Вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. № 4. – 1999

ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ ДЛЯ РЕЛЯТИВІСТСЬКОЇ ЗАДАЧІ ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ В НАБЛИЖЕНІ ОБ'ЄДНАНОГО АТОМА

А. В. Катернога, В. Ю. Лазур, С. І. Мигалина

Ужгородський державний університет, 294000, Ужгород, вул. Волошина, 54

Розглянуто квантово-механічну задачу двох кулонівських центрів для рівняння Дірака. Побудовано асимптотичні розклади енергії цієї задачі при малих міжцентрових відстанях за теорією збурень.

Вступ

Нерелятивістська задача про рух електрона в полі двох кулонівських центрів із зарядами Z_1 і Z_2 розташованих на віддалі R один від одного (так звана задача Z_1eZ_2), одна з нестаріючих задач квантової механіки. Вперше ця задача була поставлена в двадцяті роки, як задача про рівні енергії (терми) молекулярного іона водню H_2^+. Основні результати, отримані при дослідженні задачі Z_1eZ_2, викладені в книзі [1].

Спочатку модель Z_1eZ_2 застосовувалась в основному в квантовій хімії для описання і розрахунків електронної структури простих двоатомних молекул, а також деяких дефектів у твердих тілах. У відповідності з цими застосуваннями цікавились, головним чином, нижніми термами при міжцентрових віддалях порядку рівноважних, тобто до десятка атомних одиниць. Пізніше ця важлива квантово-механічна задача з успіхом використовувалась в якості модельного наближення і при дослідженні елементарних процесів зіткнення повільних атомних частинок: збудження, перезарядки і т.д. (див., наприклад, [4] і наведені там посилання). В якості прикладів більш пізнього розвитку цього напрямку можна рекомендувати книги [5,6]. Інше застосування задачі Z_1eZ_2 в теорії зіткнень більш традиційне і зводиться до використання модельних функцій суцільного спектра для аналізу розсіяння електронів на молекулах, а також різних процесів, які призводять до іонізації молекул [1-6].

У зв'язку із вказаними застосуваннями задачі Z_1eZ_2 тепер нагромаджено широкий матеріал, отриманий шляхом розв'язання цієї задачі на ЕОМ і за допомогою асимптотичних методів для різних граничних випадків. Були проведені нові розрахунки, які за об'ємом і точністю значно перевищують попередні, вивчалися алгебраїчні властивості задачі, побудовані нові асимптотичні розклади (див. [1]). У зв'язку з прикладними задачами атомної фізики серія праць [14,15] була присвячена спеціальному випадку задачі Z_1eZ_2 із сильно відрізняючимися зарядами Z_1 і Z_2. Разом з тим досягнуті на цьому шляху успіхи, поряд із самою логікою розвитку фізики атомних зіткнень, в останні роки привернули увагу до вивчення квантової структури і динаміки утворення надважких квазіатомів і квазімолекул. Потрібно сказати, що в рамках цієї проблематики в багатьох лабораторіях світу (див. [7]), які мають прискорювачі важких іонів, проводиться програма експериментальних досліджень з верифікації фундаментальних аспектів квантової електродинаміки в області сильних зовнішніх полів, джерелом яких є ядра важких елементів, що стикаються. Вдалося дослідити утворення позитронів в зіткненнях важких атомів, докладно вивчаються спектри δ-електронів, γ-квантів і парної конверсії γ-квантів, що супроводжують взаємодію таких ядер, як U+Cm, U+Pd, Pb+Th, Pb+Pb, U+U. В центрі уваги теоретичних і експериментальних робіт цього напрямку є доведення спонтанного народження позитронів у надкритичному полі квазіатома, що утворюється при зближенні двох важких іонів з сумарним атомним номером $Z_1 + Z_2 \rangle 173$. В подібних системах електрони рухаються з великими швидкостями і являються повністю релятивіськими. Тому послідовна теорія таких систем повинна будуватися на релятивістській основі з урахуванням того, що релятивістські ефекти складають вже немалі поправки, а суттєво визначають порядки спектральних характеристик. Підхід, що базується на гамільтоніані Брейта-Паулі, тут, очевидно, стає непридатним. Все це, разом взяте, привернуло в останні роки увагу до вивчення задачі двох кулонівських центрів в рамках рівняння Дірака. Ця задача, яку зазвичай називають релятивістською задачею двох кулонівських центрів, є необхідним проміжковим етапом при розробці адіабатичної теорії процесів з перерозподілом частинок у повільних атомних зіткненнях з участю важких багатозарядних іонів. Взагалі широкий спектр реакцій з важкими іонами представляє широке поле для застосувань релятивістської задачі Z_1eZ_2 Ця задача буде актуальною і в майбутньому, особливо у зв'язку з перспективами розвитку джерел і техніки прискорення важких багатозарядних іонів [6].

Однак на даний час існує глибока асиметрія в розвитку теорії і методів розв'язування релятивістської і нерелятивістської задач двох кулонівських центрів Z_1eZ_2. Багаточисленним ефективним асимптотичним і чисельним методам розв'язування нерелятивістської задачі Z_1eZ_2, можна протиставити лише окремі приклади розгляду релятивістської задачі Z_1eZ_2 за допомогою наближених методів (ВКБ, діагоналізації, варіаційного, Гальоркіна) [8-10]; більш докладну бібліографію можна знайти, наприклад, в роботі [11].

Правда, нещодавно асимптотичними методами був детально проаналізований дискретний спектр релятивістської задачі Z_1eZ_2 при великих міжцентрових відстанях R [11]. Зокрема, одержані в [11] для величини обмінного розщеплення термів асимптотичні формули вказують на суттєву роль релятивістських ефектів навіть при невеликих значеннях зарядів ядер Z_1, Z_2.Однак, протилежний граничний випадок $R \langle\langle 1$, не менш важливий з фізичної точки зору, залишився в цілому не розібраним. Тому в даній роботі зроблено спробу частково заповнити цю прогалину.

Складність розгляду релятивістської задачі Z_1eZ_2 пов'язана з тим, що на відміну від рівняння Шредінгера, рівняння Дірака з потенціалом двох кулонівських центрів не допускає повного відокремлення змінних у сфероїдальних координатах, що суттєво ускладнює його розв'язання засобами сучасної математики. В зв'язку з цим особливого значення набувають строгі методи побудови наближених розв'язків релятивістської задачі Z_1eZ_2, які не використовують відокремлення змінних в рівнянні Дірака. Одним з таких важливих методів є так звана теорія збурень, яка з успіхом використовувується в проведеному нижче дослідженні.В основі цього дослідження лежать ті ж ідеї і та ж техніка обчислень, що і в нерелятивістській задачі Z_1eZ_2 [1]. В якості нульового наближення використовуються енергії і хвильові функції релятивістського об'єднаного атома із зарядом ядра $Z = Z_1 + Z_2$. В результаті проведених розрахунків отримано асимптотичні формули для рівнів енергії (термів) системи Z_1eZ_2 при $R \to 0$ з точністю до членів $O(R^3)$. Одержані формули можуть бути використані, зокрема, для побудови одноелектронних релятивістських корреляційних діаграм важких і надважких квазімолекул в області між границями об'єднаного і роз'єднаних атомів.

Асимтотична поведінка термів релятивістської двоцентрової задачі в границі об'єднаного атома

Коли сумарний заряд кулонівських центрів $Z = Z_1 + Z_2$ позитивний і міжцентрова відстань R прямує до нуля, можна розглядувати задачу $Z_1 e Z_2$ за теорією збурень. Діраковський гамільтоніан задачі $Z_1 e Z_2$ має вигляд $(m_e = e = \hbar = 1)$:

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + c^2\beta - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, \qquad (1.1)$$

тут r_i-віддаль від електрона до відповідного ядра (i=1,2); $Z_{1,2}$-заряди кулонівських центрів у полі яких рухається електрон; $\hat{\vec{p}} = -i\vec{\nabla}_r$-оператор імпульсу електрона; с –швидкість світла.

У стандартному зображенні матриці $\vec{\alpha}$, β мають вигляд:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}; \ \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \qquad (1.2)$$

де $\vec{\sigma}$-вектор, компонентами якого є матриці Паулі, а 0 та I -нульова та одинична матриці 2×2. Розіб'ємо повний гамільтоніан двоцентрової задачі $\hat{H}$ на гамільтоніан нульового наближення $\hat{H}^{UA}$ і збурення $\hat{W}$:

$$\hat{H} = \hat{H}^{UA} + \hat{W}. \qquad (1.3)$$

В якості $\hat{H}^{UA}$ виберемо діраковський гамільтоніан об'єднаного релятивістського атома /united atom/:

$$\hat{H}^{UA} = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + c^2\beta - \frac{Z}{r_0}, \qquad (1.4)$$

який знаходиться на осі oz в точці z_0:

$$z_0 = \left(-\frac{1}{2} + \frac{Z_2}{Z}\right)R = \left(\frac{1}{2} - \frac{Z_1}{Z}\right)R. \qquad (1.5)$$

Точка z_0 ділить міжцентрову віддаль на два відрізки:

$$R_1 = \frac{Z_2}{Z}\cdot R, \quad R_2 = \frac{Z_1}{Z}\cdot R. \qquad (1.6)$$

Побудуємо сферичну систему координат r_0, θ_0, φ_0, початок якої знаходиться в точці $(0,0,z_0)$, а кут θ_0 відраховується від осі oz, направленої від центра Z_1 до центра Z_2.

Перейдемо до побудови незбуреної хвильової функції об'єднаного атома. Власні стани оператора $\hat{H}^{UA}$ характеризуються набором сферичних квантових чисел n, j, l, m, де n -головне квантове число; j і l -повний і орбітальний моменти електрона; m -проекція j випадку центрально-симетричного поля; для даних j і m існують два типи розв'язків, які відрізняються парністю $\mathrm{P} = (-1)^l$, замість якої будем використовувати орбітальний момент $l = j \pm \frac{1}{2}$. Розв'язки рівняння Дірака для потенціалу двох кулонівських центрів при неперервнму зближенні ядер ($R \to 0$) повинні переходити у відповідні розв'язки для центрально-симетричної кулонівської задачі. Тому в задачі двох центрів слід розрізняти два типи термів і відповідно цьому два типи розв'язків рівняння Дірака, а саме ті, які при неперервному зближенні ядер Z_1 і Z_2 переходять в стани з $j = l + \frac{1}{2}$ і $j = l - \frac{1}{2}$ для об'єднаного атома із зарядом ядра $Z = Z_1 + Z_2$. Відповідно до цього власні функції оператора $\hat{H}^{UA}$ для обох типів розв'язків запишемо (в стандартному зображенні) у вигляді [12]:

$$\Psi^{UA}_{n\,j\,l\,m}(\vec{r}_0) = \begin{pmatrix} g_{n\,j\,l}(r_0)\cdot\Omega_{j\,l\,m}(\theta_0,\varphi_0) \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} f_{n\,j\,l}(r_0)\cdot\Omega_{j\,l'\,m}(\theta_0,\varphi_0) \end{pmatrix}, \ l = j \pm \frac{1}{2}, \ l' = 2j - l = l \mp \frac{1}{2}, \qquad (1.7)$$

де $\Omega_{j\,l\,m}$-кульові спінори [12]. Раліальні функції $g_{n\,j\,l}$ і $f_{n\,j\,l}$ є відповідно великими і малими компонентами діраковських біспінорних хвильовоих функцій. Випишемо їх явні вирази [13]:

$$g_{n\,j\,l}(r_0) = \frac{\sqrt{\Gamma(2\gamma+n'+1)}}{\Gamma(2\gamma+1)\sqrt{n'!}} \cdot \sqrt{\frac{1+\varepsilon}{4N(N-\chi)}} \cdot \left(\frac{2Z}{N}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z\cdot r_0}{N}} \left(\frac{2Zr_0}{N}\right)^{\gamma-1} \times$$
$$\times\left[-n'F\left(-n'+1,2\gamma+1,\frac{2Zr_0}{N}\right)+(N-\chi)F\left(-n',2\gamma+1,\frac{2Zr_0}{N}\right)\right], \qquad (1.8а)$$

$$f_{n\,j\,l}(r_0) = -\frac{\sqrt{\Gamma(2\gamma+n'+1)}}{\Gamma(2\gamma+1)\sqrt{n'!}} \cdot \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{4N(N-\chi)}} \cdot \left(\frac{2Z}{N}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z\cdot r_0}{N}} \left(\frac{2Zr_0}{N}\right)^{\gamma-1} \times$$
$$\times\left[n'F\left(-n'+1,2\gamma+1,\frac{2Zr_0}{N}\right)+(N-\chi)F\left(-n',2\gamma+1,\frac{2Zr_0}{N}\right)\right], \qquad (1.8б)$$

тут використані наступні позначення:

$$\chi = \begin{cases} -(l+1), & j = l+\frac{1}{2}, \\ l, & j = l-\frac{1}{2}, \end{cases} \qquad N = \sqrt{n^2 - 2n'\left(j+\tfrac{1}{2}-\gamma\right)},$$
$$\varepsilon = \left[1+\left(\frac{\alpha_0 Z}{n'+\gamma}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}}, \qquad (1.9)$$
$$\gamma = \sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 - (\alpha_0 Z)^2}, \qquad n' = n - j - \frac{1}{2}.$$

В цій формулі $\alpha_0 = \frac{1}{c} \approx \frac{1}{137{,}037}$ - постійна тонкої структури.

Власні значення оператора $\hat{H}^{UA}$ описуються відомою формулою Зоммерфельда [12], яку в наших позначеннях можна подати у вигляді:

$$E^{UA}_{n\,j} = \varepsilon \cdot c^2, \qquad (1.10)$$

Так як спектр оператора $\hat{H}^{UA}$ вироджений по l і m , то для застосування теорії збурень перш за все потрібно побудувати правильні функції нульового наближення, на яких матриця оператора збурення $\hat{W}$ діагональна. Покажемо, що матриця $\left\|W^{n\,j\,l'\,m'}_{n\,j\,l\,m}\right\|$ оператора збурення діагональна на функціях об`єднаного атома (1.7)-(1.9), якщо z_0 означено умовою (1.5). Визначемо матричні елементи оператора збурення системи

$$\hat{W} = \frac{Z}{r_0} - \frac{Z_1}{\left|\vec{r}_0+\vec{R}_1\right|} - \frac{Z_2}{\left|\vec{r}_0-\vec{R}_2\right|}. \qquad (1.11)$$

Для цього скористаємось розкладом $\hat{W}$ в ряд за поліномами Лежандра:

$$\hat{W}=\frac{Z}{r_0}-\begin{cases}Z_1\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l R_1^l r_0^{-l-1}P_l(\cos\theta_0), & r_0\rangle|\vec{R}_1|\\ Z_1\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l R_1^{-l-1}r_0^l P_l(\cos\theta_0), & r_0\langle|\vec{R}_1|\end{cases}- \\ -\begin{cases}Z_2\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l R_2^l r_0^{-l-1}P_l(\cos\theta_0), & r_0\rangle|\vec{R}_2|\\ Z_2\sum_{l=0}^{\infty}(-1)^l R_2^{-l-1}r_0^l P_l(\cos\theta_0), & r_0\langle|\vec{R}_2|\end{cases}. \qquad (1.12)$$

Коефіцієнт при $r_0^{-2}P_1$ для $r_0\rangle\max\{|\vec{R}_1|,|\vec{R}_2|\}$ рівний $-Z_1R_1+Z_2R_2$ і обертається в нуль внаслідок умови (1.6). Оцінка всіх радіальних і кутових інтегралів з функціями (1.7)-(1.9) від наступного члена розкладу в (1.12) показує, що матриця $\left\|W_{n\ j\ l\ m}^{n\ j\ l'\ m'}\right\|$ діагональна при $R\to 0$ по відношенню до кожної групи взаємовироджених станів, тобто

$$W_{n\ j\ l\ m}^{n\ j\ l'\ m'}=\int\Psi_{n\ j\ l\ m}^{UA*}(\vec{r}_0)\cdot\hat{W}\cdot\Psi_{n\ j\ l'\ m'}^{UA}(\vec{r}_0)d\vec{r}_0=\delta_{l\ l'}\delta_{m\ m'}\left[W_{n\ j\ l\ m}^{n\ j\ l\ m}\right]_2+O(R^3). \qquad (1.13)$$

Головний член $\left[W_{n\ j\ l\ m}^{n\ j\ l\ m}\right]_2$ розкладу діагонального матричного елемента оператора $\hat{W}$ визначається розкладом (1.12) для $r_0\rangle\max\{|\vec{R}_1|,|\vec{R}_2|\}$, в якому інтегрування по r_0 ведеться від нуля:

$$\left[W_{n\ j\ l\ m}^{n\ j\ l\ m}\right]_2=-(Z_1R_1^2+Z_2R_2^2)\cdot\int\left|\Psi_{n\ j\ l\ m}^{UA}(\vec{r}_0)\right|^2 r_0^{-3}P_2(\cos\theta_0)d\vec{r}_0= \\ =-\frac{D\cdot\left[A+(N-\chi)^2C-\varepsilon(N-\chi)B\right]}{N-\chi},$$

$$l=j\pm\frac{1}{2}. \qquad (1.14)$$

В (1.14) використані позначення:

$$A=n'(2\gamma+n')\left[3n'^2+3n'(2\gamma-1)+(2\gamma+1)(\gamma-2)+3\right], \qquad (1.15а)$$

$$B=6n'(2\gamma+n')(\gamma+n'), \qquad (1.15б)$$

$$C=3n'^2+3n'(2\gamma+1)+(2\gamma+1)(\gamma+1) \qquad (1.15в)$$

$$D=\frac{Z_1Z_2(ZR)^2}{4N^4\gamma(\gamma+1)(\gamma-1)(2\gamma+1)(2\gamma-1)}\cdot\frac{3m^2-j(j+1)}{j(j+1)},$$

$$l=j\pm\frac{1}{2}, \qquad (1.15г)$$

Формули (1.10), (1.14) визначають два перші члени розкладу повної енергії системи Z_1eZ_2 (яка включає і енергію спокою електрона m_ec^2) при малих R:

$$E_{n\ j\ l\ m}^{\Pi}(Z_1,Z_2,R)=\varepsilon\cdot c^2+\left[W_{n\ j\ l\ m}^{n\ j\ l\ m}\right]_2,$$

$$l=j\pm\frac{1}{2}. \qquad (1.16)$$

Переходячи в (1.14) до нерелятивістської границі $(\alpha_0\to 0)$ ми отримаємо результат, який одержується стартуючи з рівняння Брейта-Паулі. Отримані формули мають компактний вигляд:

$$\left[\overline{W}_{n\ j\ j-\frac{1}{2}\ m}^{n\ j\ j-\frac{1}{2}\ m}\right]=\lim_{\alpha_0\to 0}\left[W_{n\ j\ j-\frac{1}{2}\ m}^{n\ j\ j-\frac{1}{2}\ m}\right]_2=Z_1Z_2\frac{\left[3m^2-j(j+1)\right]\cdot(ZR)^2}{n^3j^2(j+1)(2j+1)(2j-1)},\quad l=j-\frac{1}{2}, \qquad (1.17а)$$

$$\left[\overline{W}^{\,n\ j\ j+\frac{1}{2}\ m}_{\,n\ j\ j+\frac{1}{2}\ m}\right]_2 = \lim_{\alpha_0 \to 0}\left[W^{\,n\ j\ j+\frac{1}{2}\ m}_{\,n\ j\ j+\frac{1}{2}\ m}\right]_2 = Z_1 Z_2 \frac{\left[3m^2 - j(j+1)\right]\cdot (ZR)^2}{n^3 j(j+1)^2(2j+1)(2j+3)}, \quad l = j + \frac{1}{2}. \qquad (1.17б)$$

Знаходження головного члена розкладу в (1.17а), коли $j = \frac{1}{2}$ вимагає врахування в (1.12) як $r_0 \rangle \max\left\{\left|\vec{R}_1\right|, \left|\vec{R}_2\right|\right\}$, так і $r_0 \langle \max\left\{\left|\vec{R}_1\right|, \left|\vec{R}_2\right|\right\}$. Результат обчислення має наступний вигляд:

$$\left[\overline{W}^{\,n\ \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}}_{\,n\ \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}}\right]_2 = -\frac{4}{3n^3} Z_1 Z_2 (ZR)^2. \qquad (1.18)$$

Його можна формально отримати з рівності (1.17а), якщо в правій частині покласти $m = \frac{1}{2}$, а потім скоротивши на $2j - 1$, взяти $j = \frac{1}{2}$.

1. И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов, Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, М.: Наука, (1976) 320 с.
2. C. A. Coulson, A. Joseph, Proc. Phys. Soc. **A90**, 4, 887 (1967).
3. S. Roy, J. Math. Phys. **11**, 9, 2931 (1970).
4. Б. М. Смирнов, Асимптотические методы в теории атомных столкновений, М.: Атомиздат, (1973) 353 с.
5. Е. Е. Никитин, Б. М. Смирнов, Медленные атомные столкновения, М.: Энергоатомиздат, (1990) 256 с.
6. Л. П. Пресняков, В. П. Шевелько, Р. К. Янев, Элементарные процессы с участием многозарядных ионов, М.: Энергоатомиздат, (1986) 200 с.
7. Ю. Н. Покотиловский, ЭЧАЯ **24**, 1, 5 (1993).
8. В. А. Люлька, ТМФ **28**, 2, 211 (1976).
9. S. K. Luke, G. Hunter, R. P. McEahran, M. Cohen,The Journal of Chemical Physics **50**, 4, 1644 (1969).
10. В. С. Попов, Д. Н. Воскресенский, В. Л. Елецкий, В. Д. Мур, ЖЭТФ **76**, 2, 431 (1979).
11. П. П. Горват, В. Ю. Лазур, С. И. Мигалина, Й. М. Шуба, Р. К. Янев, ТМФ **109**, 2, 232 (1996).
12. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, Квантовая электродинамика, М.: Наука, (1989) 728 с.
13. Г. Бете, Э. Солпитер, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, М.: Физматгиз, (1976) 564 с.
14. T. P. Grozdanov, R. K. Janev, V. Yu. Lazur, Phys.Rev. **A32**, 6, 3425 (1985).
15. В. Ю. Лазур, Ю. Ю Машика, Р. К. Янев, Т. П. Грозданов, ТМФ **87**, 1, 97 (1991).

ASYMPTOTIC BEHAVIOUR TERMS RELATIVISTIC TWO - COULOMB - CENTER PROBLEM IN APPROXIMATE OF UNITED ATOM

A. V. Katernoga, V. Yu. Lazur, S. I. Migalina

Uzhgorod State University, 294000, Uzhgorod, Voloshin, 54

The Dirac equation for the two Coulomb centers potential is analyzed. Asymptotic expansions of solutions of the relativistic two-coulomb-center problem are obtained in the case when the distance between the centers are little.