

Новый метод решения проблемы " $Z > 137$ " и определения уровней энергии водородоподобных атомов

В.П. Незнамов, И.И. Сафронов

"Катастрофа" в решении уравнения Дирака для электрона в поле точечного электрического заряда, возникающая для зарядовых номеров $Z > 137$, устраняется благодаря новому способу учёта конечных размеров ядер. Для этого на границе ядра в численных решениях уравнений для дираковских радиальных волновых функций вводится граничное условие, обнуляющее компоненты электронной плотности тока. В результате для всех ядер Периодической системы энергетические уровни, полученные в численных расчётах, практически совпадают с уровнями энергии в стандартных решениях уравнения Дирака во внешнем поле кулоновского потенциала точечного заряда. Далее для $Z > 105$ расчётные зависимости уровней энергии $E(Z)$ носят плавный и монотонный характер. Нижний энергетический уровень достигает энергии $E = -mc^2$ ("падение" электрона на ядро) при $Z_c = 178$. Предложенный метод учёта конечных размеров ядер может быть использован в численных расчётах уровней энергии многоэлектронных атомов.

PACS numbers: 03.65.Ge, 03.65.Pm, 12.20.-m

DOI: 10.3367/UFNr.0184.201402i.0200

Содержание

1. Введение (200).
 2. Уравнение Дирака в кулоновском поле заряда $(-Ze)$ (201).
 3. Плотность тока электронов. Граничные условия для волновых функций на границе ядер (202).
 4. Результаты численных расчётов по определению энергетического спектра водородоподобных атомов с эффективным учётом конечных размеров ядер (202).
 5. Заключение (204).
- Список литературы (204).

1. Введение

Более чем сто лет назад, в 1913 г., Н. Бор сформулировал постулаты новой квантовой теории. Уже через три года А. Зоммерфельд [1] на основе теории боровских орбит получил формулу тонкой структуры для энергетических уровней водородоподобных атомов

$$E = mc^2 \left(1 + \frac{\alpha_{\text{em}}^2 Z^2}{(n - |\kappa| + \sqrt{\kappa^2 - \alpha_{\text{em}}^2 Z^2})^2} \right)^{-1/2}. \quad (1)$$

Здесь m — масса электрона, c — скорость света, $\alpha_{\text{em}} = e^2/(\hbar c)$ — электромагнитная постоянная тонкой

структуры, Z — порядковый номер ядра, $n = 1, 2, \dots$ — главное квантовое число, κ — квантовое число уравнения Дирака,

$$\kappa = \pm 1 \pm 2 \dots = \begin{cases} -(l+1), & j = l + \frac{1}{2}, \\ l, & j = l - \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (2)$$

где j, l — квантовые числа полного и орбитального момента электрона. В 1928 г. П.А.М. Дирак [2, 3], Ч.Г. Дарвин [4] и В. Гордон [5] получили выражение (1) в результате точного решения уравнения Дирака в кулоновском поле точечного заряда $(-Ze)$.

Формула (1) даёт комплексную величину при

$$Z > \frac{|\kappa|}{\alpha_{\text{em}}} \sim 137|\kappa|. \quad (3)$$

С точки зрения существования реальных ядер в Периодической системе Менделеева, соответствующих выражению (3), интерес представляют состояния электрона с $|\kappa| = 1$, т.е. состояния $1S_{1/2}$ и $2P_{1/2}$. Для этих состояний комплексность уровней энергии в (1) часто называют "катастрофой $Z > 137$ ". Причиной "катастрофы", которая была довольно быстро установлена, является неучёт конечных размеров рассматриваемых ядер.

В 1945 г. И.Я. Померанчук и Я.А. Смородинский [6] рассмотрели атомную систему с потенциалом

$$U = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r_N} & \text{при } r \leq r_N, \\ -\frac{Ze^2}{r} & \text{при } r > r_N, \end{cases} \quad (4)$$

В.П. Незнамов, И.И. Сафронов. Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, просп. Мира 37, 607188 Саров, Нижегородская обл., Российская Федерация
E-mail: neznamov@vniief.ru

Статья поступила 1 ноября 2013 г.

где r_N — радиус ядра, и оценили величину Z_c , при которой нижний энергетический уровень $1S_{1/2}$ -состояния достигает предельного значения $E = -mc^2$:

$$Z_c = 175 \text{ при } r_N = 0,8 \times 10^{-12} \text{ см.} \quad (5)$$

Отсюда следовал важный вывод о том, что в области $Z_c \geq Z > 137$ должна существовать вещественная зависимость $E(Z)$, а "катастрофа" в формуле (1) действительно возникает из-за неучёта конечных размеров ядер.

В 1959 г. Я.Б. Зельдович в работе [7] показал, что изменение кулоновского потенциала в окрестности начала координат слабо влияет на энергетический спектр водородного атома.

Обзор последующих работ, посвящённых структуре водородоподобных атомов при $Z\alpha > 1$, дан в работах [8–10]. В [8] для анализа структуры энергетических уровней, кроме (4), использовался потенциал, соответствующий потенциалу однородно заряженного шара,

$$U_1 = \begin{cases} \frac{Ze^2}{r_N} \left[-\frac{3}{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{r}{r_N} \right)^2 \right] & \text{для } r \leq r_N, \\ -\frac{Ze^2}{r} & \text{для } r > r_N. \end{cases} \quad (6)$$

В работе [11] для потенциала (6) численно рассчитаны энергетические уровни первых девяти состояний ($1S_{1/2}$, $2S_{1/2}$, ..., $3D_{5/2}$) в зависимости от Z . Значение Z_c , определённое в [11], составляет $Z_c = 169$ при $r_N = 9,5 \times 10^{-12}$ см. Данное значение близко к значениям $Z_c = 170-175$, полученным другими исследователями (см. [6, 8]).

К настоящему времени разными авторами предложено более 30 электростатических потенциалов, учитывающих конечное распределение электрического заряда в атомных ядрах. Эти потенциалы используются в разнообразных численных кодах для определения электронной структуры атомов и молекул. Обзор разработанных потенциалов и их применения в численных решениях уравнений Дирака и Шрёдингера проведён в [9] (см. также обзор [10]). В обзорах [9, 10] даны также ссылки на многие работы, посвящённые аналитическому и численному определению электронной структуры атомов и молекул.

Решения уравнений Дирака и Шрёдингера с использованием конечных потенциалов атомного ядра находятся стандартным образом. Сначала рассчитываются волновые функции электронов внутри ядра в поле выбранного электростатического потенциала. Далее значения этих функций на границе ядра приравниваются к аналогичным значениям волновых функций электронов в кулоновском поле. Граничные условия для радиальных волновых функций при $r \rightarrow \infty$ и $r = 0$ определяют энергетический спектр атомных и молекулярных систем.

Согласно [8, 9, 11], использование разных электростатических потенциалов атомных ядер приводит к относительно небольшому изменению (на несколько долей процента) как самих значений уровней энергии, так и их разностей. Эти изменения возрастают с увеличением Z .

В настоящей статье проблема определения энергетического спектра водородоподобных атомов, в том числе для ядер с $Z > 137$, решается на основе нового подхода к численным расчётам уравнения Дирака в кулоновском поле, в котором вводится граничное условие для волновых функций на границе рассматриваемых ядер.

Граничное условие на границе ядер взято по аналогии с таковым в исследованиях возможности существования стационарных связанных состояний в гравитационном поле Шварцшильда [12]. Это условие состоит в обнулении φ -компоненты плотности дираковского тока на границе рассматриваемого ядра, что сводится в кулоновском поле к нулевому значению на границе ядра одной из двух радиальных дираковских функций. При этом расчёты упрощаются — они ведутся лишь для области от $r \rightarrow \infty$ до границы ядра r_N .

Структура статьи следующая. В разделе 2 для полноты изложения приводится уравнение Дирака в кулоновском поле, кратко описывается процедура разделения переменных и приводится система уравнений для радиальных волновых функций. В разделе 3 исследуется поведение компонент вектора плотности дираковского тока и вводится граничное условие для волновых функций на границе ядер. В разделе 4 анализируются результаты численных расчётов энергетических спектров водородоподобных атомов с различными Z . В заключении кратко изложены основные результаты статьи.

2. Уравнение Дирака в кулоновском поле заряда ($-Ze$)

Ниже будем использовать систему единиц $\hbar = c = 1$, сигнатуру

$$g^{\alpha\beta} = \text{diag}[1, -1, -1, -1], \quad (7)$$

4×4 -матрицы Дирака в представлении Дирака–Паули β, α^k , 2×2 -матрицы Паули σ^k , $k = 1, 2, 3$. Рассматриваем стационарный случай, в котором волновую функцию можно записать в виде $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt)$. Уравнение Дирака в кулоновском поле точечного заряда ($-Ze$) в сферической системе координат (r, θ, φ) можно представить в виде

$$E\psi(\mathbf{r}) = \left[\beta m - i\alpha^1 \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) - i\alpha^2 \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cot \theta \right) - i\alpha^3 \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi(\mathbf{r}). \quad (8)$$

Уравнение (8) допускает разделение переменных, если биспинор $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \varphi)$ определить как

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \begin{pmatrix} F(r) \xi(\theta) \\ -iG(r) \sigma^3 \xi(\theta) \end{pmatrix} \exp(im_\varphi \varphi) \quad (9)$$

и использовать следующее уравнение (см., например, [13]):

$$\left[-\sigma^2 \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{2} \cot \theta \right) + i\sigma^1 m_\varphi \frac{1}{\sin \theta} \right] \xi(\theta) = i\kappa \xi(\theta). \quad (10)$$

В выражениях (9), (10) $\xi(\theta)$ — сферические гармоники для спина $1/2$, m_φ — магнитное квантовое число, κ — квантовое число (2); $\xi(\theta)$ можно представить в виде [14]

$$\xi(\theta) = \begin{pmatrix} {}_{-1/2} Y_{j m_\varphi}(\theta) \\ {}_{1/2} Y_{j m_\varphi}(\theta) \end{pmatrix} = (-1)^{m_\varphi+1/2} \sqrt{\frac{1}{4\pi} \frac{(j-m_\varphi)!}{(j+m_\varphi)!}} \times \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \\ -\sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \left(\kappa - m_\varphi + \frac{1}{2} \right) P_l^{m_\varphi-1/2}(\theta) \\ P_l^{m_\varphi+1/2}(\theta) \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где $P_l^{m_\varphi \pm 1/2}(\theta)$ — присоединённые полиномы Лежандра.

В результате разделения переменных мы получаем систему уравнений для вещественных радиальных функций $F(r)$, $G(r)$. Запишем эти уравнения в безразмерных переменных $\varepsilon = E/m$, $\rho = r/l_C$, где $l_C = \hbar/(mc)$ — комптоновская длина волны электрона:

$$\begin{aligned} \frac{dF}{d\rho} + \frac{1+\kappa}{\rho} F - \left(\varepsilon + 1 + \frac{\alpha_{em} Z}{\rho} \right) G &= 0, \\ \frac{dG}{d\rho} + \frac{1-\kappa}{\rho} G + \left(\varepsilon - 1 + \frac{\alpha_{em} Z}{\rho} \right) F &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Если фазу определить соотношением

$$\tan \Phi = \frac{F(\rho)}{G(\rho)}, \quad (13)$$

то энергетический спектр ε_n можно также найти из уравнения для фазы $\Phi = \arctan(F(\rho)/G(\rho)) + k\pi$, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, в виде, предложенном М.А. Вронским [12]:

$$\frac{d\Phi}{d\rho} = \varepsilon + \frac{\alpha_{em} Z}{\rho} + \cos(2\Phi) - \frac{\kappa}{\rho} \sin(2\Phi). \quad (14)$$

Для финитного движения электрона асимптотика решений уравнений (12) при $\rho \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\begin{aligned} F(\rho) &= C_1 \exp(-\rho\sqrt{1-\varepsilon^2}), \\ G(\rho) &= -\sqrt{\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}} F(\rho). \end{aligned} \quad (15)$$

При $\rho \rightarrow \infty$ фаза

$$\Phi = -\arctan \sqrt{\frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}}. \quad (16)$$

3. Плотность тока электронов. Граничные условия для волновых функций на границе ядер

При разделении переменных с целью получения из уравнения (8) уравнений (10), (12) была произведена эквивалентная замена матриц Дирака:

$$\alpha^1 \rightarrow \alpha^3, \quad \alpha^2 \rightarrow \alpha^1, \quad \alpha^3 \rightarrow \alpha^2. \quad (17)$$

Тогда с учётом (9), (11) компоненты дираковской плотности тока выражаются в виде

$$j^r = \psi^+ \alpha^3 \psi = -iF(\rho) G(\rho) [\xi^+(\theta) (\sigma^3 \sigma^3 - \sigma^3 \sigma^3) \xi(\theta)] = 0, \quad (18)$$

$$j^\theta = \psi^+ \alpha^1 \psi = -2F(\rho) G(\rho) [\xi^+(\theta) \sigma^2 \xi(\theta)] = 0, \quad (19)$$

$$j^\varphi = \psi^+ \alpha^2 \psi = 2F(\rho) G(\rho) [\xi^+(\theta) \sigma^1 \xi(\theta)] \neq 0. \quad (20)$$

Равенства (18)–(20) совпадают с результатами, полученными ранее в [15].

Наше граничное условие состоит в обнулении компоненты тока j^φ на границе ядра ρ_N , что сводится к заданию нулевого значения одной из двух волновых функций, $F(\rho_N)$ или $G(\rho_N)$, на границе ядра,

$$F(\rho_N) G(\rho_N) = 0. \quad (21)$$

Граничное условие (21) аналогично условию вблизи "горизонта событий", введённого при численном решении уравнения Дирака в поле Шварцшильда [12].

В результате при значениях гравитационной константы связи $\alpha \approx 1$ в расчётах [12] получены уровни энергии, близкие к уровням энергии в атоме водорода.

4. Результаты численных расчётов по определению энергетического спектра водородоподобных атомов с эффективным учётом конечных размеров ядер

В расчётах размер ядер определялся из соотношений

$$\begin{aligned} r_N &= (0,836 A^{1/3} + 0,57) \times 10^{-13} \text{ см}, \quad A > 9 \quad [16], \\ r_N &= 1,3 \times 10^{-13} A^{1/3} \text{ см}, \quad A < 9, \end{aligned} \quad (22)$$

где A — атомный вес ядра.

Уравнение для фазы (14) решалось неявным методом Рунге–Кутты пятого порядка с контролем размера шага [17]. Использовалась схема Ила [18] для получения трёхстадийного метода Радо ПА.

Из двух возможных вариантов реализации условия (21) выберем, как и в [12], вариант

$$G(\rho_N) = 0. \quad (23)$$

Некоторым основанием для такого выбора является известная малость функции $G(\rho)$ по сравнению с функцией $F(\rho)$ в нерелятивистском приближении уравнения Дирака. Из (23) следует условие для фазы

$$\Phi(\varepsilon, \kappa, z) = k \frac{\pi}{2}, \quad k = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots \quad (24)$$

В таблицах 1–3 приведены значения уровней энергии для атома водорода, $Z = 1$, $A = 1$, полученные при численном решении уравнения (14) с граничными условиями (16), (24) для $\kappa = \pm 1 \pm 2, \pm 3$ и $n = 1–11$. Там же приведены соответствующие значения энергии, полученные из формулы (1), и относительные отклонения δ

Таблица 1. Уровни энергии атома водорода для $S_{1/2}$ - и $P_{1/2}$ -состояний ($\kappa = \pm 1$)

n	$1 - \varepsilon_{an}$	$1 - \varepsilon_{num}$	$\delta, \%$
1*	$2,6640 \times 10^{-5}$	$2,6641 \times 10^{-5}$	–0,004
2	$6,6600 \times 10^{-6}$	$6,6602 \times 10^{-6}$	–0,003
3	$2,9600 \times 10^{-6}$	$2,9601 \times 10^{-6}$	–0,003
4	$1,6650 \times 10^{-6}$	$1,6651 \times 10^{-6}$	–0,006
5	$1,0656 \times 10^{-6}$	$1,0656 \times 10^{-6}$	0,000
6	$7,4000 \times 10^{-7}$	$7,3999 \times 10^{-7}$	0,001
7	$5,4367 \times 10^{-7}$	$5,4367 \times 10^{-7}$	0,000
8	$4,1625 \times 10^{-7}$	$4,1624 \times 10^{-7}$	0,002
9	$3,2889 \times 10^{-7}$	$3,2888 \times 10^{-7}$	0,002
10	$2,6640 \times 10^{-7}$	$2,6639 \times 10^{-7}$	0,003
11	$2,2016 \times 10^{-7}$	$2,2015 \times 10^{-7}$	0,006

* Для $\kappa = +1$ решения нет.

Таблица 2. Уровни энергии атома водорода для P_{3/2}- и D_{3/2}-состояний (κ = ±2)

n	1 - ε _{an}	1 - ε _{num}	δ, %
2*	6,6599 × 10 ⁻⁶	6,6585 × 10 ⁻⁶	0,022
3	2,9600 × 10 ⁻⁶	2,9603 × 10 ⁻⁶	-0,009
4	1,6650 × 10 ⁻⁶	1,6653 × 10 ⁻⁶	-0,016
5	1,0656 × 10 ⁻⁶	1,0656 × 10 ⁻⁶	0,004
6	7,3999 × 10 ⁻⁷	7,3997 × 10 ⁻⁷	0,004
7	5,4367 × 10 ⁻⁷	5,4367 × 10 ⁻⁷	0,001
8	4,1625 × 10 ⁻⁷	4,1622 × 10 ⁻⁷	0,007
9	3,2889 × 10 ⁻⁷	3,2887 × 10 ⁻⁷	0,006
10	2,6640 × 10 ⁻⁷	2,6637 × 10 ⁻⁷	0,012
11	2,2016 × 10 ⁻⁷	2,2017 × 10 ⁻⁷	-0,001

* Для κ = +2 решения нет.

Таблица 3. Уровни энергии атома водорода для D_{5/2}- и F_{5/2}-состояний (κ = ±3)

n	1 - ε _{an}	1 - ε _{num}	δ, %
3*	2,9600 × 10 ⁻⁶	2,9597 × 10 ⁻⁶	0,011
4	1,6650 × 10 ⁻⁶	1,6652 × 10 ⁻⁶	-0,010
5	1,0656 × 10 ⁻⁶	1,0657 × 10 ⁻⁶	-0,006
6	7,3999 × 10 ⁻⁷	7,3997 × 10 ⁻⁷	0,004
7	5,4367 × 10 ⁻⁷	5,4367 × 10 ⁻⁷	0,000
8	4,1625 × 10 ⁻⁷	4,1622 × 10 ⁻⁷	0,007
9	3,2889 × 10 ⁻⁷	3,2887 × 10 ⁻⁷	0,006
10	2,6640 × 10 ⁻⁷	2,6637 × 10 ⁻⁷	0,012
11	2,2016 × 10 ⁻⁷	2,2017 × 10 ⁻⁷	-0,001

* Для κ = +3 решения нет.

результатов численных решений от аналитических значений (1). Видно хорошее согласие численных и аналитических значений уровней энергии с точностью до нескольких сотых процента ($\delta = (\epsilon_{num} - \epsilon_{an})/\epsilon_{an} \lesssim 10^{-4}$). В пределах указанной точности в расчётах воспроизводится характерное для формулы тонкой структуры (1) вырождение энергетических уровней с одинаковым полным моментом j (с одинаковым значением |κ|).

Далее уровни энергии одноэлектронных атомов были вычислены для следующих ядер: В (Z = 5, A = 10), Ne (Z = 10, A = 21), Mn (Z = 25, A = 5), Sn (Z = 50, A = 119), U (Z = 92, A = 238) и ядра с Z = 104, A = 261. Для гипотетических ядер с Z > 104 отношение A/Z бралось равным 2,9.

Результаты расчётов для трёх нижних уровней для значений κ = ±1, ±2, ±3 представлены на рис. 1–6. Там же для сравнения приведены некоторые результаты численных расчётов [11] и аналитические значения из формулы тонкой структуры (1). В расчётах [11] радиусы ядер определялись из соотношения $r_N = 1,2 \times 10^{-13} \times A^{1/3}$ см.

Приведённые данные показывают, что аналитические значения, полученные по формуле (1), находятся в хо-

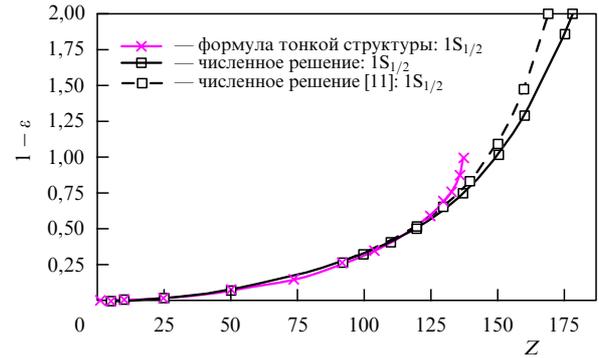


Рис. 1. Зависимости E(Z) для 1S_{1/2}-состояния.

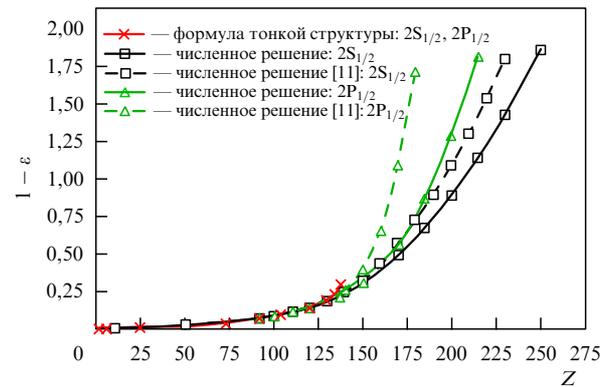


Рис. 2. Зависимости E(Z) для 2S_{1/2}- и 2P_{1/2}-состояний.

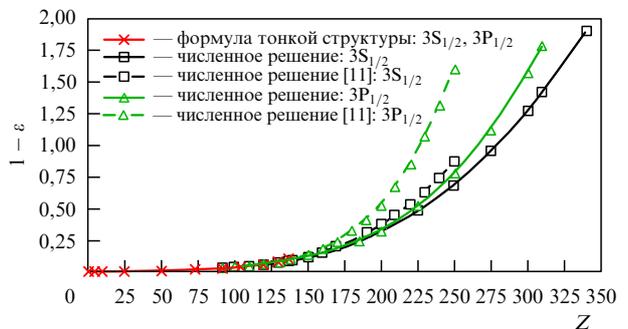


Рис. 3. Зависимости E(Z) для 3S_{1/2}- и 3P_{1/2}-состояний.

рошем согласии с расчётными величинами уровней энергии для всех известных ядер Периодической системы. При κ = -1 (1S_{1/2}) сколько-нибудь заметное отклонение для нижнего уровня (> 1 %) наступает при Z > 105 (см. рис. 1). Расчётные зависимости E(Z) носят плавный и монотонный характер. Нижний уровень 1S_{1/2} достигает значения ε = -1 ("падение" электрона на ядро) при Z_c ≈ 178.

После достижения уровня 1S_{1/2} нижнего континуума ε = -1 при Z > 178 необходимо использовать вместо методов одночастичной квантовой механики методы многочастичной квантовой теории поля [8].

Зависимости E(Z) для Z > 178 приведены на рис. 2–4 из методических соображений. Эти зависимости не имеют особенностей и качественно подобны зависимости E(Z) для нижнего энергетического уровня 1S_{1/2}.

Из рисунков 2–4 видно, что при Z > 137 происходит снятие вырождения энергетических уровней с одинако-

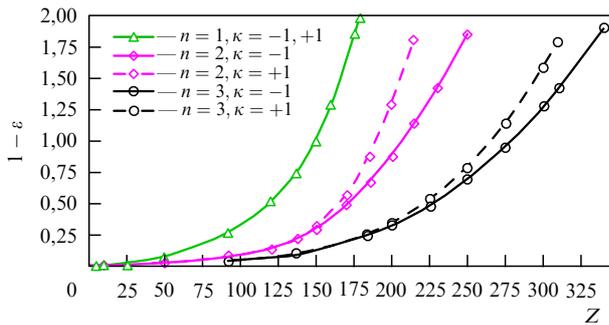


Рис. 4. Расчётные зависимости $E(Z)$ для состояний с $n = 1, 2, 3$ и $\kappa = \pm 1$.

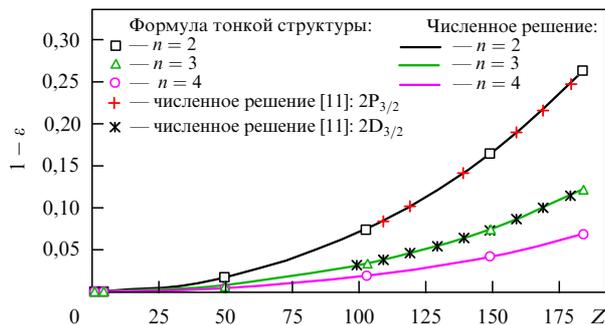


Рис. 5. Зависимости $E(Z)$ для $P_{3/2}$ - и $D_{3/2}$ -состояний при $n = 2, 3, 4$.

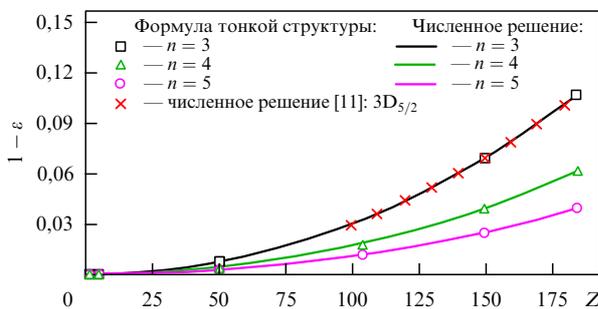


Рис. 6. Зависимости $E(Z)$ для $D_{5/2}$ - и $F_{5/2}$ -состояний при $n = 3, 4, 5$.

выми j в соответствии с результатами, полученными в [8]. Чем больше значения n и κ , тем при больших величинах Z начинают различаться уровни энергии с одинаковыми j . Как видно из рис. 5, 6, уровни $P_{3/2}$, $D_{3/2}$ и $D_{5/2}$, $F_{5/2}$ совпадают при увеличении значений Z вплоть до $Z_c = 178$. Для этих уровней также видно хорошее согласие с формулой тонкой структуры.

Эффективный учёт конечных размеров ядер с использованием граничного условия для дираковских волновых функций (21), (24) приводит при $Z \leq 105$ практически к совпадению уровней энергии с таковыми, полученными из формулы тонкой структуры (1), а также рассчитанными в работах [8, 11] с использованием эффективных потенциалов ядер (4), (6). Это свидетельствует об отсутствии заметного влияния на энергетический спектр величины вероятности пребывания электрона в ядре (наибольшая вероятность — в расчётах с использованием сингулярного кулоновского потенциала, меньшая — в расчётах с использованием конечных электростати-

ческих потенциалов ядер, нулевая вероятность — в расчётах с использованием граничного условия (21)).

Для $Z > 105$ зависимости $E(Z)$, согласно нашим результатам, носят менее резкий характер (см. рис. 1–6). Это приводит к несколько большему значению, $Z_c = 178$, по сравнению со значением $Z_c \approx 170$ в [8, 11]. Различие в зависимостях $E(Z)$ уменьшается с увеличением квантовых чисел n и κ .

По мере возрастания Z одночастичное квантовомеханическое рассмотрение оказывается всё более приближённым. Становятся необходимыми учёт эффектов квантовой электродинамики и привлечение к рассмотрению многочастичной релятивистской квантовой теории тяжёлых и сверхтяжёлых ядер. В связи с этим величину $Z_c = 178$, полученную нами с граничным условием (21), обеспечивающим нулевую вероятность пребывания электрона внутри ядра, следует рассматривать в качестве верхнего предела истинного значения Z_c . Условия, выполнение которых необходимо в будущих экспериментах по определению Z_c , сформулированы в обзоре [10].

5. Заключение

Проведённые расчёты по определению уровней энергии водородоподобных атомов с эффективным учётом (21) конечных размеров ядер позволяют сделать следующие выводы:

1. Результаты расчётов с $Z = 1$, $A = 1$ с точностью $\sim 10^{-4}$ воспроизводят формулу тонкой структуры атома водорода (1).

2. Результаты расчётов хорошо согласуются с формулой тонкой структуры для всех известных ядер Периодической системы. Для нижнего уровня сколько-нибудь заметное отклонение наступает при $Z > 105$.

3. Расчётные зависимости $E(Z)$ носят плавный и монотонный характер.

4. Нижний уровень $1S_{1/2}$ достигает значения $\varepsilon = -1$ ($E = -mc^2$ — "падение" электрона на ядро) при $Z_c = 178$.

5. Для учёта конечных размеров ядер хорошо работающее в одноэлектронном случае граничное условие (21) можно легко применить в расчётах многоэлектронных атомов, использующих решения уравнения Дирака для радиальных волновых функций.

Благодарности. Авторы благодарят своих коллег П.П. Физиева, М.А. Вронского и А.А. Садового за плодотворные дискуссии, а также А.Л. Новосёлову за большую техническую помощь в подготовке статьи к публикации.

Список литературы

1. Sommerfeld A *Ann. Phys.* **51** 1 (1916)
2. Dirac P A M *Proc. R. Soc. Lond. A* **117** 610 (1928)
3. Dirac P A M *Proc. R. Soc. Lond. A* **118** 351 (1928)
4. Darwin C G *Proc. R. Soc. Lond. A* **118** 654 (1928)
5. Gordon W Z. *Phys.* **48** 11 (1928)
6. Pomeranchuk I, Smorodinsky J J. *Phys. USSR* **9** 97 (1945)
7. Зельдович Я Б *ФТТ* **1** 1637 (1959) [Zel'dovich Ya B *Sov. Phys. Solid State Phys.* **1** 1497 (1960)]
8. Зельдович Я Б, Попов В С *УФН* **105** 403 (1971) [Zeldovich Ya B, Popov V S *Sov. Phys. Usp.* **14** 673 (1972)]
9. Andrae D *Phys. Rep.* **336** 413 (2000)
10. Ruffini R, Vereshchagin G, Xue S-S *Phys. Rep.* **487** 1 (2010)
11. Pieper W, Greiner W Z. *Phys.* **218** 327 (1969)
12. Vronsky M A et al., arxiv:1301.7595

13. Brill D R, Wheeler J A *Rev. Mod. Phys.* **29** 465 (1957)
14. Dolan S R, Ph.D. Thesis (Cambridge: Univ. of Cambridge, 2006)
15. Colijn C, Vrscaj E R *Found. Phys. Lett.* **16** 303 (2003)
16. Johnson W R, Soff G *Atom. Data Nucl. Tabl.* **33** 405 (1985)
17. Hairer E, Wanner G *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems* 2nd rev. ed. (Berlin: Springer-Verlag, 1996)
18. Ehle B L, Research Report CSRR 2010 (Ontario, Canada: Dept. AACS, Univ. of Waterloo, 1969)

A new method for solving the $Z > 137$ problem and determining hydrogen-like energy levels

V.P. Neznamov, I.I. Safronov

Russian Federal Nuclear Center — All-Russian Scientific Research Institute of Experimental Physics,
prosp. Mira 37, 607188 Sarov, Nizhny Novgorod region, Russian Federation
E-mail: neznamov@vniief.ru

A new method for including finite nuclear size effects is suggested to overcome the " $Z > 137$ catastrophe" encountered in solving the Dirac equation for an electron in the field of a point charge Ze . In this method, the boundary condition for the numerical solution of the equations for the Dirac radial wave functions is taken to be that the components of the electron current density are zero at the boundary of the nucleus. As a result, for all of the nuclei of the periodic table the calculated energy levels practically coincide with those obtained in a standard way from the Dirac equation for a Coulomb point charge potential. For $Z > 105$, the calculated energy level functions $E(Z)$ prove to be smooth and monotonic. The ground energy level reaches $E = -mc^2$ (i.e., the electron drops into the nucleus) at $Z_c = 178$. The proposed method for accounting for the finite size of nuclei can be useful in numerically calculating the energy levels of many-electron atoms.

PACS numbers: 03.65.Ge, 03.65.Pm, **12.20. - m**

DOI: 10.3367/UFNr.0184.201402i.0200

Bibliography — 18 references

Received 1 November 2013

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **184** (2) 200–205 (2014)

Physics – Uspekhi **57** (2) (2014)