АСИМПТОТИЧНІ МЕТОДИ В РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ЗАДАЧАХ З НЕВІДОКРЕМЛЮВАЛЬНИМИ ЗМІННИМИ

В. Ю. Лазур, О К. Рейтій, А. В. Катернога

Ужгородський державний університет, 88000, м. Ужгород, вул. Волошина, 32

За допомогою квазікласичного підходу та методу граничного шару отримано аналітичні розв'язки рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає повного відокремлення змінних. На базі розробленої схеми знайдено релятивістську хвильову функцію електрона в задачі двох кулонівських центрів. В рамках теорії збурень побудовано асимптотики (при малих та великих міжядерних відстанях R) термів задачі двох кулонівських центрів. Обчислено перші два члени асимптотичного (за великими R) розкладу обмінного розщеплення термів.

1. Вступ

Основною метою цієї роботи є розробка нових та використання вже відомих асимптотичних методів до розв'язування релятивістських квантово-механічних задач: задача двох кулонівських центрів (так звана задача Z_1eZ_2), атом у зовнішньому постійному електричному полі, тощо. Для цього розвинуто релятивістську версію методу ВКБ, яка, в поєднанні з методом граничного шару [1], дозволяє розв'язувати рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає повне відокремлення змінних в жодній ортогональній системі координат. Застосування методу ВКБ до цієї задачі полягає в наступному.

Рівняння Дірака зводиться до рівняння другого порядку, схожого за формою на рівняння Шредінгера. Оскільки потенціал володіє аксіальною симетрією, то гамільтоніан комутує з оператором проекції повного кутового моменту на вісь симетрії z, і отримане рівняння допускає відокремлення змінної φ. Проводячи в цьому рівнянні розклад за степенями $\hbar$, отримуємо систему матричних диференціальних рівнянь першого порядку. Дана система послідовно розв'язується за допомогою релятивістської версії методу граничного шару започаткованого М. А. Леонтовичем та В. А. Фоком. Вона полягає в наступному.

Досить часто буває так, для розв'язання квантово-механічної задачі достатньо знайти хвильову функцію не у всьому конфігураційному просторі, а тільки в околі деякого многовиду M меншої розмірності, де локалізована хвильова функція. Стани, що описуються такими хвильовими функціями, називаються "локалізованими". Прикладом таких станів є задача про обмінну взаємодію атомних частинок при великих міжядерних відстанях, що приводить до розщеплення термів в точках квазіперетину. Обмінне розщеплення, як відомо, визначається в основному областю розподілу електрона, яка лежить в околі міжядерної осі $\vec{R}$ (M – пряма лінія). Інший приклад локалізованого стану – процес тунельної іонізації атома водню в досить слабкому постійному електричному полі, коли в підбар'єрній області потік імовірності зосереджений в околі осі симетрії (M – пряма лінія).

В таких випадках природно розкладувати потенціал за степенями перпендикулярної до M координати. Це дозволяє провести наближене відокремлення змінних, знайти наближені аналітичні розв'язки отриманої системи матричних рівнянь в частинних похідних в околі M і розглянути широке коло задач теорії повільних атомних зіткнень.

За допомогою даного підходу аналітично отримано хвильові функції діраківського електрона, поміщеного в поле двох кулонівських центрів із зарядами Z_1 і Z_2, розташованих на великій міжядерній відстані R один від одного. Для обчислення асимптотичних розкладів енергії електрона $E(R)$, яка є функцією від R, використовується метод теорії збурень, який не вимагає відокремлення змінних. При малих (великих) значеннях міжядерної відстані R в якості нульового наближення використовуються енергії та хвильові функції релятивістського об'єднаного (роз'єднаного) атома з зарядом $Z = Z_1 + Z_2$ ($Z = Z_1$ або $Z = Z_2$).

2. Асимптотична поведінка енергетичних термів релятивістської задачі двох кулонівських центрів в границях об'єднаного та роз'єднаного атомів

Коли сумарний заряд кулонівських центрів $Z = Z_1 + Z_2$ позитивний і міжцентрова відстань R прямує до нуля, можна розглядувати задачу Z_1eZ_2 за теорією збурень. Діраківський гамільтоніан задачі Z_1eZ_2 має вигляд ($m_e = e = \hbar = 1$):

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + c^2\beta - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, \qquad (1)$$

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; c – швидкість світла.

У стандартному зображенні [2] матриці $\vec{\alpha}$, β мають вигляд:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}; \ \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

де $\vec{\sigma}$ - 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 $\hat{W}$.

$$\hat{H} = \hat{H}^{UA} + \hat{W}. \qquad (3)$$

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

$$\hat{H}^{UA} = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + c^2\beta - \frac{Z}{r_0}, \qquad (4)$$

який знаходиться на осі oz в точці z_0:

$$z_0 = \left(-\frac{1}{2} + \frac{Z_2}{Z}\right)R = \left(\frac{1}{2} - \frac{Z_1}{Z}\right)R. \qquad (5)$$

Точка z_0 ділить міжцентрову віддаль на два відрізки:

$$R_1 = \frac{Z_2}{Z}R, \ R_2 = \frac{Z_1}{Z}R. \qquad (6)$$

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 на міжядерну вісь. Для даних j і l існують два типи розв'язків, які відрізняються парністю $P = (-1)^l$, замість якої будемо використовувати орбітальний момент $l = j \pm 1/2$. Розв'язки рівняння Дірака для потенціалу двох кулонівських центрів при неперервному 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 $l = j - 1/2$ і $l = j + 1/2$ для об'єднаного атома із зарядом ядра $Z = Z_1 + Z_2$. Явний вигляд власних функцій і власних значень оператора $\hat{H}^{UA}$ можна знайти в [2]. Розклавши оператор збурення $\hat{W}$ в ряд за поліномами Лежандра і обчисливши матричні елементи матриці $\left\|W_{njlm}^{nj'l'm'}\right\|$ оператора збурення до першого незникаючого члена, ми переконаємося що вона є діагональною при $R \to 0$ по відношенню до кожної групи взаємовироджених (по l і m) станів. Остаточний вираз для енергії:

$$E_{njlm}(Z_1,Z_2,R)=\varepsilon c^2+\frac{Z_1Z_2}{2N^3}\cdot\frac{[3m^2-j(j+1)]}{j(j+1)}\cdot\frac{[\varepsilon\aleph(\varepsilon\aleph-1)-\gamma^2+1]\cdot(ZR)^2}{\gamma(\gamma^2-1)(4\gamma^2-1)}+O(R^3), \quad (7)$$

$$n'=n-j-\frac{1}{2} \qquad \aleph=(-1)^{k-l}k, \qquad k=j+\frac{1}{2}, \qquad l=j\pm 1/2, \quad (8)$$

$$N=\sqrt{n^2-2n'(k-\gamma)}, \qquad \gamma=\sqrt{k^2-(\alpha_0 Z)^2}, \qquad \varepsilon=\left[1+\left(\frac{\alpha_0 Z}{n'+\gamma}\right)^2\right]^{-1/2}, \quad (9)$$

де $\alpha_0=1/c\approx 1/137.037$.

Для того, щоб оцінити вклад релятивістських ефектів в енергію, розглянемо відношення $Q1(Z_1,R)=E_{bin}/E_{bin}^{(n)}$ (рис. 1) між релятивістським $E_{bin}=(E_{njlm}^2-c^4)/(2c^2)$ (див (7)-(9)) і нерелятивістським $E_{bin}^{(n)}$ [3] виразами для енергії зв'язку, коли $Z_1=Z_2$.

У випадку, коли міжцентрові відстані великі, а атоми різні, власні значення $E(R)$ двоцентрової задачі Z_1eZ_2 розпадаються на два класи: E_I – та E_{II} – терми, які при $R\to\infty$ переходять в енергетичні рівні ізольованих атомів 1 і 2, відповідно. Розіб'ємо $\hat{H}$ на гамільтоніан нульового наближення $\hat{H}^{SA}$ і збурення $\hat{V}$:

$$\hat{H}=\hat{H}^{SA}+\hat{V}. \quad (10)$$

Введемо сферичну систему координат r_l, θ_l, φ_l, початок якої знаходиться в точці (0,0,0), а кут θ_l відраховується від осі oz, направленої від центра Z_l до центра Z_2. Тоді в якості $\hat{H}^{SA}$ виберемо гамільтоніан водневоподібного релятивістського атома із зарядом ядра Z_l:

$$\hat{H}^{SA}=c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}+c^2\beta-\frac{Z_1}{r_1}, \quad (11)$$

який знаходиться в початку координат.

Аналогічно до $\hat{H}^{UA}$ власні стани оператора $\hat{H}^{SA}$ характеризуються

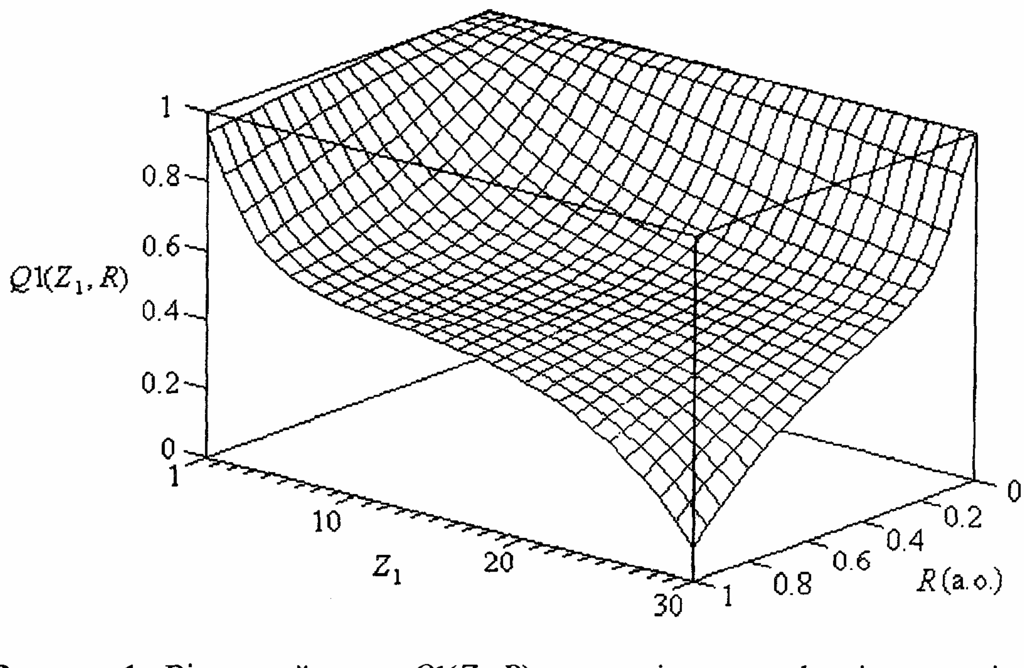


Рисунок 1.. Відносний вклад $Q1(Z_1,R)$ релятивістських ефектів в енергію систем Z_1eZ_2 у резонансному випадку $Z_1=Z_2$ для $2P_{3/2}\sigma$ стану.

набором сферичних квантових чисел n_l, j_l, l_l, m_l, де n_l – головне квантове число; j_l і l_l – повний і орбітальний моменти електрона; m_l – проекція j_l на міжядерну вісь. Оператор збурення $\hat{V}$, як і в попередньому випадку розкладуємо за поліномами Лежандра і знаходимо матрицю $\left\| V_{njlm}^{n'j'l'm'} \right\|$ оператора збурення до першого незникаючого недіагонального елемента.

Діагоналізуючи матрицю $\left\| V_{njlm}^{n'j'l'm'} \right\|$, знаходимо, що в нашому наближені повна енергія системи $Z_1 e Z_2$ при великих міжядерних відстанях ($R \to \infty$) визначається як

$$E_l(R) = \varepsilon_1 c^2 - \frac{Z_2}{R} \pm \frac{3}{4}\sqrt{N_1^2 - \aleph_1^2}\, \frac{(n_1' + \gamma_1) m_1}{j_1 (j_1 + 1)} \frac{Z_2}{Z_1 R^2} + O(R^{-3}). \tag{12}$$

Тут позначення такі ж, як в (8)-(9), з введенням індексу 1, а "$\pm$" відповідає станам з $l_1 = j_1 \pm 1/2$.

3. Аксіально-симетрична задача

Розглянемо аксіально-симетричну задачу, коли дві класично дозволених області розділені потенціальним бар'єром. Приклади застосування такої задачі – атом в зовнішньому однорідному електричному полі, задача двох кулонівських центрів. Знайдемо хвильову функцію в підбар'єрній області. У цьому випадку, хвильова функція зосереджена в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання, що є віссю симетрії z потенціалу.

Для біспінора

$$= \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \tag{13}$$

рівняння Дірака має вид

$$c\vec{\sigma}\vec{p}\xi = (E - V + c^2)\eta, \quad c\vec{\sigma}\vec{p}\eta = (E - V - c^2)\xi \tag{14}$$

підставляючи перше рівняння системи (14) в друге і використовуючи підстановку

$$\xi = (W^+)^{1/2} \Phi, \; W^{\pm} = E - V \pm c^2, \tag{15}$$

ми отримуємо рівняння другого порядку

$$\Delta\Phi + k^2 \Phi = 0, \; k^2 = \frac{1}{\hbar^2 c^2}\left[(E - V)^2 - c^4\right] - \frac{\Delta V}{2W^+} - \frac{3}{4}\left(\frac{\vec{\nabla} V}{W^+}\right) + \frac{i}{W^+}\vec{\sigma}\left[\vec{\nabla} V, \vec{\nabla}\right]. \tag{16}$$

Оскільки потенціал аксіально-симетричний, розв'язок цього рівняння шукаємо в циліндричній системі координат у формі

$$\Phi = \begin{pmatrix} F_1(z,\rho)\exp[i(m - 1/2)\varphi] \\ F_2(z,\rho)\exp[i(m + 1/2)\varphi] \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Підставляючи (17) в (16) отримуємо матричне рівняння для функції $F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}$.

Подамо розв'язок цього рівняння у формі

$$F = \varphi\exp(\hbar^{-1} S), \; \varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \varphi^{(n)}. \tag{18}$$

Підставляючи (18) в отримане для F рівняння і прирівнюючи до нуля коефіцієнти при кожній степені $\hbar$, ми отримуємо систему диференціальних рівнянь першого порядку.

Знайдемо хвильову функцію в підбар'єрній області. У цьому випадку, хвильова функція локалізована в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання, що є віссю симетрії z потенціалу. Тому, шукаємо розв'язок отриманої системи у вигляді розкладу за малим параметром – координатою ρ:

$$S(z,\rho)=\sum_{n=0}^{\infty} S_n(z)\rho^{2n},\quad \varphi^{(n)}(z,\rho)=\begin{pmatrix}\rho^{|m-1/2|}\sum\limits_{k=0}^{\infty}\varphi_{1k}^{(n)}(z)\rho^{2k}\\ \rho^{|m+1/2|}\sum\limits_{k=0}^{\infty}\varphi_{2k}^{(n)}(z)\rho^{2k}\end{pmatrix}. \qquad (19)$$

Після підстановки (19) у відповідні рівняння і прирівнюванні до нуля коефіцієнтів при кожній степені ρ, ми одержуємо систему звичайних диференціальних рівнянь першого порядку, які легко інтегруються. Нижня компонента η біспінора отримується з верхньої компоненти операцією $\xi \xrightarrow[W^+\to W^-]{} \eta$.

4. Двоцентрова хвильова функція та обмінне розщеплення адіабатичних термів

Знайдемо хвильову функцію діраківського електрона в полі двох фіксованих ядер із зарядами Z_1 і Z_2, розташованих на великій відстані один від одного, вважаючи, що потенціал кулонівський:

$$V=-\frac{Z_1}{r_1}-\frac{Z_2}{\left|\vec{R}-\vec{r}_1\right|}. \qquad (20)$$

Ми шукаємо розв'язки рівняння Дірака з потенціалом (20) з граничною умовою $_I \xrightarrow[z<<R]{} \Psi_1$, яка означає, що, коли електрон наближується до атома 1, двохцентрова функція $_I$ прямує до незбуреної атомної хвильової функції $_1$. Використовуючи це, отримуємо вирази для функцій

$$S_0=-\lambda_I z-\frac{Z_1^2}{2\lambda_I^3 z}+\frac{Z_2^2 z}{2\lambda_I^3 R(R-z)}+\frac{\varepsilon_1 Z_1}{\lambda_1}\ln z-\frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1}\left(1+\frac{Z_1-Z_2}{\varepsilon_1\lambda_1^2 R}\right)\ln\left(1-\frac{z}{R}\right), \qquad (21)$$

$$S_1=-\frac{q_0}{2z}\left[1+\frac{\varepsilon_I Z_2}{2\lambda_I^2}\frac{z}{(R-z)^2}\right],\quad S_2=\frac{\lambda_I}{8z^3},\quad \varepsilon_{1,I}=\frac{E_{1,I}}{c^2},\qquad \lambda_{1,I}=c\sqrt{1-\varepsilon_{1,I}^2}, \qquad (22)$$

$$\varphi=\frac{1}{\sigma}\begin{pmatrix}K_1^{\pm}\left(\frac{\rho\sqrt{q_0}}{\sigma}\right)^{|m_1-1/2|}\left[1+L_1^{\pm}*\left(\frac{\rho}{z}\right)^2+U_1^{\pm}(z)\right]\\ K_2^{\pm}\left(\frac{\rho\sqrt{q_0}}{\sigma}\right)^{|m_1+1/2|}\left[1+L_2^{\pm}*\left(\frac{\rho}{z}\right)^2+U_2^{\pm}(z)\right]\end{pmatrix},\quad U_{1,2}^{\pm}(z)=\frac{\alpha_{1,2}^{\pm}}{W_0^{\pm}}\frac{z(2R-z)}{(R-z)^2}+\frac{\kappa_1(\kappa_1\pm 1)}{2\lambda_I z}, \qquad (23)$$

де $K_{1,2}^{\pm}, L_{1,2}^{\pm}, \alpha_{1,2}^{\pm}$ - визначені константи, + (-) відповідає компоненті ξ (η). Аналогічно одержуємо хвильову функцію Ψ_{II}, яка відповідає власному значенню E_{II}.

Для обчислення обмінного розщеплення термів ми одержали представлення через інтеграл по поверхні S, яка умовно розділяє області, де електрон знаходиться в початковому $_I$ і кінцевому $_{II}$ станах [4]:

$$\Delta E=2ic\int_S d\vec{S}(\Psi_{II}^{+}\vec{\alpha}\Psi_I). \qquad (24)$$

Обчислюючи інтеграл (24) методом стаціонарної фази, ми отримуємо вираз для перших двох членів асимптотичного розкладу $\Delta E(R)$ при квазіперетинах:

$$\Delta E=\frac{2A_1A_2}{(|m|-1/2)!(\lambda_1+\lambda_2)^{|m|-1/2}}D_{j_1 j_2 m}R^{\frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1}+\frac{\varepsilon_2 Z_2}{\lambda_2}-|m|-1/2}\exp\left\{-\frac{R(\lambda_1+\lambda_2)}{2}-\frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1}+\frac{\varepsilon_2 Z_1}{\lambda_2}\right)\right\}\left[1+\frac{I}{R}\right], \qquad (25)$$

$$D_{j_1 j_2 m} = \sqrt{\frac{(j_1 + |m|)(j_2 + |m|)}{(j_1 - |m|)(j_2 - |m|)}}, \quad m = m_1 = m_2, \qquad \kappa_{1,2} = \mp(j_{1,2} + 1/2), \qquad (26)$$

$$I = \frac{1}{\lambda_1 + \lambda_2}\left[\kappa_1^2 + \kappa_2^2 - (|m| + 1/2)^2 - \frac{\kappa_1\kappa_2}{|m| + 1/2}\right] + \\ + \frac{|m| + 1/2}{2}\left(\frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1^2} + \frac{\varepsilon_2 Z_1}{\lambda_2^2}\right) + \frac{\varepsilon_1 Z_2 \xi_1}{2\lambda_1} + \frac{\varepsilon_2 Z_1 \xi_2}{2\lambda_2} - \frac{Z_1^2}{4\lambda_1^3} - \frac{Z_2^2}{4\lambda_2^3}. \qquad (27)$$

5. Обговорення результатів

В цій роботі ми одержали аналітичні квазікласичні розв'язки рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає відокремлення змінних. Наш метод дозволяє враховувати спін-орбітальні та спін-спінові взаємодії. Ми одержали релятивістську двоцентрову хвильову функцію й обчислили обмінне розщеплення термів, що виражається через відомі характеристики роз'єднаних атомів: заряди атомних залишків Z_1 і Z_2, асимптотичні коефіцієнти A_1, A_2, енергії зв'язку $\lambda_{1,2}^2/2$ і квантові числа електрона в розглянутих станах атомів (іонів). Отримані результати й аналогічні нерелятивістські результати обмінного розщеплення симетричного g і антисиметричного u термів системи (Z,e,Z) зручно подати у вигляді відношення $Q2(Z,R) = \Delta E/\Delta E^{(n)}$. Функція $Q2(Z,R)$ показує (рис. 2), що роль релятивістських ефектів росте із збільшенням зарядів Z_1, Z_2 і відносний вклад релятивістських ефектів складає приблизно 50%, навіть при $Z_1 = Z_2 = 48$.

Робота виконана при частковій фінансовій підтримці міжнародної асоціації INTAS, грант № **99-1326**.

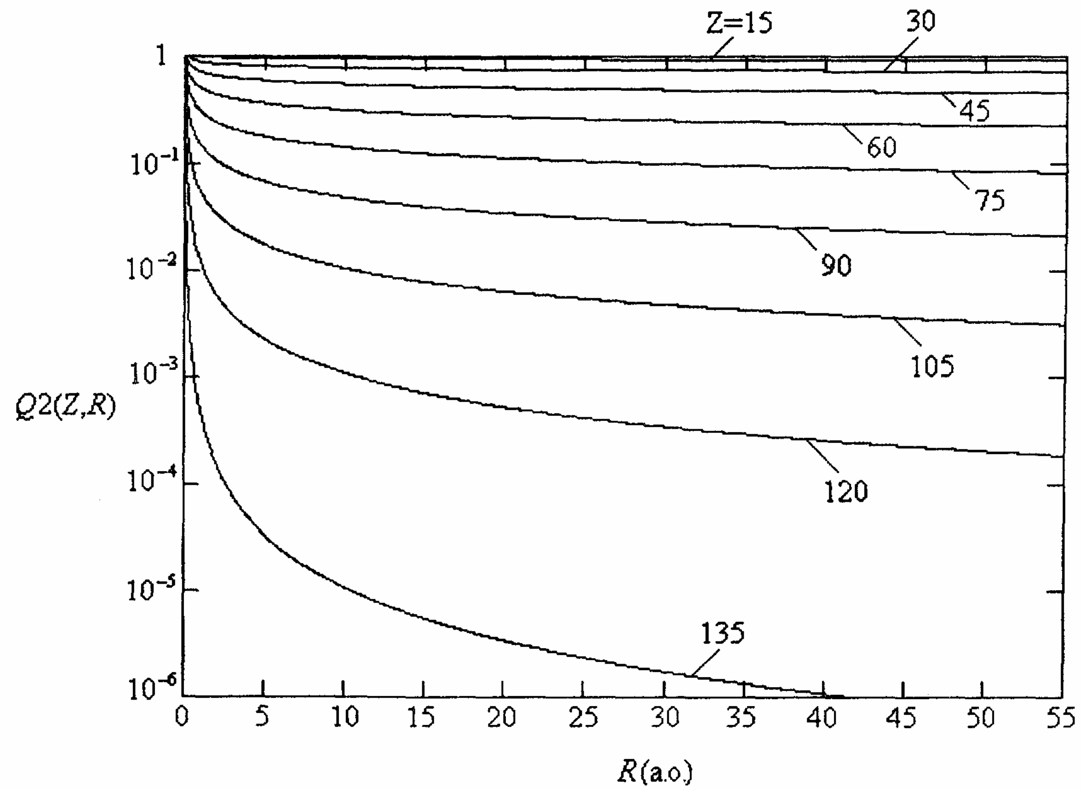


Рисунок 2.. Відносний вклад $Q2(Z,R)$ релятивістських ефектів в величину обмінног розщеплення термів в резонансному випадку для $1S_{1/2}\sigma$ стану.

1. М. А. Леонтович, В. А. Фок, ЖЭТФ, **16,** с. 647, (1946).
2. В. Б.Берестецкий, Е. М.Лифшиц,. Л. П. Питаевский, Квантовая злектродинамика, М.: Наука, (1989) 728с.
3. Й. В.Комаров, Л. Й. Пономарев, С. Ю. Славянов, Сфероидальные й кулоновские сфероидальные функции, М.: Наука, (1976) 320 с.
4. П. П. Горват, В. Ю. Лазур, С. Й. Мигалина, Й. М. Шуба, Р. К. Янев, ТМФ **109,** №2, с.232, (1996).

ASYMPTOTIC METHODS IN RELATIVISTIC PROBLEMS WITH UNSEPARABLE VARIABLES

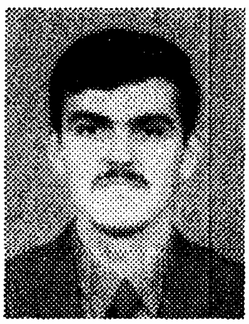
V. Yu. Lazur, O. K. Reity, A. V. Katernoha

Uzhgorod State University, Voloshina St. 32, Uzhgorod, 88000, Ukraine

The Dirac equation with an axially symmetrical potential, not allowing complete separation of variables, is analytically solved by the WKB approach and boundary-layer method. In the framework of this scheme, the relativistic two-Coulomb-centre wave function is constructed. The asymptotic expansions (at small and large internuclear distances R) of the eigenvalues (potential curves) $E(R)$ of the two-Coulomb-centre problem are obtained by perturbation theory. The first two terms of the asymptotic (at large internuclear distance) behaviour of the exchange interaction potential of an ion with an atom are calculated.

Володимир Юрійович Лазур – завідувач кафедри теоретичної фізики, професор
Народився в 1950 р. Закінчив УжДУ в 1972 р. Кандидат фіз.-мат. наук з 1977 р. Доктор фіз.-мат. наук - з 1993 р.

Олександр Констянтинович Рейтій – аспірант кафедри теоретичної фізики
Народився у 1976 р. Закінчив фізичний факультет УжДУ в 1998 .



Антон Володимирович Катернога – аспірант кафедри теоретичної фізики
Народився у 1977 р. Закінчив фізичний факультет УжДУ в 1999 р.