ФОНД ПІДТРИМКИ НАУКИ

Закарпатське відділення

Шановній Світлані Іванівні
з вдячністю за
підтримку
З повагою

ЗБІРНИК ТЕЗИСІВ

міжрегіональної науково-практичної конференції

ФІЗИКА КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

23 січня 1998 р.

УЖГОРОД

Квазікласичні розв`язки релятивістської задачі двох кулонівських центрів.

Лазур В.Ю., Рейтій О.К., Мигалина С.І.

Ужгородський університет, кафедра теоретичної фізики.

При теоретичному описі процесів з перерозподілом частинок в області фізики атомних зіткнень і, зокрема, одноелектронної перезарядки з участю багатозарядних іонів необхідно мати розв'язки задачі двох центрів (Z_1eZ_2) для рівняння Дірака. Оскільки змінні в цьому рівнянні не відокремлюються в жодній ортогональній системі координат, то дана задача не має точних аналітичних розв'язків. Метою даної роботи є розробка послідовної схеми квазікласичного наближення (методу ВКБ) для рівняння Дірака з потенціалом двох кулонівських центрів ($m_e = e = h = 1$):

$$\begin{aligned} &\hat{H}\Psi_j(\vec{r};R) = E_j(R)\Psi_j(\vec{r};R), \\ &\hat{H} = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + c^2\beta - Z_1/r_1 - Z_2/r_2, \end{aligned} \qquad (1)$$

тут r_i - віддаль від електрона до відповідного ядра ($i=1,2$); $Z_{1,2}$ -ефективні заряди атомних залишків A^{Z_1+} і B^{Z_2+} , у полі яких рухається електрон; $E_j(R)$ - власні значення (терми) релятивістської задачі двох центрів, які включають і енергію спокою m_ec^2 і залежать від міжядерної віддалі R як від параметра; $\hat{\vec{p}} = -i\vec{\nabla}$, - оператор імпульсу , c- швидкість світла, $\vec{\alpha}$ і β - матриці Дірака [1].

При великих міжядерних віддалях R асимптотичну форму розв'язку Ψ_I рівняння (1) будемо шукати у вигляді (Ψ_{II} знаходиться аналогічно) :

$$\Psi_I(\vec{r}_1, R) = \frac{1}{r_1}\begin{pmatrix} G(\vec{r}_1)\Omega_{j_1 l_1 m_1}(\vec{n}_1) \\ i^{l_1 - l_1' + 1}F(\vec{r}_1)\Omega_{j_1 l_1' m_1}(\vec{n}_1) \end{pmatrix}, l = j \pm 1/2, l' = 2j - l = j \mp 1/2.\ \vec{n}_1 = \frac{\vec{r}_1}{r_1}. \qquad (2)$$

де j_1, l_1 - повний та орбітальний моменти електрона у атомі $A^{(Z_1-1)+}$, m_1- проекція повного моментa на міжядерну вісь $\vec{R}$. $G(\vec{r}_1)$ і $F(\vec{r}_1)$ -нові невідомі функції. Основна кутова залежність функції $\Psi_I(\vec{r}, R)$ визначається кульовими спінорами Ω_{jlm} [1]. Залежність функцій $G(\vec{r}_1)$ і $F(\vec{r}_1)$ від напрямку $\vec{n}_1$ більш слабка і зумовлена наявністю на великій віддалі R збурюючого центру B^{Z_2+}. Тоді рівняння (1) наближено відокремлюється в сферичній системі координат, а рівняння для $G(\vec{r}_1)$ і $F(\vec{r}_1)$ мають вигляд :

$$\frac{dG}{dr_1} = -\frac{\chi_1}{r_1}G + \frac{1}{c}[E_1 + c^2 - V]F, \qquad \frac{dF}{dr_1} = -\frac{1}{c}[E_1 - c^2 - V]G + \frac{\chi_1}{r_1}F, \qquad (3)$$

де $V = -\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{|\vec{R} - \vec{r}_1|}, \chi_1 = \mp(j_1 + 1/2)$.

Ці рівняння одномірні, оскільки залежність від кута Θ параметрична. Енергія терма E_I в нульовому наближенні дорівнює $E_I = E_1 - Z_2/R$, де E_1 - повна енергія незбуреного ізольованого стану атома $A^{(z_1-1)+}$. Квазікласичні розв`язки системи рівнянь (3) мають вигляд:

$$\begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} = C_1(Q_-q)^{-1/2} \exp\{-\int_{r}^{r}(q - \frac{V'}{2Q_-q})dr\} \begin{pmatrix} \frac{1}{c}[c^2 + E_I - V] \\ -Q_- \end{pmatrix}, \text{ при } \chi_1 < 0 \quad (4)$$

$$\begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} = C_2(Q_+q)^{-1/2} \exp\{-\int_{r}^{r}(q + \frac{V'}{2Q_+q})dr\} \begin{pmatrix} -Q_+ \\ \frac{1}{c}[c^2 - E_I + V] \end{pmatrix}, \text{ при } \chi_1 > 0 \quad (5)$$

де $Q_\pm = q \pm \chi_1/r_1$, $q = \frac{1}{c}\sqrt{c^4 + \frac{c^2\chi_1^2}{r_1^2} - (E_I - V)^2}$; штрих означає похідну по r.

Ми вважаємо, що віддалі між ядрами достатньо великі, так що поблизу центра A^{z_1+} розв'язки рівняння (1) повинні переходити у асимптотику незбурених хвильових функцій атома $A^{(z_1-1)+}$. Це дає асимптотичну граничну умову для функцій $G(\vec{r}_1)$ і $F(\vec{r}_1)$:

$$\begin{Bmatrix} G \\ F \end{Bmatrix} \xrightarrow[2/\lambda^2 \ll r_1 \ll R]{} \begin{Bmatrix} G^{(0)} \\ F^{(0)} \end{Bmatrix} = A_\pm r_1^{\varepsilon_1 z_1/\lambda_1} \exp(-\lambda_1 r_1)[1 + B_\pm r_1 + \dots], \quad (6)$$

де $A_\pm$ - асимптотичний коефіцієнт [2], $B_\pm = \frac{1}{2\lambda_1}\left(\chi_1 + \frac{Z_1}{\lambda_1}\right)\left(\chi_1 - \frac{Z_1}{\lambda_1} \pm 1\right)$,

$\lambda_1 = c\sqrt{1 - \varepsilon_1^2}, \varepsilon_1 = E_1/c^2$.

Квазікласичні формули (4) і (5) відрізняються від аналогічних формул нерелятивістської квазікласики [3] релятивістським виразом для імпульсу p, включенням поправки, що враховує спін-орбітальну взаємодію, а також наявністю додаткового передекспоненційного множника $Q_\pm^{-1/2}$.

Література

[1] Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П., Квантовая электродинамика (Наука, Москва, 1989).

[2] Лазур В.Ю., Горват П.П., Мигалина С.И., ТМФ **109**, 232 (1996).

[3] Чибисов М.И., ЖЭТФ **76**, 1898 (1979).