистских функций [12]. Релятивистские одночастичные эффекты учтены фактически в рамках оптимизированного КЭД приближения, причем в отличие от классического метода Дирака-Фока, используемый в расчетах базис релятивистских волновых функций генерируется с учетом условия калибровочной инвариантности. Для генерации искомого базиса использован фундаментальный принцип минимизации энергетического функционала, представляющего собой вклад поляризаационных диаграмм 4-порядка КЭД теории возмущений, т.е. вклад диаграмм, связанный с обменом продольными фотонами в мнимую часть энергии системы [14].

Релятивистский подход к вычислению функции Ферми. Поскольку детально новый метод излагался ранее (см., напр., [12,18,19]), здесь мы ограничимся лишь основными моментами. Естественно, для вычисления вероятности β -распада следует применять метод теории возмущений. Константа взаимодействия g характеризуется значительной малостью, что позволяет фактически в расчете ограничиваться учетом членов лишь первого порядка, соответствующих прямым переходам из начального состояния в конечное. Вероятность перехода системы из начального состояния $|\xi\rangle$ с энергией E_ξ в некоторое конечное состояние $\langle f|$ с энергией E_f в единицу времени при условии $E_0 = E_f - E_\xi$ определяется следующим стандартным выражением

$$dW_{\xi f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H | \xi \rangle|^2 \left. \frac{d\tilde{N}}{dE} \right|_{E=E_0}. \quad (1)$$

Матричный элемент в формуле (1) определяется видом гамильтониана взаимодействия H_β и волновых функций начального ψ_ξ и конечного ψ_f состояний ядра

$$\langle f | H | \xi \rangle = \int \psi_f H_\beta \psi_\xi d^3r_1 \dots d^3r_A. \quad (2)$$

Величина $\left. \frac{d\tilde{N}}{dE} \right|_{E=E_0}$ определяет плотность конечных состояний системы на единицу энергии. Рассмотрим далее разрешенные переходы. Распределение β -частиц по энергии в этом случае имеет вид [1,3]

$$dW_\beta(E)/dE = \frac{1}{2\pi^3} G^2 \cdot F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 \cdot |M|^2, \quad (3)$$

$$E_0 = 1 + (E_{zp}/m_e c^2),$$

$$p = (E^2 - 1)^{1/2}.$$

Здесь G - константа слабого взаимодействия, E , - полная энергия β -частицы, E_{zp} - граничная энергия β -спектра, $|M|$ -матричный элемент, не зависящий от энергии в случае разрешенных β -переходов.

Интересующие нас функция Ферми F и интегральная функция Ферми f определяются соответственно следующим стандартным образом

$$F(E, Z) = \frac{1}{2p^2} (g_{-1}^2 + f_{+1}^2), \quad (4)$$

$$f(E_0, Z) = \int_1^{E_0} F(E, Z) \cdot E \cdot p \cdot (E_0 - E)^2 dE. \quad (5)$$

Здесь f_{+1} и g_{-1} - релятивистские электронные радиальные волновые функции, которые в разных вариантах теории либо вычисляются на границе сферического ядра с радиусом R_0 (как сделано в таблицах [1]), либо используются значения этих функций в нуле (амплитуды разложения функций в ряд в нуле), как сделано в [5-7]; значки $\pm 1 = \kappa$, где $\kappa = (l-j)/(2j+1)$. В выше приведенных формулах использована следующая нормировка релятивистских радиальных функций f_{κ} и g_{κ} , при которой при больших значениях радиальной переменной:

$$g_i(r) \rightarrow r^{-1} [(E+1)/E]^{1/2} \cdot \sin(pr + \delta_j), \quad (6)$$

$$f_i(r) \rightarrow r^{-1} (v|v) [(E-1)/E]^{1/2} \cdot \cos(pr + \delta_j). \quad (7)$$

Вычисление искомых функций выполнено в оптимизированном приближении Дирака-Фока (ОДФ) [18]. Альтернативные подходы, развитые в работах [8,9], обладают рядом недостатков по сравнению с методом [18]. В отличие от [8,9], в ОДФ использован фундаментальный принцип минимизации энергетического функционала, представляющего собой вклад поляризационных диаграмм 4-порядка КЭД теории возмущений, т.е. вклад диаграмм, связанный с обменом продольными фотонами в мнимую часть энергии системы [18]. В результате соответствующий базис релятивистских функций является калибровочно-инвариантным и оптимизированным. Учет обмена выполнен по стандартной дирак-фоковской методике, т.е. речь идет о полном учете обмена рассматриваемого бета частицы непрерывного спектра со всеми электронами системы. Для определения ядерного потенциала использована известная гауссова модель в варианте [16,18]. Искомое гауссово распределение заряда в атомном ядре описывается следующей функцией

$$\rho(r|R) = (4\gamma^{3/2} / \sqrt{\pi}) \exp(-\gamma r^2), \quad (8)$$

$$\int_0^{\infty} dr r^2 \rho(r|R) = 1,$$

$$\int_0^{\infty} dr r^3 \rho(r|R) = R,$$

где $\gamma = 4\pi / R^2$,

R – эффективный радиус ядра ($R = 1,202 \cdot (Z')^{1/3}$ фм).

Соответствующая система уравнений Дирака-Фока решалась численно методом Рунге-Кутты. Функции непрерывного спектра находились итеративным путем (первоначально в приближении «замороженного» остова). Самосогласование функции непрерывного спектра считалось достигнутым, когда нормированные функции на двух соседних итерациях различались менее чем на $5 \cdot 10^{-4}$ по отношению к их значениям в точке максимума функции. Для разных энергий для достижения необходимой точности требовалось от 3 (при большей энергии) до 10 (при малой энергии) итераций. Вычисление нормирующего множителя проводится с помощью усреднения по периоду осцилляций функции непрерывного спектра. Если эти усредненные нормирующие множители на двух соседних периодах отличались менее, чем на 0,05%, нормирующий множитель полагался равным вычисленному значению на последнем периоде. Для

достижения нормировки с требуемой точностью, уравнение интегрируется до расстояний от ядра, при которых функция непрерывного спектра проходит 5-8 периодов. Интегрирование уравнений ОДФ велось в полулогарифмической шкале, которая выбиралась так, чтобы в асимптотической области приходилось 20-25 точек на один период осцилляции функции. Вблизи ядра шкала была близка к обычной логарифмической шкале. В дальнейшем при вычислении интегралов в них (как это принято при вычислении интегралов от сильно осциллирующих функций) вводился фактор затухания $\exp(-\gamma r)$. Значения γ выбирались таким образом, чтобы была обеспечена требуемая точность ($\sim 0,01\%$).

Результаты расчета и выводы. Приведем далее результаты численного расчета оценки области формирования интегральной функции Ферми $F(E, Z)$. Удобным численным параметром для данной оценки является величина, использованная в ряде работ (см., напр., [5-7,20])

$$y = \int_0^x f(E, Z) E p (E_0 - E)^2 dE / \int_0^{E_0} f(E, Z) E p (E_0 - E)^2 dE .$$

В табл. 1 приведены наши расчетные данные по области формирования интегральной функции Ферми $f(E_0, Z)$ для ряда β -распада, в частности, распадов: $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$, $^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$, $^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$, $^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$, $^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$, $^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$, $^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$.

Таблица 1 - Область формирования y (%) интегральной функции Ферми $f(E_0, Z)$ для β -распада (наш расчет)

E_{cp} , кэВ	β -распад	$x/E_{cp}=0,3$	0,5	0,7	0,9
20,8	$^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$	67	89	99	100
39,4	$^{106}\text{Ru} \rightarrow ^{106}\text{Rh}$	66	88	98	100
65,8	$^{63}\text{Ni} \rightarrow ^{63}\text{Cu}$	65	87	97	100
140,7	$^{155}\text{Eu} \rightarrow ^{155}\text{Gd}$	63	84	96	100
167,4	$^{35}\text{S} \rightarrow ^{35}\text{Cl}$	58	81	95	100
249	$^{33}\text{P} \rightarrow ^{33}\text{S}$	53	78	93	100
257	$^{45}\text{Ca} \rightarrow ^{45}\text{Sc}$	52	77	91	100

Анализ полученных данных (табл. 1) показывает, что для значений энергии, начиная с $x=0,7E_{cp}$ и далее до $x=0,9E_{cp}$ набирается 100% интеграла для функции $f(E_{cp}, Z)$. При значении энергии $x=0,5E_{cp}$ набирается около $\sim 80\%$ интеграла для функции $f(E_{cp}, Z)$. В итоге оказывается, что поправки, существенные для малых значений энергии вылетевшей β - частицы, оказывают влияние на интегральную функцию Ферми.

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за полезные советы и критические замечания.

Список литературы

1. Джелепов Б.С., Зырянова Л.П., Сулов Ю.П. Бета-процессы. Функции для анализа бета-спектров и электронного захвата.- Л.: Наука, 1978. – 473С.
2. Bohr O., Motelsson B. Structure of Atomic Nucleus.- New York: Plenum, 1971.-380P.
3. Rusov V.D., Tarasov V.A., Litvinov D.A. Theory of Beta Processes in Georeactor.-Moscow: URSS, 2008.- 320P
4. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Lovett L. Electron- β -Nuclear Spectroscopy of Atoms and Molecules and Chemical Environment Effect on the β -Decay parameters// Advances in Theory of Atomic and Molecular Systems: Dynamics, Spectroscopy, Clusters and

- Nanostructures. Series: Progress in Theoretical Chem. and Phys. (Berlin, Springer).-2009.- Vol. 20.-P. 125-182.
5. *Behrens H., Janske J.* Landolt-Berstein. New series. Gr.1.V.4.: N-Y, Spriner- 1969.
 6. *Karpeshin F, Trzhaskovskaya M., Gangrskii Y.P.* Resonance Internal Conversion in heavy Ions //JETP.-2004.-Vol.99.-P.286-289.
 7. *Harston M.R., Pyper N.C.* On estimates of probabilities for beta Decay of a Nucleus with capture on electron shells//Phys.Rev.Lett.-1986.-Vol.56.-P.1790-1795.
 8. *Aerts P.J.C., Nieuwpoort W.C.* On the use of gaussian basis sets to solve the Hartree-Fock-Dirac equation. I. Application to one electron atomic systems// Chem. Phys. Lett.-1985.- Vol.113, N2.-P.165-172.
 9. *Dietz K., Hess B.A.* Single particle orbitals for configuration interaction derived from quantum electrodynamics// Phys.Scripta.-1989.-Vol.39.-P.682-688.
 10. *Wilson S.* Handbook on Molecular Physics and Quantum Chemistry.-Chichester: Wiley.-2007.-700P.
 11. *Grant I. P.* Relativistic quantum theory of atoms and molecules.-N.-Y.: Springer, 2007.-286P.
 12. *Глушков А.В.* Релятивистские и корреляционные эффекты в спектрах атомных систем.- Одесса: Астропринт, 2006.- 400С.
 13. *Glushkov A.V.* Energy Approach to Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions// Low Energy Antiproton Phys.-2005.-Vol.796.-P.206-210.
 14. *Glushkov A.V., Ivanov L.N.* Radiation decay of atomic states: atomic residue and gauge noninvariant contributions//Phys.Lett.A.-1992.-V.170.-P.33-37.
 15. *Glushkov A.V., Makarov I.T., Nikiforova E., Pravdin M., Sleptsov I.* Muon component of EAS with energies above 10^{17} eV// Astroparticle Physics.-1995.-Vol.4.-P. 15-22.
 16. *Glushkov A.V., Rusov V.D., Ambrosov S.V., Loboda A.V.* Resonance states of compound super-heavy nucleus and EPPP in heavy nucleus collisions //New Projects and New Lines of research in Nuclear physics. Eds. Fazio G. and Hanappe F. - Singapore : World Scientific, 2003.-P.142-154.
 17. *Glushkov A.V., Dedenko L.G., Pravdin M.I., Sleptsov I.E.* Spatio-temporal structure of the muon disk at $E_0 \geq 5 \times 10^{16}$ eV from EAS array data//JETP.-2004.-Vol.99.-P.123-132.
 18. *Glushkov A.V., Dubrovskaya Yu.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V., Vitavetskaya L.A.* Consistent quantum theory of cooperative muon-nuclear processes // Recent Advances in Theory of Phys. and Chem. Systems. Series: Progress in Theoretical Chem. and Phys. (Berlin, Springer).-2006.-Vol.15.-P.301-328.
 19. *Дубровская Ю.В.* Новый численный подход к вычислению функции Ферми//Вестник Одесского гос. экологического ун-та.-2009.-N7.-P.236-240.
 20. *Band I.M., Trzhaskovskaya M.B., Nestor Jr., C.W., Tikkanen P.O., Raman S.* Dirac-Fock internal conversion coefficients// Atomic Data and Nucl Dat Tables.-2002.-Vol.81.-P.1-334.

Новий чисельний підхід до розрахунку інтегральної функції Фермі: область формування. Дубровська Ю.В., Серга І.М., Мудра Н.В.

Розвинуто новий чисельний підхід до розрахунку функції Фермі в теорії бета розпаду, який базується на КЕД теорії збурень з використанням оптимізованих базисів релятивістських дірак-фоківських функцій. Наведена чисельна оцінка області формування шуканої функції.

Ключові слова: теорія збурень, інтегральна функція Фермі, новий релятивістський підхід

New numerical approach to calculation of the integral Fermi function: region of forming.

Dubrovskaya Yu.V., Serga I.N., Mudraya N.V.

It is proposed a new approach to calculating the Fermi function in beta decay theory, which bases on the QED perturbation theory with using optimized basises of relativistic Dirac-Fock functions. It is given the numerical estimate of the forming region for cited function.

Keywords: perturbation theory, integral Fermi function, new relativistic approach