

ПРОБЛЕМА ДВОХ ЕЛЕКТРОНІВ У МЕЖАХ ЕФЕКТІВ ТРЕТЬОГО ПОРЯДКУ КВАНТОВОЇ ЕЛЕКТРОДИНАМІКИ

В. Ю. Лазур, О. Ф. Павлик, О. К. Рейтій

*Ужгородський національний університет, кафедра теоретичної фізики,
вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000, Україна*

(Отримано 8 листопада 2009 р.; в остаточному вигляді — 19 липня 2010 р.)

Розв'язано задачу про взаємодію двох квазімолекулярних електронів, що перебувають на довільній відстані один від одного — біля різних атомів (ядер). Розглянуто ефекти третього порядку квантової електродинаміки, які включають віртуальний обмін фотонами між електронами й випромінювання (поглинання) реального фотона. Одержано загальний вираз для матричних елементів оператора ефективної енергії взаємодії двох квазімолекулярних електронів із зовнішнім полем випромінювання, що дає змогу обчислювати ймовірності непружних процесів з перерозподілом при повільних зіткненнях багатозарядних йонів із релятивістськими атомами. Показано, що послідовне виконання процедури симетризації фактора запізнювання щодо обох електронів призводить до виникнення додаткових членів у релятивістському операторі взаємодії двох квазімолекулярних електронів у порівнянні як із звичайним оператором Брейта, так і з узагальненим брейтівським оператором із праць [О. Н. Гадомский, В. Р. Нагибаров, Н. К. Соловаров, Журн. експ. теор. физ. **63**, 813 (1972); **70**, 435 (1976); О. Н. Гадомский, К. К. Алтунин, Журн. експ. теор. физ. **144**, 1555 (1998); О. Н. Гадомский, Усп. физ. наук. **170**, 1554 (2000)].

Ключові слова: міжелектронна взаємодія, ефекти запізнювання, оператор Брейта, квантова електродинаміка, квазімолекулярні електрони.

PACS number(s): 31.30.J-, 34.70.+e

I. ВСТУП

Непружні зіткнення атомних частинок, особливо багатоелектронних, супроводжуються великою кількістю процесів зміни їхніх зарядових та електронних станів. Найпростішими, добре вивченими прикладами є одноелектронні йон-атомні процеси з перерозподілом (наприклад, резонансна і квазірезонансна перезарядка), у яких змінює свій стан тільки один електрон, а інші можна вважати замороженими. Такі процеси мають високу ефективність і відіграють важливу роль в утворенні інверсної заселеності рівнів йонів у плазмі сонячної корони й нових пристроїв керованого термоядерного синтезу [1, 2]. Однак при теплових енергіях зіткнення так само, а іноді й більш імовірно, ніж одноелектронні, виявляються двоелектронні процеси з перерозподілом [3–7], серед яких важливе місце займають різні оже-процеси, які добре вивчили автори відомої монографії [7], двоелектронна перезарядка [3–6], а також перезарядка з одночасним збудженням йона [4]. Великі величини повних перерізів і констант швидкостей дають змогу припустити, що вказані процеси з перерозподілом визначаються електронними переходами на порівняно великих відстанях R між частинками, що зіштовхуються. Наявність малого параметра $1/R$ дає змогу розвинути послідовну, логічно замкнуту асимптотичну теорію розгляданого процесу з перерозподілом. Невипадково саме в межах асимптотичного підходу одержано низку строгих результатів теорії багатоелектронних йон-атомних процесів із перерозподілом [3, 4, 6].

Поряд із цим останніми десятиліттями значну увагу приділяють вивченню впливу інтенсивного електромагнітного випромінювання на характеристики непружних процесів, що супроводжують зіткнення багатозарядних йонів із важкими атомами. Інтерес до цього кола задач зумовлений можливістю стимулювати лазерним випромінюванням різноманітні процеси, що відбуваються при йон-атомних зіткненнях за участю електронів як зовнішніх, так і внутрішніх оболонок. У більшості теоретичних й експериментальних праць розглядали двоелектронні процеси з перерозподілом (див., наприклад, [2, 6, 10–14] і цитувану там літературу), які відбуваються при великих між'ядерних відстанях та супроводжуються поглинанням (випромінюванням) фотонів. Указані процеси включають сильно корельовані електронні переходи, які останнім часом доволі інтенсивно вивчалися експериментально [2, 12] і теоретично [10, 13]. З'ясування принципів особливостей та основних механізмів радіаційно-зіштовхувальних процесів із перерозподілом накладає відбиток на всю сучасну діяльність у цій галузі.

Ураховуючи, що в майбутньому увага до подібних досліджень безперечно зростатиме, варто докладно розглянути перебіг квантових процесів, які відповідають фейнманівським діаграмам, зображеним на рис. 1. При цьому потрібно мати на увазі, що для всіх двоелектронних процесів із перерозподілом характерним є обмінний механізм: один з активних електронів атома (йона) $A^{(Z_a-2)+}$ тунелює до "чужого" йона B^{Z_b+} з подальшим диполь-мультипольним одночасним переходом двох розведених на різні ядра електронів. Тому

в цій праці ми виходимо з того, що обмінний матричний елемент, який відповідає за перебіг двоелектронних процесів із перерозподілом, визначається такою конфігурацією, коли активні електрони є далеко один від одного — біля різних атомів (ядер). У тому випадку, коли за сприятливих умов механізми неадіабатичного зв'язку викликають багатоелектронні переходи із залученням електронів внутрішніх оболонок, реалістичні розрахунки параметрів взаємодії важких (релятивістських) атомних частинок у процесі зіткнення повинні ґрунтуватися на повністю релятивістській теорії. Насправді вже саме формулювання двочастинкової задачі в межах релятивістської квантової теорії стикається з принциповими труднощами математичного й логічного характеру. Це значною мірою зумовлено відсутністю локального лоренц-інваріантного оператора, який ураховує релятивістський характер міжелектронної взаємодії (“ефекти запізнювання”). Сучасна квантово-польова теорія електромагнітних взаємодій (квантова електродинаміка), базована на S -матричному формалізмі та фейнманівській діаграмній техніці, дає лише рецепт побудови такого оператора у вигляді розкладу в ряд за степенями α^2 (де $\alpha \approx 1/137$ — стала тонкої структури). Ще в 1929 р. Брейт показав [15], що врахування першого члена такого розкладу є добрим наближенням до релятивістської взаємодії між двома електронами за умови малості ефектів запізнювання в спектрі гелієподібного атома. Релятивістський оператор взаємодії двох електронів, який одержав Брейт, має вигляд [15]

$$V(\mathbf{r}_{12}) = V_C(r_{12}) + V_B(\mathbf{r}_{12}) \quad (1)$$

$$= \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{2r_{12}} \left[\boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2 + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_1 \mathbf{r}_{12})(\boldsymbol{\alpha}_2 \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} \right],$$

де $\boldsymbol{\alpha}_1$ і $\boldsymbol{\alpha}_2$ — два комутуючі набори матриць Дірака, $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, а нижні індекси 1 і 2 розрізняють величини, що належать до першого і другого електрона відповідно.

Вираз (1) для оператора міжелектронної взаємодії є на сьогодні основою більшості застосувань квазірелятивістського рівняння Дірака-Брейта в багатоелектронних задачах атомної фізики й астрофізики. Зокрема квантово-електродинамічні поправки брейтівського типу V_B часто включають у пертурбативні розрахунки атомних структур [16], але досі не враховували при розрахунках електронної структури важких багатозарядних квазімолекул. Застосовність оператора Брейта (1), однак, обмежується умовою малості часу передачі взаємодії $T_b = r_{12}/c$ порівняно із середнім часом електронних переходів $T_0 = 2\pi/\omega_0$, де ω_0 — характерна частота у спектрі взаємодіючих електронів. Зрозуміло, що ця умова явно виконується для не надто великих відстаней між електронами, наприклад, внутрішньоатомних відстаней у гелієподібних атомах.

З огляду на це в нашій попередній праці [17] наведено аргументи, які ставлять під сумнів можливість використання оператора Брейта (1) для знаходження асимптотики обмінної взаємодії, відповідальної за одночасне захоплення двох електронів при повільних зіткненнях багатозарядних йонів з атомами. По суті,

ці аргументи однаковою мірою стосуються й інших (у тому числі й радіаційно-зіштовхувальних) двоелектронних процесів із перерозподілом, якщо тільки основний внесок у ймовірність переходу дає конфігурація, коли електрони розходяться на різні ядра і справедливим є наближення незалежних електронів як нульове. Насправді ж ми тут маємо нову квантово-електродинамічну задачу про взаємодію двох квазімолекулярних електронів з випромінюванням (поглинанням) реального фотона, яка досі не має задовільного розв'язку. Інтерес до цієї проблеми виник ще на початку 70-х років минулого століття у зв'язку з інтенсивним дослідженням багатоатомних систем у полі випромінювання. Заслуги втілення й розвитку нових ідей у цьому напрямку належать авторам праць [18–21], у яких методами квантової електродинаміки задача про взаємодію двох зв'язаних електронів, що належать двом водневоподібним атомам, розглядали в загальній постановці, не пов'язаній з жодними обмеженнями на міжатомні відстані. Проте побудований у цитованих працях [18–21] узагальнений оператор Брейта не має властивості симетричності стосовно до взаємодіючих частинок і тому не може застосовуватися в послідовній релятивістській квантовій теорії. Саме ця обставина спонукала нас повернутися до проблеми двох квазімолекулярних електронів заново.

У розділі 2 отримано загальний вираз для матричних елементів оператора ефективної енергії взаємодії системи двох квазімолекулярних електронів із зовнішнім полем випромінювання. У розділі 3 побудовано релятивістський оператор взаємодії двох квазімолекулярних електронів через поле віртуальних фотонів з випромінюванням (поглинанням) реального фотона, який є узагальненням стандартного оператора Брейта (1).

II. МАТРИЦЯ ЕФЕКТИВНОЇ ЕНЕРГІЇ ВЗАЄМОДІЇ ДВОХ КВАЗІМОЛЕКУЛЯРНИХ ЕЛЕКТРОНІВ, ЩО ПЕРЕБУВАЮТЬ НА ДОВІЛЬНІЙ ВІДСТАНІ ОДИН ВІД ОДНОГО

Описуючи квазімолекулу $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$ методами квантової електродинаміки, ми розглядаємо її як систему з двох електронів, що взаємодіють один з одним через квантоване електромагнітне поле і рухаються у зовнішньому (електричному) полі двох нерухомих ядер A^{Z_a+} , B^{Z_b+} із зарядами Z_a , Z_b , розташованих на відстані R один від одного. Ядра при цьому вважаються нескінченно важкими, точковими й безструктурними.

Найпростішими такими системами є двоелектронні гетероядерні квазімолекули HeH^+ , HeBe^{4+} , HeC^{6+} тощо. Такі квазімолекули утворюються в атмосфері зірок, в експериментах із термоядерною плазмою і з атомними (чи йонними) пучками. Як об'єкти для теоретичного дослідження їх можна порівняти з атомом гелію в теорії багатоелектронних атомів. Отримані тут закономірності й розвинуті теоретичні методи

можна використати потім для дослідження складніших квазімолекулярних об'єктів.

Квантово-електродинамічна теорія збурень, базована на S -матричному формалізмі й фейнманівській діаграмній техніці, слугує природним підґрунтям для польового розгляду квантовомеханічних задач. Вона дає змогу виразити через S -матрицю всі фізичні величини, що становить інтерес, у тому числі й потенціали (обмінної й далекодійної) взаємодії частинок у процесі зіткнення двоелектронного атома $A^{(Z_a-2)+}$ з повільним багатозарядним іоном B^{Z_b+} , а для розрахунку S -матриці використовувати стандартні правила Фейнмана, сформульовані у квантовій електродинаміці. У своїй стандартній квантовомеханічній формі (див., наприклад, [3, 4, 8]) матричний елемент двоелектронної обмінної взаємодії атома $A^{(Z_a-2)+}$ з іоном B^{Z_b+} визначається як недіагональний матричний елемент оператора міжелектронної взаємодії на (адіабатичних) електронних хвильових функціях квазімолекули $(AB)^{(Z_a+Z_b-2)+}$, що відповідають різним локалізаціям електронів у початковому й кінцевому станах. У використовуваному нижче S -матричному підході цей матричний елемент є складовою частиною загальнішого матричного елемента оператора ефективної енергії взаємодії системи двох квазімолекулярних електронів із зовнішнім полем випромінювання. При цьому розглядаються ефекти третього порядку квантової електродинаміки, котрі включають у себе віртуальний обмін фотонами між електронами і випромінювання або поглинання реального фотона. Фейнманівські діаграми цих ефектів зображено на рис. 1. В цих ефектах розділені дві частини взаємодії, кожна з яких вправує проміжні стани в квазімолекулярному спектрі з додатною або від'ємною частотою.

Щоб підійти до розв'язання поставленої задачі, розглянемо процеси взаємодії двох розведених на різні ядра квазімолекулярних електронів, що супроводжуються випромінюванням або поглинанням реальних фотонів. При цьому ми не будемо вважати міжелектронні відстані r_{12} малими порівняно з характерними довжинами хвиль $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ у спектрі взаємодіючих електронів, як це робилось в попередніх працях [15, 22, 23]; всі отримані нижче результати справедливі при будь-яких, в тому числі і як завгодно великих, міжелектронних відстанях. З такою ситуацією можна зустрітися (див. огляд [4]) при знаходженні асимптотики ($R \rightarrow \infty$) обмінної взаємодії, відповідальної за перебіг багатоелектронних процесів з перерозподілом при повільних зіткненнях багатозарядних іонів з атомами. Типовий приклад процесу з перерозподілом, який відбувається завдяки безпосередній взаємодії двох розведених на різні ядра електронів, – квазірезонансна двоелектронна перезарядка атомів $A^{(Z_a-2)+}$ (наприклад, гелію He) на багатозарядних іонах B^{Z_b+} (азоту N^{5+} [24], аргону Ar^{6+} [25], вуглецю C^{4+} [3-5]). При швидкостях зіткнення, менших орбітальних швидкостей зв'язаних електронів, двоелектронне захоплення відбувається на великих відстанях між атомними частинками, що зіштовхуються: $R \sim r_{12} \gg 1$. В робочій (тобто асимптотичній) області меж'ядерних відстаней процес іде в основному

як накладання двох непружних переходів для кожного електрона окремо: електрон із зовнішньої (внутрішньої) орбіти атома $A^{(Z_a-2)+}$ переходить на внутрішню (зовнішню) орбіту атома $B^{(Z_b-2)+}$. Непружні переходи можливі тільки в результаті взаємодії електронів один з одним через поле віртуальних фотонів. Результатом вказаних “перехресних” переходів електронів [3, 4] є заселення проміжних збуджених станів налітаючого багатозарядного іона з подальшим випромінюванням фотонів у короткохвильовому ультрафіолетовому та довгохвильовому рентгенівському діапазонах спектра.

Останнім часом з'явилися праці (див., наприклад, [26]), де методами оптичної спектроскопії було визначено перерізи випромінювання для окремих переходів у збуджених багатозарядних іонах, що утворюються в процесі захоплення електронів іонами із зарядами $Z_b = 3 \div 8$ ($Z_b = 10, 18, 36$) у атомів гелію (аргону) і молекул водню. Зокрема, існування радіаційної двоелектронної перезарядки було підтверджено в експериментах [24] при зіткненнях іонів N^{5+} з атомами гелію при енергіях 0,357-4,28 кеВ на одиницю заряду, де спостерігалось випромінювання лінії 76,5 нм (перехід $2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^1P$ в N^{3+}). Перейдемо тепер до визначення S -матриці розглядуваних ефектів третього порядку квантової електродинаміки з діаграмами Фейнмана, зображеними на рис. 1. Нехай індекси m і n позначають сукупності квантових чисел початкових станів електронів, а p і r – кінцевих станів. Згідно загальних правил, сформульованих, наприклад, в [22], ми отримуємо наступний вираз для матричного елемента

$$S_{i \rightarrow f}^{(3)} = S_{mn,pr}^{(3)} - S_{nm,pr}^{(3)}, \quad (2)$$

де

$$S_{mn,pr}^{(3)} = -ie^3 \int \bar{\Psi}_r(x'_1) \bar{\Psi}_p(x''_2) \mathcal{K}_{12}^{(3)}(1, 2; 3) \times \Psi_m(x''_1) \Psi_n(x'''_2) d^4x'_1 d^4x''_1 d^4x'''_2, \quad (3)$$

а $S_{nm,pr}^{(3)}$ відрізняється від $S_{mn,pr}^{(3)}$ перестановкою місцями індексів m і n . У виразі (3), як і надалі, ми використовуємо одиниці $\hbar = c = 1$ і такі позначення: $e = -|e|$ – заряд електрона, $\Psi_{m(n)}$ – розв'язки рівняння Дірака з потенціалом двох кулонівських центрів для заданих початкових електронних станів $m(n)$, $\bar{\Psi}_{r(p)} \equiv \Psi^{+\gamma_4}$, Ψ^+ – ермітово-спряжені двоцентрові хвильові функції кінцевих електронних станів $r(p)$, $x \equiv (\mathbf{r}, it)$ – чотиривимірний вектор, а \mathbf{r} – звичайний тривимірний радіус-вектор електрона стосовно до ядра A^{Z_a+} або B^{Z_b+} . Індеси 1 і 2 використовуємо для позначення величин, що належать до різних електронів.

Використовуючи стандартні правила відповідності [22], неважко пересвідчитися, що оператор $\mathcal{K}_{12}^{(3)}(1, 2, 3)$, який фігурує у формулі (3), має таку аналітичну структуру:

$$\mathcal{K}_{12}^{(3)}(1, 2; 3) = \hat{A}(x'_1) S(x'_1, x''_1) \gamma''_{\mu_1} D(x''_1 - x'''_2) \gamma'''_{\mu_2} + \gamma'_{\mu_1} S(x'_1, x''_1) \hat{A}(x''_1) \gamma'''_{\mu_2} D(x'_1 - x'''_2). \quad (4)$$

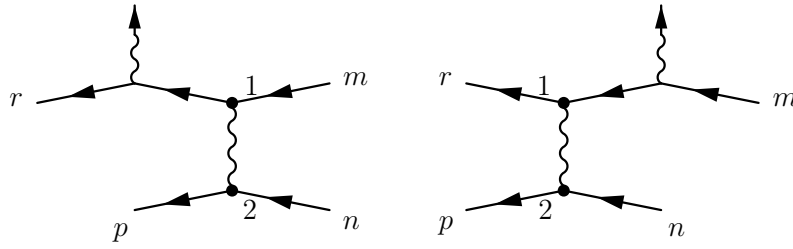


Рис. 1. Фейнманівські діаграми ефектів третього порядку КЕД для взаємодії двох квазімолекулярних електронів із випромінюванням або поглинанням реального фотона.

Тут $\gamma_\mu \equiv (\gamma, \gamma_4)$ – коваріантний запис матриць Дірака, $\gamma = -i\beta\alpha$, $\gamma_4 = \beta$,

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

σ – матриці Паулі, а 0 і I – нульова й одинична (2×2)-матриці. Символом \hat{A} позначено згортку компонент 4-вектора A_μ ($\mu = 1, 2, 3, 4$) з матрицями Дірака γ_μ : $\hat{A} = \sum_\mu \gamma_\mu A_\mu$. У зображенні вторинного квантування оператор чотиривимірного потенціалу електромагнітного поля запишемо в такому вигляді:

$$A_\mu(x'_1) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} g_{\mathbf{k}} e_{\mu\mathbf{k}}^\lambda \left(\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}x'_1} + \hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+ e^{-i\mathbf{k}x'_1} \right), \quad (5)$$

де $\mathbf{k}x'_1 = \mathbf{k}\mathbf{r}'_1 - \omega_{\mathbf{k}}t'_1$ – скалярний добуток чотиривимірного вектора $x'_1 = (\mathbf{r}'_1, it'_1)$ і чотиривимірного хвильового вектора $k = (\mathbf{k}, i\omega_{\mathbf{k}})$, що задовольняє умову $k^2 = \mathbf{k}^2 - \omega_{\mathbf{k}}^2 = 0$, $\omega_{\mathbf{k}} \equiv \omega$ – частота реальних фотонів, $e_{\mu\mathbf{k}}^\lambda$ – одиничні вектори поляризації реальних фотонів (причому значення $\lambda = 1, 2$ відповідають поперечній поляризації); $\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}^+$ і $\hat{C}_{\mathbf{k}\lambda}$ – оператори породження і знищення реальних фотонів у станах із поляризацією $\lambda = 1, 2$, імпульсом \mathbf{k} та енергією ω . Константи зв'язку $g_{\mathbf{k}} = (2\pi/\omega\Omega)^{1/2}$ містять нормувальний об'єм Ω , і оскільки він не буде входити в остаточні вирази, надалі вважатимемо $\Omega = 1$.

Із внутрішніми електронними лініями на діаграмах Фейнмана рис. 1 зіставляємо електронний пропагатор у картині Фаррі [22]:

$$S(x'_1, x''_1) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' e^{i\omega''(t'_1 - t''_1)} \times \sum_{l_{\pm}} \frac{\Psi_l(\mathbf{r}'_1) \bar{\Psi}_l(\mathbf{r}''_1)}{\omega_l(1 - i0) + \omega''}. \quad (6)$$

Підсумовуємо в (6) за всіма проміжними електронними станами як з додатними ($l = l_+$), так і з від'ємними ($l = l_-$) частотами. Внутрішнім фотонним лініям у фейнманівській калібровці відповідає пропагатор

$$D(x''_1 - x'''_1) = \frac{4\pi}{i(2\pi)^4} \times \int \frac{\exp\{i[k'(\mathbf{r}''_1 - \mathbf{r}'''_1) - \omega'(t''_1 - t'''_1)]\}}{\mathbf{k}'^2 - \omega'^2 - i0} d\mathbf{k}' d\omega', \quad (7)$$

де через \mathbf{k}' позначено хвильовий вектор віртуальних фотонів із частотою ω' .

Штрихові індекси, що супроводжують чотиривимірні вектори $x = (\mathbf{r}, it)$ і γ -матриці в операторі (4) та хвильових функціях, визначають області інтегрування в S -матриці (3) за просторово-часовими координатами взаємодіючих частинок. При цьому матриці Дірака γ_μ з різними штриховими індексами комутовують між собою.

Матричний елемент $S_{mn,pr}^{(3)}$ можна зобразити у вигляді, який зручний для застосувань і допускає просте фізичне тлумачення. Виділімо для цього у хвильових функціях, що входять у вираз (3), часові множники

$$\Psi_m(x''_1) = \Psi_m(\mathbf{r}''_1) e^{-i\omega_m t''_1} \quad (8)$$

і аналогічно для Ψ_n , Ψ_r та Ψ_p . Перейдімо тепер від S -матриці до матриці ефективної енергії взаємодії системи двох зв'язаних електронів $U_{mn,pr}^{(3)}$, що визначається співвідношенням:

$$S_{mn,pr}^{(3)} = -2\pi i U_{mn,pr}^{(3)} \delta(\omega + \omega_p - \omega_m + \omega_r - \omega_n). \quad (9)$$

Тут ω_m , ω_n – частоти початкових станів електронів, а ω_r , ω_p – частоти їхніх кінцевих станів. Знак перед частотою оптичного фотона ω вказує на те, що в операторі векторного потенціалу (5) виділено додатно-частотну частину, пропорційну операторові породження фотона моди $\mathbf{k}\lambda$. Виділення у вигляді множника одновимірної δ -функції виражає, зазвичай, загальний для всіх розглянутих ефектів третього порядку (взаємодія електронів через поле віртуальних фотонів + випромінювання (поглинання) реального фотона) закон збереження енергії:

$$E_p - E_m + E_r - E_n + \hbar\omega = 0. \quad (10)$$

Тут у явному вигляді відновлено залежність від сталої Планка \hbar ; для поглинання реального фотона знак перед частотою ω в (9), (10) слід замінити на протилежний.

Підставляючи в матричний елемент (3) явні вирази (6)–(8) для пропагаторів та хвильових функцій і виконуючи інтегрування в матриці $S_{mn,pr}^{(3)}$ за часами t'_1 , t''_1 , t'''_1 , частотами і хвильовими векторами, отримаємо таку матрицю ефективної енергії взаємодії ($\hbar = c = 1$):

$$\begin{aligned}
 U_{mn,pr}^{(3)} = e^3 \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' d\mathbf{r}''' \left\{ - \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i|\omega_p - \omega_n||\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''\}}{\omega_l(1-i0) - \omega - \omega_r} \right. \\
 \times \bar{\Psi}_r(\mathbf{r}') \hat{A}(\mathbf{r}') \Psi_l(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_l(\mathbf{r}'') \gamma''_{\mu} \Psi_m(\mathbf{r}'') \bar{\Psi}_p(\mathbf{r}''') \gamma'''_{\mu} \Psi_n(\mathbf{r}''') \\
 \left. - \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''} \sum_{l_{\pm}} \frac{\exp\{i|\omega_p - \omega_n||\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''\}}{\omega_l(1-i0) + \omega - \omega_m} \bar{\Psi}_r(\mathbf{r}') \gamma'_{\mu} \Psi_l(\mathbf{r}') \bar{\Psi}_l(\mathbf{r}'') \hat{A}(\mathbf{r}'') \Psi_m(\mathbf{r}'') \bar{\Psi}_p(\mathbf{r}''') \gamma'''_{\mu} \Psi_n(\mathbf{r}''') \right\}, \quad (11)
 \end{aligned}$$

де $\Psi_{m(n)}$, $\Psi_{r(p)}$ і Ψ_l – координатні хвильові функції електронів (без часових множників), а \mathbf{r}' , \mathbf{r}'' і \mathbf{r}''' – радіус-вектори першого і другого електронів відповідно. Матриця (2) відповідає одному з восьми процесів, що відбуваються за рахунок взаємодії активних електронів через поле віртуальних фотонів і супроводжуються випромінюванням (поглинанням) реального фотона. Інші процеси можна врахувати відповідним перепозначенням хвильових функцій.

III. УЗАГАЛЬНЕНИЙ БРЕЙТІВСЬКИЙ ОПЕРАТОР

У попередньому розділі отримано загальний вираз для матриці ефективної енергії взаємодії системи двох зв'язаних квазімолекулярних електронів у зовнішньому полі випромінювання. Він має вигляд

$$U_{i \rightarrow f}^{(3)} = U_{mn,pr}^{(3)} - U_{nm,pr}^{(3)}. \quad (12)$$

Матричний елемент $U_{mn,pr}^{(3)}$, згідно з (11), можна записати так:

$$\begin{aligned}
 U_{mn,pr}^{(3)} = e^3 \int \Psi_r^+(\mathbf{r}') \Psi_p^+(\mathbf{r}''') \sum_{l_{\pm}} \left\{ \gamma'_4 \gamma'_\delta A'_\delta \frac{\Psi_l(\mathbf{r}') \Psi_l^+(\mathbf{r}'')}{\omega_l(1-i0) - \omega - \omega_r} \frac{1 - \alpha'' \alpha'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''} \exp\{i|\omega_p - \omega_n||\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''\} \right. \\
 \left. + \frac{1 - \alpha' \alpha'''}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''} \exp\{i|\omega_p - \omega_n||\mathbf{r}' - \mathbf{r}'''\} \frac{\Psi_l(\mathbf{r}') \Psi_l^+(\mathbf{r}'')}{\omega_l(1-i0) + \omega - \omega_m} \gamma''_4 \gamma''_\delta A''_\delta \right\} \\
 \times \Psi_m(\mathbf{r}'') \Psi_n(\mathbf{r}''') d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' d\mathbf{r}'''. \quad (13)
 \end{aligned}$$

Тут α' , α'' , α''' – матриці Дірака, причому оператор $\alpha''(\alpha')$ діє на функцію $\Psi_m(\mathbf{r}'')$ ($\Psi_l(\mathbf{r}')$), а оператор α''' – на функцію $\Psi_n(\mathbf{r}''')$; A_δ – компоненти векторного потенціалу без часових множників, індекс δ пробігає значення 1, 2, 3, і за індексом δ , який двічі повторюється, підсумовуємо від $\delta = 1$ до $\delta = 3$.

Розгляньмо перший доданок у (13) і виділимо в ньому множник

$$K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''; \omega_{pn}) = \frac{1 - \alpha'' \alpha'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''} \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_{pn}| |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| \right\}, \quad (14)$$

який відповідає за обмін віртуальними фотонами між двома електронами. Тут $\omega_{pn} = \omega_p - \omega_n$ і використано систему одиниць, у якій $c \neq 1$. Наявність у цьому виразі “фактора запізнювання” $\exp\{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''\}$, залежного явно від початкової й кінцевої енергій системи, не дає змогу в загальному випадку ввести оператор взаємодії двох електронів $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$, матричним елементом якого було б $U_{mn,pr}^{(3)}$. Проте в наближенні малих швидкостей ($v/c \ll 1$, v – швидкість електронів в атомі, c – швидкість світла у вакуумі) такий оператор можна побудувати.

Оскільки вираз (13) справедливий і в границі об'єднаного атома ($R \rightarrow 0$, $Z = Z_a + Z_b$), то процедуру замі-

ни фактора запізнювання в (14) на відповідний оператор доцільно простежити спочатку на простому прикладі двох взаємодіючих електронів у гелієподібному атомі. Для характерного значення ω_{pr} у цьому випадку маємо оцінку $|\omega_{pn}| \sim m(\alpha Z)^2$, де $Z = Z_a + Z_b$ – сумарний заряд ядер A^{Z_a+} і B^{Z_b+} . Урахуємо далі, що характерне значення міжелектронної відстані визначається атомними розмірами: $|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| \sim (m\alpha Z)^{-1}$. Отже, при $\alpha Z \ll 1$ показник експоненти в (14) – мала величина порядку αZ , так що можна розкласти експоненту в ряд за степенями $1/c$ з точністю до членів порядку c^{-2} включно. Перехід від указанного розкладу до його операторної форми в c^{-2} -наближенні здійснюється шляхом належної симетризації всіх отриманих членів у c^{-1} -розкладі фактора запізнювання (14) і подальшої заміни в ньому (за допомогою рівняння Дірака) частот на відповідні оператори Гамільтона окремих електронів. У результаті ми приходимо до відомого виразу (1) для оператора Брейта [15, 22, 23], який залежить не тільки від відносного положення пари електронів, але й безпосередньо від їхніх спінових змінних.

Тепер ми можемо стверджувати, що брейтівський вираз (1) доти є добрим наближенням до релятивістської взаємодії між двома електронами, поки міже-

лектронні відстані набагато менші від характерних довжин хвиль $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$ у спектрі взаємодіючих електронів. Проте результати будуть помилковими, якщо ми користуватимемося виразом (1) у пов'язаних із повільними атомними зіткненнями двоелектронних задачах, оскільки в цьому випадку, навпаки, робочими є великі міжелектронні відстані.

Із принципово іншою ситуацією ми стикаємося при взаємодії двох розведених на різні ядра квазімолекулярних електронів, що перебувають на довільній відстані один від одного. Тут ситуація ускладнюється тим, що в цікавій для нас (асимптотичній) області зміни міжелектронних відстаней абсолютне значення показників експонент в $U_{mn,pr}^{(3)}$ -матриці (13) стає більшим за одиницю, а самі експоненти виявляються швидко осцилюючими функціями. Указана обставина унеможливило пряме використання кількох перших членів c^{-1} -розкладу фактора запізнювання для побудови релятивістського оператора взаємодії двох зв'язаних електронів при будь-яких, у тому числі як завгодно великих, відстанях між ними. Водночас у багатьох двоелектронних задачах теорії повільних атомних зіткнень (наприклад, у задачі про квазірезонансну двоелектронну перезарядку типу $\text{He} + \text{N}^{5+} \rightarrow \text{He}^{2+} + \text{N}^{3+}$) саме ця далека область міжелектронних відстаней визначає ймовірність процесів із перерозподілом в асимптотичній границі ($R \rightarrow \infty$). У цій, як ми її називатимемо, області далеких електронних кореляцій ефекти запізнювання взаємодії заряджених частинок істотно підсилюються.

Як уже згадувалось у Вступі, принципову можливість узагальнення брейтівського оператора на квазімолекулярні електрони встановлено в працях [19, 20] на прикладі задачі про взаємодію двох зв'язаних електронів, що належать двом водневоподібним атомам, які перебувають на довільній відстані один від одного. Проте, звернувшись до цих праць, ми виявили [17], що отриманий там узагальнений брейтівський оператор не має властивості симетричності стосовно до взаємодіючих частинок і тому не може застосовуватися в послідовній релятивістській квантовій теорії. Як наголошувалося в [17], істотний недолік прийнятої в працях [19, 20] процедури переходу від фактора запізнювання до відповідного оператора полягає в нерівноправному розгляді пари взаємодіючих частинок. Саме тому проблема двох квазімолекулярних електронів із випромінюванням (поглинанням) реального фотона вимагає подальшого ретельного вивчення.

Метод, який ми використовуватимемо, розв'язуючи важливу квантово-електродинамічну проблему, є подальшим розвитком методу, застосованого в працях [17, 19] при розв'язанні задачі про взаємодію двох атомних електронів у межах ефектів другого порядку квантової електродинаміки. Як буде показано далі, послідовне проведення процедури симетризації фактора запізнювання щодо до обох частинок приводить до виникнення додаткових членів у релятивістському операторі взаємодії двох електронів у порівнянні як із звичайним оператором Брейта (1), так і з узагальненим брейтівським оператором із праці [20].

Як відомо [3, 4, 17], експоненціальна залежність одноелектронних двоцентрових хвильових функцій від координат приводить до того, що при великих між'ядерних відстанях R інтегрування за \mathbf{r}'' чи \mathbf{r}' у виразі (13) виявляється зосередженим поблизу ядра B^{Z_b+} . Інтегрування за \mathbf{r}''' в (13) в основному зосереджено в околі ядра A^{Z_a+} , так що при достатньо великих R у відповідних інтегралах матриці (13) найбільш суттєвими є дві сферичні області координат $|\mathbf{r}' - \mathbf{R}|$ ($|\mathbf{r}'' - \mathbf{R}| \lesssim (m\alpha Z_b)^{-1}$ і $|\mathbf{r}'''| \lesssim (m\alpha Z_a)^{-1}$), які фізично відповідають перебуванню електронів біля різних центрів. Для вказаних областей електронних координат слід будувати оператор $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$, що описує обмін віртуальними фотонами у відповідних членах матриці (13).

Після цих попередніх зауважень перейдімо безпосередньо до виведення релятивістського оператора взаємодії двох квазімолекулярних електронів, що перебувають на довільних відстанях один від одного. Вихідним об'єктом для нас є двоелектронний атом $A^{(Z_a-2)+}$, на довільній відстані R від якого є голе ядро B^{Z_b+} . Розглянемо далі найбільш типову (для процесів із перерозподілом) ситуацію, коли один з активних електронів атома $A^{(Z_a-2)+}$, скажімо перший електрон, протунелював в околі "чужого" ядра B^{Z_b+} , а другий залишився біля "свого" ядра $A^{(Z_a-2)+}$. Якщо області просторової локалізації електронів ядер (першого — поблизу ядра B^{Z_b+} , а другого — поблизу A^{Z_a+}) доволі малі (порядку атомних розмірів) і достатньо віддалені одна від одної, то при виконанні умови $\Delta r < R < \infty$ відносну відстань між електронами можна розкласти в ряд за степенями відношення $\Delta r/R$:

$$|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| = R \left(1 + \frac{\mathbf{R}\Delta\mathbf{r}}{R^2} + \frac{M}{R} \right). \quad (15)$$

Тут $\Delta\mathbf{r} = \mathbf{r}_{1b} - \mathbf{r}_{2a}$, $\Delta r = |\Delta\mathbf{r}|$, \mathbf{r}_{1b} (\mathbf{r}_{2a}) — радіус-вектор 1-го (2-го) електрона щодо ядра B^{Z_b+} (A^{Z_a+}), а $M = M(\Delta\mathbf{r}, \mathbf{R})$ — малі поправки, які включають вищі степені відношення $\Delta r/R$. При цьому малий параметр $\Delta r/R$ виділяє конфігурацію, яка фізично відповідає перебуванню електронів біля різних ядер.

У попередніх працях [15, 22, 23] при побудові розкладу фактора запізнювання припускалося, що єдиним малим параметром є величина $\omega_0 r/c \ll 1$ (або ж формально $1/c$), де r — відстань між електронами. Очевидно, що ця умова виконується для не надто великих відстаней між електронами, наприклад, внутрішньоатомних відстаней у гелієподібних атомах. Нижче асимптотичний розклад K -фактора (14) будуватимемо для випадку, коли природними малими параметрами є одночасно $1/c$ і $\Delta r/R$. Таке виділення малих параметрів відрізняється від граничного випадку одного (об'єданого) гелієподібного атома ($R = 0$), який дослідив Дрейк [23], і в межах використовуваної квазімолекулярної моделі реалізується, наприклад, коли електрони перебувають далеко один від одного — біля різних атомів.

Щоб надати точного змісту K -фактору (14), перетворимо його так:

$$K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''; \omega_{pn}) = \frac{1 - \boldsymbol{\alpha}'' \boldsymbol{\alpha}'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|} \quad (16)$$

$$\times e^{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| R} e^{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| (|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| - R)}.$$

Для квазімолекулярних електронів, розведених на різні ядра, проведене перетворення зручне тим, що відокремлює у вигляді множника (залежний від R) релятивістський фактор $\exp\{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| R\}$ підсилення ефектів динамічного запізнювання взаємодії, які кодуються залежністю цього фактора від початкової й кінцевої енергій системи: $\omega_{pn} = E_p - E_n$. Проте основний аргумент на користь доцільності такого перетворення полягає в тому, що за його допомогою задача розкладу фактора запізнювання зводиться до розкладу спеціалізованого (для розгляданої квазімолекулярної моделі з двома електронами біля різних центрів) експоненціального множника $\exp\{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| (|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| - R)\}$. Наявність різниці $|\mathbf{r}'' -$

$\mathbf{r}'''| - R$ в показнику останньої експоненти вказує на те, що такий розклад повинен вестися не лише за степенями $1/c$, але також і за степенями малого параметра $\Delta r/R$.

Надалі вважатимемо, що виконується умова

$$\frac{1}{c} |\omega_{pn}| \frac{R \Delta r}{R} \ll 1. \quad (17)$$

При цьому відстань R між ядрами може змінюватися в межах $\Delta r \leq R < \infty$ і в нашій задачі має динамічний зміст, тобто входить у вираз для спектра енергій.

Проведений вище аналіз показує, що при виконанні умови (17) показник експоненти $\exp\{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| (|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| - R)\}$, який фігурує у правій частині (16), малий порівняно з одиницею. Цей факт дає змогу формально розкласти K -фактор (16) у ряд за степенями $1/c$. Із точністю до членів порядку c^{-2} включно маємо розклад

$$K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''; \omega_{pn}) = (1 - \boldsymbol{\alpha}'' \boldsymbol{\alpha}''') \exp\left\{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| R\right\}$$

$$\times \left\{ f_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') + \frac{i}{c} |\omega_{pn}| f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') - \frac{1}{2c^2} \omega_{pn}^2 f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \right\}. \quad (18)$$

Наведемо також явний вигляд коефіцієнтних функцій f_0 , f_1 і f_2 , що визначають, зрештою, залежність шуканого релятивістського оператора $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ від просторового положення електронів:

$$f_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') = \frac{1}{g_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')} = \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|},$$

$$f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') = \frac{g_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')}{g_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')} = \frac{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| - R}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|},$$

$$f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') = \frac{g_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')}{g_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')} = \frac{(|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| - R)^2}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|}. \quad (19)$$

Скористаймося тепер тим, що розглядана задача містить (поряд з $1/c$) ще один малий параметр — $\Delta r/R$, і розкладемо в ряд за степенями $\Delta r/R$ наявні у правих частинах (19) функції g_0 , g_1 та g_2 :

$$g_0(\Delta \mathbf{r}, \mathbf{R}) = R \left[1 + \frac{R \Delta \mathbf{r}}{R^2} + \frac{M}{R} \right],$$

$$g_1(\Delta \mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{R \Delta \mathbf{r}}{R} + M,$$

$$g_2(\Delta \mathbf{r}, \mathbf{R}) = \left[\frac{R \Delta \mathbf{r}}{R} + M \right]^2. \quad (20)$$

Слід зазначити, що наведені формули (15), (20) мають у даному випадку евристичний характер, так як в них записані в явному вигляді лише головні члени асимптотичних розкладів.

Із виразів (15) і (20) формально випливає, що параметром розкладу (18) є насправді не $1/c$, а мала

безрозмірна величина (17). При цьому очевидно, що коефіцієнти розкладу (18), своєю чергою, є степеневими рядами за $\Delta r/R$. Фактично, це означає, що в разі, коли відстань між електронами порівнянна з відстанню між ядрами, можна скористатися формулами (20) і перерозкласти наявні у (18) функції f_0 , f_1 і f_2 в степеневі ряди за $\Delta r/R$. Якщо не виконувати такого перерозкладу, то в замкненому вигляді можна врахувати (в c^{-2} -наближенні) взаємодію квазімолекулярних електронів усіх мультипольностей.

Виключимо у виразі (18) частоти, використовуючи рівняння Дірака

$$\hat{H}'' \Psi_m(\mathbf{r}'') = \omega_m \Psi_m(\mathbf{r}''),$$

$$\hat{H}''' \Psi_n(\mathbf{r}''') = \omega_n \Psi_n(\mathbf{r}'''). \quad (21)$$

Очевидно, що для повного врахування ефектів запізнювання у взаємодії електронів ми повинні перетворити розклад K -фактора (18) так, щоб він набув форми, симетричної щодо обох електронів. Нижче ми виконаємо таку симетризацію й одночасно представимо шуканий релятивістський оператор $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ у вигляді, зручному для розрахунків за теорією збурень.

Для переходу від частот до операторів перетворимо спочатку другий член у (18) в дещо іншу еквівалентну форму. А саме, за допомогою співвідношення $\omega_n - \omega_p = R_{1l}(\omega_l - \omega_m)$ розіб'ємо його на дві групи доданків:

$$|\omega_{pn}|f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \equiv \pm \frac{1}{2} \quad (22)$$

$$\times [R_{1l}(\omega_l - \omega_m) + (\omega_n - \omega_p)] f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''').$$

Тут $R_{1l} = (\omega_n - \omega_p)/(\omega_l - \omega_m)$, знак “+” в (22) відповідає випадку $\omega_p < \omega_n$, а знак “-” — випадку $\omega_p > \omega_n$. Оскільки при розрахунках матричних елементів (13) величина $K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''; \omega_{pn})$ завжди множиться зліва на

$\Psi_l^+(\mathbf{r}'')\Psi_p^+(\mathbf{r}''')$, а справа — на $\Psi_m(\mathbf{r}'')\Psi_n(\mathbf{r}''')$ і інтегрується за \mathbf{r}'' і \mathbf{r}''' , то в останньому виразі можна замінити частоти ω_m і ω_n операторами \hat{H}'' і \hat{H}''' , розташованими праворуч від множника $f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$, а частоти ω_l і ω_p — операторами \hat{H}'' і \hat{H}''' , розташованими ліворуч від $f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$. Після цих перетворень вираз у правій частині (22) набуває вигляду:

$$|\omega_{pn}|f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \rightarrow \pm \frac{1}{2} \left\{ R_{1l} [\hat{H}'' f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') - f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \hat{H}''] + f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \hat{H}''' - \hat{H}''' f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \right\}$$

$$= \pm \frac{1}{2} \left\{ R_{1l} [\hat{H}'', f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')] + [f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''), \hat{H}'''] \right\}. \quad (23)$$

Тут і надалі квадратні дужки позначають комутатори відповідних величин.

Враховуючи співвідношення $\omega_n - \omega_p = R_{1l}(\omega_l - \omega_m)$, перетворимо до симетричного вигляду третій член в розкладі (18):

$$-\omega_{pn}^2 f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') = R_{1l}(\omega_l - \omega_m)(\omega_p - \omega_n) f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''). \quad (24)$$

Замінімо частоти в (24) операторами аналогічно до того, як це було зроблено в (23). Тоді одержимо наступне перетворення:

$$-\omega_{pn}^2 f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \rightarrow R_{1l} \left\{ f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \hat{H}'' \hat{H}''' - \hat{H}'' f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \hat{H}''' - \hat{H}''' f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \hat{H}'' + \hat{H}'' \hat{H}''' f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \right\}$$

$$= R_{1l} \left[\hat{H}'', [\hat{H}''', f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')] \right]. \quad (25)$$

Вносячи операторні вирази (23) і (25) у праву частину (18), приходимо до такого перетворення K -фактора:

$$K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''; \omega_{pn}) \rightarrow (1 - \alpha'' \alpha''') e^{\frac{i}{c} |\omega_{pn}| R}$$

$$\times \left\{ f_0(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') \pm \frac{i}{2c} \left(R_{1l} [\hat{H}'', f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')] + [f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'''), \hat{H}'''] \right) + \frac{R_{1l}}{2c^2} \left[\hat{H}'', [\hat{H}''', f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')] \right] \right\}. \quad (26)$$

Наявні тут функції f_0 , f_1 та f_2 , як і раніше, даються рівностями (19). Зазначимо, що знайдене зображення (26) для K -фактора забезпечує рівноправність опису пари взаємодіючих частинок.

Таким чином, в нашому розгляді K -фактор (14) представлений подвійним розкладом (18), (20) за степенями $1/c$ і $\Delta r/R$. При цьому в розкладі за $1/c$ ми обмежились першими трьома членами, а в розкладі за малим параметром $\Delta r/R$ жодних обмежень немає, оскільки функція M містить всі вищі поправкові члени. З цієї причини весь подальший розгляд враховує взаємодію двох квазімолекулярних електронів довільної мультипольності.

Рух окремих електронів у двоцентровій системі $A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+}$ описується діраківським одноелектронним гамільтоніаном для задачі двох фіксованих кулонівських центрів, розташованих на відстані R один від одного:

$$\hat{H}'' = c\alpha'' \hat{\mathbf{p}}'' + \beta'' mc^2 - \frac{Z_a e^2}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{R}_a|} - \frac{Z_b e^2}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{R}_b|}, \quad (27)$$

$$\hat{H}''' = c\alpha''' \hat{\mathbf{p}}''' + \beta''' mc^2 - \frac{Z_a e^2}{|\mathbf{r}''' - \mathbf{R}_a|} - \frac{Z_b e^2}{|\mathbf{r}''' - \mathbf{R}_b|}.$$

Ми ввели сюди явно $\hbar \neq 1$, $Z_a e$ і $Z_b e$ — заряди точкових ядер, а через $\hat{\mathbf{p}}'' = -i\hbar \nabla''$ і $\hat{\mathbf{p}}''' = -i\hbar \nabla'''$ позначено оператори імпульсу електронів. Усі радіус-вектори в (27) відраховуються від початку лабораторної системи координат, причім \mathbf{R}_a і \mathbf{R}_b — радіус-вектори ядер A^{Z_a+} та B^{Z_b+} відповідно, а між'ядерна відстань $R = |\mathbf{R}_b - \mathbf{R}_a|$.

Маючи на увазі виконані обчислення, легко зрозуміти, що результат (26) можна очевидним чином узагальнити на той випадок, коли в оператори Гамільтона (27) включаються додаткові члени, які визначають, наприклад, неточковість і спин ядра, екранування поля ядра електронною оболонкою атомного залишку тощо. Слід, проте, пам'ятати, що за винятком граничних випадків (наприклад, великих між'ядерних відстаней [27]) задача на власні значення (21) для такого гамільтоніана не розв'язується у явному вигляді.

Обчислимо тепер комутатори, що входять у праву частину (26). Зазначимо, перш за все, що не комутуючим з $f_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ і $f_2(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ є тільки один член в $\hat{H}''(\hat{H}''')$, а саме $c\alpha'' \hat{\mathbf{p}}''(c\alpha''' \hat{\mathbf{p}}''')$. З цієї причини у виразах (27) для операторів \hat{H}'' , \hat{H}''' при підстановці їх

під знак комутаторів в (26) можна відразу відкинути доданки, що не містять матриць α'' , α''' :

$$\begin{aligned} [\hat{H}'', f_1] &= c[\alpha'' \hat{\mathbf{p}}'', f_1], \quad [f_1, \hat{H}'''] = c[f_1, \alpha''' \hat{\mathbf{p}}'''], \\ [\hat{H}'', [\hat{H}''', f_2]] &= c^2 [\alpha'' \hat{\mathbf{p}}'', [\alpha''' \hat{\mathbf{p}}''', f_2]]. \end{aligned} \quad (28)$$

Обчислюючи комутатори (28) за допомогою формул $[\alpha'' \hat{\mathbf{p}}'', f_{1,2}] = \alpha'' \hat{\mathbf{p}}'' f_{1,2}$, $[\alpha''' \hat{\mathbf{p}}''', f_{1,2}] = \alpha''' \hat{\mathbf{p}}''' f_{1,2}$, знайдемо, що вклади другого і третього доданків в розкладі (26) визначаються такими операторними виразами:

$$\pm \frac{i}{2c} \left(R_{1l} [\hat{H}'', f_1] + [f_1, \hat{H}'''] \right) = \pm \hbar R \frac{R_{1l} \alpha'' \mathbf{n} + \alpha''' \mathbf{n}}{2|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|^2}, \quad (29)$$

$$\frac{1}{2c} R_{1l} [\hat{H}'', [\hat{H}''', f_2]] = -\frac{\hbar^2}{2} R_{1l} \left[(\alpha'' \nabla'') (\alpha''' \nabla''') |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''| + R^2 (\alpha'' \nabla'') (\alpha''' \nabla''') \frac{1}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|} \right], \quad (30)$$

де $\mathbf{n} = (\mathbf{r}'' - \mathbf{r}''')/|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|$. Таким чином, оператор, що описує (в $U_{mn,pr}^{(3)}$ -матриці (13)) взаємодію двох електронів через поле віртуальних фотонів, матиме наступний вигляд

$$\begin{aligned} B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') &= e^2 \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_{pn}| R \right\} \left\{ \frac{1 - \alpha'' \alpha'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}| \pm R \frac{R_{1l} \alpha'' \mathbf{n} + \alpha''' \mathbf{n}}{2|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}|} \right. \\ &\quad \left. + \frac{R_{1l}}{2} \left(\frac{\alpha'' \alpha''' - (\alpha'' \mathbf{n})(\alpha''' \mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}| - R^2 \frac{\alpha'' \alpha''' - 3(\alpha'' \mathbf{n})(\alpha''' \mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}|^3} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Тут знак “+” перед членом, що містить множник R , відповідає випадку $\omega_p < \omega_n$, а знак “-” – випадку $\omega_p > \omega_n$. Перший доданок в (31) являє собою енергію миттєвої (кулонівської) взаємодії електронів, а інші враховують поправки, зумовлені запізнюванням релятивістської взаємодії і наявністю електронних спінів.

Аналогічним чином розглянемо обмін віртуальними фотонами у другому доданку матриці (13) (друга діаграма рис. 1). Після необхідних перетворень відповідного фактора запізнювання отримаємо оператор $B_{2l}(\mathbf{r}', \mathbf{r}''')$, що має вигляд, аналогічний (31), але із заміною коефіцієнта R_{1l} на $R_{2l} = (\omega_n - \omega_p)/(\omega_r - \omega_l)$.

У частинному випадку резонансного обміну фотонами маємо $R_{1l} = 1$ і оператор (31) переходить в узагальнений брейтівський оператор [17] для взаємодії двох квазімолекулярних електронів без випромінювання або поглинання реальних фотонів. Умова $R_{1l} = 1$ означає, що перехід системи двох частинок в проміжний стан повинен здійснюватися відповідно до закону збереження енергії: $E_n - E_p = E_l - E_m$. При $R_{1l} = 1$ і $R \rightarrow 0$ (границя об'єданого атома) оператор (31), як і належить, переходить у відомий оператор Брейта (1) для взаємодії двох атомних електронів в гелієподібних атомах. Тим самим оператор (31) можна розглядати як природне узагальнення брейтівського оператора [15, 22] на область як завгодно великих міжелектронних відстаней, де вплив ефекту динамічного запізнювання на спінові взаємодії електронів підсилюється. Нетривіальним моментом такого узагальнення є наявність у виразі (31) для $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ додаткових (у порівнянні з брейтівським виразом (1)) запізнюючих членів, залежних від розмірного параметра

R , а також від спінових операторів електронів. Значимо також, що цей додатковий вклад у $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ носить принципово релятивістський характер і з'являється за рахунок додаткового запізнювання релятивістської взаємодії двох квазімолекулярних електронів, що знаходяться на далеких відстанях один від одного в порівнянні з $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$.

У відповідності з уточненням оператора Брейта, зробленим у цій праці, вираз (31) доречно було б назвати узагальненим радіаційним брейтівським оператором далекодіяного типу (щоб підкреслити можливість його використання при розв'язанні широкого кола двоелектронних задач фізики радіаційних атомно-молекулярних зіткнень [2, 6, 10–14], теорії квазімолекулярної оже-спектроскопії [7], а також низки важливих проблем нелінійної і квантової оптики [17–21, 23]).

Звернемо увагу також на те, що отриманий вираз (31) для оператора $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ виявляється симетричним відносно обох електронів. Це стало результатом належної симетризації всіх утриманих членів в розкладі (18) по відношенню до обох електронів. Значимо попутно, що симетричне зображення для релятивістського оператора взаємодії двох квазімолекулярних електронів було спочатку отримано в праці [17] на основі послідовного розгляду ефектів 2-го порядку квантової електродинаміки, що включають в себе віртуальний обмін фотонами всіх поляризацій.

В циклі праць [18–21], що фактично започаткували сучасний етап дослідження проблеми двох електронів, у рамках ефектів третього порядку квантової електродинаміки було отримано наступний результат для релятивістського оператора взаємодії двох атомних електронів на довільній відстані один від одного:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''') = e^2 \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_{pn}| R \right\} & \left\{ \frac{1 - \boldsymbol{\alpha}'' \boldsymbol{\alpha}'''}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''} + R \frac{\boldsymbol{\alpha}''' \mathbf{n}}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}^2} \right. \\ & \left. + \frac{R_{1l}}{2} \left(\frac{\boldsymbol{\alpha}'' \boldsymbol{\alpha}''' - (\boldsymbol{\alpha}'' \mathbf{n})(\boldsymbol{\alpha}''' \mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''} - R^2 \frac{\boldsymbol{\alpha}'' \boldsymbol{\alpha}''' - 3(\boldsymbol{\alpha}'' \mathbf{n})(\boldsymbol{\alpha}''' \mathbf{n})}{|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}^3} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (32)$$

Принциповим недоліком цього оператора є відсутність симетрії в описі пари взаємодіючих частинок. Найлегше це побачити із структури другого доданка в (32), пропорційного R .

Важливе зауваження, яке випливає з порівняння формул (31) і (32), полягає в тому, що послідовне проведення процедури симетризації двох останніх членів у розкладі фактора запізнювання (18) приводить до того, що в кінцевому виразі (31) для оператора $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ поряд із членами, відображеними в (32), з'являється також новий доданок $\pm R_{1l} R (\boldsymbol{\alpha}'' \mathbf{n}) / 2 |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''}^2$, зобов'язаний своїм походженням додатковому запізнюванню у взаємодії електронів, які перебувають на довільних відстанях один від одного. Тому при проведенні розрахунків, що ґрунтуються на використанні оператора (32) з [18–21], можна очікувати появи помилкових результатів.

IV. ВИСНОВКИ

У цій статті розв'язано задачу про взаємодію двох квазімолекулярних електронів через поле віртуальних фотонів, яка супроводжується випромінюванням або поглинанням реального фотона. Така взаємодія розглядається як ефект третього порядку квантової електродинаміки з діаграмами Фейнмана рис. 1. Викремимо основні властивості цієї взаємодії.

Є дві області конфігураційного простору, де узагальнений брейтівський оператор далекодіяного типу (31) по-різному поводить себе залежно від зміни відносної відстані між електронами $r_{12} = |\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|$. Так, наприклад, у границі об'єднаного атома ($R \rightarrow 0$) формула (31) для оператора $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ переходить у граничний (брейтівський) вираз (1), який правильно описує ефекти запізнювання релятивістської взаємодії лише при зближенні частинок на порівняно малій відстані r_{12} . Точніше можна сказати, що область застосовності брейтівського виразу (1) обмежується такою умовою на відносні координати взаємодіючих частинок:

$$\omega_0 r_{12} / c \ll 1, \quad (33)$$

де ω_0 — характерна частота в спектрі взаємодіючих електронів. Відповідну область конфігураційного простору ми будемо позначати через Ω_6 і називати областю близьких електронних кореляцій. Навпаки, в області Ω_d , де електрони розведені на різні ядра і для всіх $\Delta r \leq R < \infty$ виконується нерівність (17), брейтівський оператор (1) перестає давати адекватний опис релятивістської взаємодії між двома електронами навіть на якісному рівні. Водночас побудо-

ваний у цій праці релятивістський оператор B_{1l} (31) єдиним і рівноправним чином описує запізнювальну взаємодію двох електронів як в області Ω_6 близьких, так і в області Ω_d далеких електронних кореляцій, і тим самим може бути застосований при розв'язанні багатьох двоелектронних задач атомної й молекулярної спектроскопії, астрофізики, теорії повільних атомних зіткнень тощо. Крім того, релятивістський оператор взаємодії двох електронів (31) слід застосовувати при математичному моделюванні атомних кластерів [28], дослідженні оптичних властивостей різних наноструктурних систем в інтенсивних оптичних полях [29, 30], а також при розв'язанні низки важливих задач із запису, зчитування й передачі квантової інформації від одного дворівневого атома (кубіта) до іншого [31, 32].

Для кожної області Ω_6 , Ω_d міжелектронних відстаней r_{12} характерні свої часові масштаби передачі взаємодії і, відповідно, свої розрахункові наближення, що дають змогу виділити малі параметри й урахувати різні типи проміжних станів у спектрі взаємодіючих електронів, а також різні типи взаємодій. Тим самим з'являється додаткове обґрунтування справедливості використання узагальненого оператора Брейта $B_{1l}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ при розв'язанні багатоелектронних двоцентрових задач поряд із чіткішим уявленням про неповноту тієї квантово-електродинамічної картини взаємодії двох атомних електронів, яка описується стандартним оператором Брейта (1).

Як ми бачили в попередньому розділі, при виведенні оператора Брейта (1) припускалося [22], що єдиним малим параметром, за яким слід вести розклад фактора запізнювання, є величина (33). Це означає, що поряд із характерним (середнім) часом електронних переходів $T_e = 2\pi/\omega_0$ використовується також (відповідний області Ω_6) єдиний часовий масштаб $T_b = r_{12}/c$, який можна тлумачити як час, необхідний для передачі взаємодії. При цьому повинна виконуватися умова $2\pi T_b \ll T_e$, тобто помітна зміна електронної густини в системі двох взаємодіючих електронів відбувається за час передачі взаємодії.

На достатньо великих відстанях між електронами (в області Ω_d), при яких час передачі взаємодії $T_b = R/c$ значно перевищує середній час електронних переходів T_e , в ролі природного малого параметра розкладу виступає безрозмірна величина (17). Обмін віртуальними фотонами на таких відстанях приводить до взаємодії між електронами вигляду (31), у якій поряд із кулонівською і брейтівською взаємодіями (1) містяться ще й інші релятивістські члени, що залежать від спінових операторів електронів і від між'ядерної відстані R . Поява цих членів в операторі

- (31) пов'язана з додатковим запізнюванням у взаємодії двох квазімолекулярних електронів, що перебувають на довільних, у тому числі як завгодно великих, відстанях один від одного. При цьому виявляється, що отриманий вираз (31) для релятивістського оператора $B_{II}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''')$ відрізняється від аналогічного результату (32) з [18–21] не лише наявністю додаткового (спільного) множника $\pm 1/2$ у другому доданку виразу (31), але також і додатковим членом $\pm RR_{II}(\boldsymbol{\alpha}''\mathbf{n})/2|\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'''|^2$, що враховує додаткове запізнювання у взаємодії двох квазімолекулярних електронів.
-
- [1] J. D. Gillaspay, J. Phys. B. **34**, R93 (2001).
 [2] P. Verma *et al.*, Nucl. Inst. Met. Phys. Res. B **235**, 309 (2005).
 [3] М. И. Карбованец, В. Ю. Лазур, М. И. Чибисов, Журн. эксп. теор. физ. **86**, 84 (1984).
 [4] М. I. Chibisov, R. K. Janev, Phys. Rep. **166**, 1 (1988).
 [5] Т. Р. Grozdanov, R. K. Janev, V. Yu. Lazur, Phys. Scr. **32**, 64 (1985).
 [6] M. Barat, P. Roncin, J. Phys. B. **25**, 2205 (1992).
 [7] Э. С. Парилис, Л. М. Кишиневский, В. И. Матвеев, Б. Г. Краков, *Оже-процессы при атомных столкновениях* (Фан, Ташкент, 1989).
 [8] Е. Е. Никитин, Б. М. Смирнов, *Медленные атомные столкновения* (Энергоатомиздат, Москва, 1990).
 [9] Б. М. Смирнов, Усп. физ. наук. **171**, 234 (2001).
 [10] J. Eichler, W. E. Meurehof, *Relativistic atomic collisions* (Academic Press Ink., New York, 1995).
 [11] М. Я. Агре, Л. П. Рапопорт, Журн. эксп. теор. физ. **77**, 74 (1979).
 [12] P. Beiersdorfer *et al.*, Phys. Scr. **T80A**, 121 (1999).
 [13] K. Tökesi *et al.*, Phys. Scr. **T80B**, 408 (1999).
 [14] А. В. Ланкин, И. В. Морозов, Г. Э. Норман, И. Ю. Скобелев, Журн. эксп. теор. физ. **133**, 701 (2008).
 [15] G. Breit, Phys. Rev. **34**, 553 (1929).
 [16] I. P. Grant, *Relativistic quantum theory of atoms and molecules. Theory and computation* (Springer Science+Business Media, New York, 2007).
 [17] В. Ю. Лазур, С. И. Мигалина, А. К. Рейтий, Теор. мат. физ. **158**, 391 (2009).
 [18] О. Н. Гадомский, В. Р. Нагибаров, Н. К. Соловаров, Журн. эксп. теор. физ. **63**, 813 (1972).
 [19] О. Н. Гадомский, В. Р. Нагибаров, Н. К. Соловаров, Журн. эксп. теор. физ. **70**, 435 (1976).
 [20] О. Н. Гадомский, К. К. Алтунин, Журн. эксп. теор. физ. **144**, 1555 (1998).
 [21] О. Н. Гадомский, Усп. физ. наук. **170**, 1554 (2000).
 [22] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика* (Наука, Москва, 1969).
 [23] G. W. F. Drake, Phys. Rev. A. **5**, 1979 (1972).
 [24] T. Bouchama, J. Desesquelles, M. Druetta, M. Farison, S. Martin, J. Phys. B. **20**, L457 (1987).
 [25] В. В. Афросимов, А. А. Басалаев, М. Н. Панов, А. В. Самойлов, Журн. эксп. теор. физ. **91**, 465 (1986).
 [26] Yu. S. Gordeev, D. Dijkkamp, A. G. Drentje, F. J. Heer, in *Abstracts of Papers of XIII ICPEAC, Berlin, 1983* (North-Holland, Amsterdam, 1983), p. 541; H. Tawara, E. Takács, T. Suta, K. Makónyi, L. P. Ratlifs, J. D. Gillaspay, Phys. Rev. A. **73**, 012704 (2006).
 [27] П. П. Горват, В. Ю. Лазур, С. И. Мигалина, И. М. Шуба, Р. К. Янев, Теор. мат. физ. **100**, 232 (1996).
 [28] Y. Yamamoto *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 011801 (2004).
 [29] V. Malyshev, P. Moreno, Phys. Rev. A. **53**, 416 (1966).
 [30] О. Н. Гадомский, А. Г. Глухов, Журн. эксп. теор. физ. **130**, 31 (2006).
 [31] О. Н. Гадомский, Ю. Ю. Воронов, Журн. эксп. теор. физ. **121**, 1028 (2002).
 [32] О. Н. Гадомский, Ю. Я. Харитонов, Квантовая электроника **34**, 249 (2004).

THE PROBLEM OF TWO ELECTRONS WITHIN THE THIRD ORDER OF THE QUANTUM ELECTRODYNAMICS

V. Yu. Lazur, O. F. Pavlyk, O. K. Reity

Uzhgorod National University, Department of Theoretical Physics, 54 Voloshyna St., Uzhgorod, 88000, Ukraine
e-mail: lazur@univ.uzhgorod.ua

The problem of the interaction of two quasimolecular electrons located at an arbitrary distance from each other near different atoms (nuclei) is solved. The effects of the third order in the quantum electrodynamics which include the exchange of the virtual photon between the electrons and radiation (absorption) of the real photon are considered. The general expression for the matrix elements of the operator of the effective interaction energy of two quasimolecular electrons with the external radiation field is obtained. It allows to calculate the probabilities of inelastic processes with the rearrangement in slow collisions of multicharged ions with relativistic atoms. The successive implementation of the procedure of symmetrization of the retardation factor with respect to both electrons is shown to lead to a rise of the additional terms in the relativistic operator of the interaction of two quasimolecular electrons compared with both the standard Breit operator and the generalized Breit operator from papers [O. N. Gadomsky, V. R. Nagibarov, N. R. Solovarov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **63** 813 (1972); **70** 435 (1976); O. N. Gadomsky, K. K. Altunin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **144** 1555 (1998); O. N. Gadomsky, Usp. Fiz. Nauk **170**, 1554 (2000)].