

РЕЛЯТИВІСТСЬКА СФЕРИЧНА МОДЕЛЬ ЕФЕКТУ ШТАРКА У ВОДНЕВОПОДІБНОМУ ІОНІ

А.А. Горват (мол.), В.Ю. Лазур, О.К. Рейтій

Ужгородський державний університет, 88000 Ужгород, вул. Волошина 32

Розвинуто релятивістську версію ВКБ-методу, що дозволяє знаходити хвильові функції діраківського електрона для сферично-симетричних потенціалів у класично дозволених і заборонених областях. За допомогою отриманої хвильової функції обчислено ймовірність штарківської іонізації водневоподібного іона в постійному однорідному електричному полі. Проведено порівняння одержаних результатів з аналогічними результатами нерелятивістського наближення.

1. Вступ

Задача про атом водню в електричному і магнітному полях має фундаментальне значення для квантової механіки і атомної фізики і часто зустрічається в застосуваннях (див., наприклад, [1-3] і вказані там посилання). Властивості енергетичного спектру атома водню і інших атомів у зовнішніх полях досліджувалось досить детально в рамках рівняння Шредінгера, починаючи з кінця двадцятих років. Стан проблеми і детальну бібліографію по цій тематиці до 1985 р. можна знайти в книзі [4].

Механізм розпаду атома в електричному полі, пов'язаний з підбар'єрним переходом електронів з поля атомного залишку в неперервний спектр, був виявлений ще на першій стадії дослідження цього процесу [5]. У полі, малому в порівнянні з внутрішньоатомним (порядок якого $5 \cdot 10^9$ В/см), час відходу електронів великий порівняно з атомним часом, так що стан електронів можна розглядати як квазістаціонарний. При визначенні квазістаціонарних станів звичайно вимагають, щоб розв'язок рівняння Шредінгера на нескінченності являв собою розбіжну хвилю [1,2]. Умова відсутності збіжної компоненти в асимптотичному виразі для хвильової функції відбирає комплексні власні

значення енергії $E = E_0 - i\Gamma/2$, де E_0 визначає положення, а Γ – ширина рівня, що відповідає квазістаціонарному стану.

Введення комплексних рівнів енергії порушує, однак, один з основних постулатів квантової теорії, згідно якого спектр власних значень довільного ермітового оператора має бути дійсним, а відповідні власні функції – нормованими. Аналітичні продовження стаціонарних розв'язків у комплексну площину енергій мають, таким чином, принципово новий зміст. Вони дають найпростішу і найбільш зручну апроксимацію нестаціонарних розв'язків у основній області зміни змінних, там, де точні хвильові функції $\Psi(\vec{r}, t)$ найбільш близькі до функцій стаціонарних зв'язаних станів:

$$\Psi(\vec{r}, t) \approx \Psi_n(\vec{r}) \exp(-iE_n t), \quad \text{Im } E_n \ll \text{Re } E_n.$$

Уточнення області застосовності вихідних представлень теорії квазістаціонарних станів атома в електричному полі і вдосконалення методів розрахунку довгий час складали основну задачу досліджень цього напрямку. Ця задача залишається актуальною і зараз, особливо в

застосуваннях до конкретних атомних систем.

Найпростіший приклад атома водню у постійному однорідному електричному полі був розглянутий Оппенгеймером [6] ще в 1928 р. Однак в отриманій ним формулі для ймовірності іонізації основного стану атома водню фігурує неправильне значення передекспоненційного множника, що свідчить про нетривіальність цієї задачі. Для поля, що складається з суперпозиції кулонівського і однорідного електричного полів, рівняння Шредінгера відокремлюється в параболічних координатах, що, здавалось би, мало значно полегшити обчислення штарківської енергії E_0 і ймовірності розпаду Γ . Однак отримані при відокремленні змінних рівняння не були зведені до рівнянь для будь-яких відомих спеціальних функцій – не було отримано аналітичного розв'язку. Тому зсуви атомних рівнів і їх ширини отримуються чисельно [4,7-13]. Добре відомі, розвинуті Дамбургом і Колосовим [7], методи чисельного розрахунку положення і ширини рівнів енергії нерелятивістського атома водню, що спираються на лоренцову параметризацію брейт-вігнерівських резонансів.

Не дивлячись на очевидну цінність таких розрахунків (що відносяться до окремих значень напруженостей поля і до конкретних атомів), вони не можуть замінити аналітичну теорію. Навіть наявність точних результатів, отриманих досконалими чисельними методами, не виключає потреби в, можливо більш складних, але наочних аналітичних моделях; скоріше між цими сторонами знання існує своєрідне співвідношення доповнюваності. Створена у 60-ті роки квазікласична теорія розпаду атомних частинок в електричному полі (див., наприклад, [14]) дозволила отримати корисні аналітичні формули для ймовірності іонізації, асимптотично точні в границі “слабких” полів. Причому були розглянуті випадки як нейтральних атомів [2,14-16], так і від’ємних іонів типу H^-, J^-

т.д. [17,18] (перша з цих задач є більш складною в зв'язку з необхідністю враховувати кулонівську взаємодію між електроном, що вилітає і атомним залишком).

Недавно (див. роботи [19,20] і наведені в них посилання) було розвинуто квазікласичну теорію іонізації атомів та іонів під дією постійних і однорідних електричного та магнітного полів з урахуванням кулонівської взаємодії між електроном і атомним залишком в процесі тунелювання. При цьому для обчислення ймовірності іонізації використовувався метод “уявного часу” [16], який дає наглядний опис підбар’єрного руху частинок за допомогою класичних рівнянь руху, але з чисто “уявним” часом. Серед нових квантово-механічних методів дослідження процесів взаємодії атомних частинок з електричними та магнітними полями особливе місце займає $1/n$ – розклад (n – головне квантове число), який досить ефективний для високозбуджених (рідбергівських) станів атомів і молекул, в тому числі при розгляді ефектів у сильних зовнішніх полях (див., наприклад, [21]).

Відмітимо, що у всіх згаданих роботах основна увага приділялась нерелятивістським аспектам теорії іонізації атомів та іонів електричним полем. Разом з тим внутрішня логіка розвитку досліджень атомних систем з високою кратністю іонізації (багатозарядних іонів) диктує, очевидно, постановку цілого ряду якісно нових задач, аналогічних тим, які раніше розв'язувались тільки для нейтральних або слабоіонізованих атомів. Особливістю багатозарядних іонів, що відрізняє їх від нейтральних атомів, є суттєво релятивістський характер руху електронів у породжених такими іонами полях (характерна швидкість електрона у водневоподібному іоні з зарядом ядра Z складає $v \sim \alpha Zc$; α – постійна тонкої структури, c – швидкість світла). Тому послідовна теорія штарківської іонізації таких систем повинна базуватися на

релятивістській основі з урахуванням того, що релятивістські ефекти складають вже не малі поправки, а суттєво визначають порядки спектральних характеристик.

При побудові цієї теорії необхідно мати розв'язок релятивістської задачі про рух електрона у полі ядра та постійного зовнішнього електричного поля. Оскільки змінні у рівнянні Дірака для такого суперпозиційного потенціалу не відокремлюються в жодній ортогональній системі координат, то дана задача не має точного аналітичного розв'язку, а чисельні методи для неї достатньо громіздкі.

У зв'язку з таким станом теорії та інтенсивними експериментальними дослідженнями останніх років особливого значення набувають асимптотичні методи обчислення ймовірності іонізації, які ґрунтуються на фізично наочній картині підбар'єрного переходу електрона. З цієї точки зору доцільно скористатись методом ВКБ (або квазікласичним наближенням), який дає можливість знайти наближені аналітичні розв'язки релятивістської задачі, а також виразити шукану величину ймовірності іонізації через квантову проникність потенціального бар'єра, що розділяє області з дискретним і неперервним спектрами. Як відомо, цей метод дає досить високу точність навіть для невеликих квантових чисел.

Метою даної роботи є розробка послідовної схеми квазікласичного наближення (методу ВКБ) для рівняння Дірака з сферично-симетричним потенціалом (див. п.2). В наступному пункті (п.3) отримано квазікласичні

асимптоти для даного потенціалу в класично дозволених і заборонених областях. Одержані формули використовуються для обчислення (п.4) ширини атомних рівнів у постійному однорідному електричному полі.

2. Метод ВКБ для центральних потенціалів

Застосування методу ВКБ до сильного зовнішнього поля ґрунтувалось раніше [22,23] на квадратуванні рівняння Дірака (метод ефективного потенціалу [24,25]). Однак при $\epsilon < -1$ (ϵ – енергія рівня в одиницях $m_e c^2$) підстановка [24]

$$\chi(r) = (\epsilon - V + 1)^{-\frac{1}{2}} G(r),$$

що використовується в цьому методі, стає сингулярною в точці $r=r_g$, де $V(r_g) = \epsilon + 1$. Внаслідок цього звичайні квазікласичні формули втрачають зміст при $r \sim r_g$ із-за розбіжності ефективного потенціалу $V(r, \epsilon)$. Як наслідок у роботах [26,27] вдалося подолати цю трудність, проводячи розклад за степенями \hbar не у рівнянні другого порядку для $\chi(r)$, а безпосередньо у вихідній системі Дірака для радіальних хвильових функцій G і F . Проте отримані в цих роботах квазікласичні формули не є точними внаслідок низки додаткових наближень. Тому здається доцільним розглянути це питання заново.

Отримаємо формули квазікласичного наближення для розв'язків рівняння Дірака, обмежуючись класом потенціалів з сферичною симетрією. Розв'язок рівняння Дірака для електрона в центральному полі з потенціалом $V = -eA_0(r)$ може бути представлений у вигляді:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G(r) \Omega_{jlm}(\vec{n}) \\ iF(r) \Omega_{j'l'm}(\vec{n}) \end{pmatrix}, \quad l = j \pm 1/2; \quad l' = 2j - l; \quad \vec{n} = \vec{r}/r \quad (1)$$

де $\Omega_{j,l,m}$ і $\Omega_{j,l',m}$ - кульові спінори [28]; j , m - повний кутовий момент і його проєкція ($j=l\pm 1/2$); l - орбітальний момент електрона в ізольованому атомі. Відокремлення змінних в рівнянні Дірака призводить до системи двох звичайних диференціальних рівнянь першого порядку для радіальних функцій $G(r)$ і $F(r)$ [28]:

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dr} &= -\frac{\chi}{r}G + \frac{1}{\hbar c}(C + E^2 - V)F \\ \frac{dF}{dr} &= \frac{1}{\hbar c}(C - E^2 + V)G + \frac{\chi}{r}F \end{aligned} \quad (2)$$

Тут використовується система одиниць, в якій $m_e = e = 1$, $\chi = \pm(j+1/2)$ для станів з $j=l\pm 1/2$. χ поряд з j , m і енергією ϵ є інтегралом руху для діраківської частинки в довільному центральному полі.

Систему (2) можна звести до рівняння другого порядку, виключивши одну з невідомих функцій, але при побудові асимптотичних розв'язків зручніше оперувати безпосередньо з самою системою.

Система рівнянь (2) одновимірна. Для знаходження розв'язків (2) перепишемо систему у матричній формі:

$$\begin{aligned} \psi' &= \frac{1}{\hbar} D\psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix}; \\ D &= \begin{pmatrix} -\frac{\tilde{\chi}}{r} & \frac{c^2 + E - V}{c} \\ \frac{c^2 - E + V}{c} & \frac{\tilde{\chi}}{r} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3)$$

де штрих означає похідну по r , а $\tilde{\chi} = \hbar\chi$

Розв'язок рівняння (3) шукатимемо у вигляді розкладу за степенями \hbar :

$$\begin{aligned} \psi &= \varphi(r) \exp\left(\int y dr\right) \\ y(r) &= \frac{1}{\hbar} y_{-1}(r) + y_0(r) + \hbar y_1(r) + \dots, \\ \varphi(r) &= \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \varphi_n(r) \end{aligned} \quad (4)$$

де φ і φ_n - двокомпонентні величини, верхня компонента яких відповідає радіальній функції G , а нижня - F . Підставляючи розклади (4) у систему (3) і прирівнюючи коефіцієнти при однакових степенях \hbar , отримуємо рекурентну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} (D - y_{-1})\varphi_0 &= 0 \\ (D - y_{-1})\varphi_1 &= \varphi'_0 + y_0\varphi_0 \end{aligned} \quad (5),$$

$$(D - y_{-1})\varphi_{n+1} = \varphi'_n + \sum_{k=0}^n y_{n-k}\varphi_k, \quad n = 1, 2, \dots$$

з якої величини y_n , φ_n визначаються послідовно. Ми обмежимося розглядом перших двох рівнянь, які визначають поправки нижчого порядку.

Із першого рівняння системи (5) випливає, що y_{-1} повинно бути власним значенням, а $\varphi_0 \equiv f_i$ - одним із власних векторів матриці D :

$$y_{-1} = \mu_i = \pm q, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} q(r) &= \frac{1}{c} \sqrt{c^4 - (E - V)^2 + \frac{c^2 \chi^2}{r^2}} \\ f_i &= A_1 \begin{pmatrix} \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \\ \mu_i + \frac{\chi}{r} \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} \mu_i - \frac{\chi}{r} \\ \frac{1}{c}(c^2 - E + V) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

Тут і далі $\hbar=1$; індекс i приймає два значення: $i=\pm$; A_1 і A_2 - нормувальні множники, які будуть визначені пізніше. Оскільки матриця D не є симетричною, то поряд з правими власними векторами f_i потрібно ввести ліві власні вектори \bar{f}_i :

$$(D - \mu_i)f_i = \bar{f}_i(D - \mu_i) = 0, \quad (8)$$

$$\bar{f}_i = B_i \left(\frac{1}{c}(c^2 - E + V), \mu_i + \frac{\chi}{r} \right) = B_i \left(\mu_i - \frac{\chi}{r}, \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \right). \quad (9)$$

Слід зазначити, що \bar{f}_i не збігається з f_i^T , (символ T позначає транспонування); при цьому ліві і праві власні вектори взаємоортогональні:

$$(\overline{f}_i, f_j) \equiv \sum_{\alpha=1}^2 (\overline{f}_i)_\alpha (f_j)_\alpha = \text{const} * \delta_{ij}. \quad (10)$$

Для визначення y_0 покладемо в другому рівнянні системи (5) $\varphi_0 = \overline{f}_i$ і помножимо обидві частини зліва на \overline{f}_i . Тоді згідно з (8) член з φ_1 обернеться в нуль і ми приходимо до рівняння, з якого і визначимо y_0 :

$$y_0(r) = - \frac{(\overline{f}_i, f'_i)}{(\overline{f}_i, f_i)} \quad (11)$$

(тут штрих позначає похідну по r).

Підберемо нормувальні множники $A_{1,2}$ і $B_{1,2}$ у (7) і (9) так, щоб виконувалась рівність

$$(\overline{f}_i, f'_i) = (\overline{f}'_i, f_i). \quad (12)$$

В цьому випадку інтеграл $\int_r^r y_0 dr$ може

бути обчислений у замкнутому вигляді:

$$\int_r^r y_0 dr = \ln \left[(\overline{f}_i, f_i)^{-\frac{1}{2}} \right]. \quad (13)$$

Підставляючи вирази (4), (6) і (13) у (3), одержимо:

$$\psi = [(\overline{f}_i, f_i)]^{\frac{1}{2}} \exp \left(\int_r^r \mu_i dr \right) f_i. \quad (14)$$

Аналогічним чином можна визначити і наступні члени y_1, φ_1, \dots у розкладі (4), що дало б можливість побудувати асимптотичний ряд для ψ . Однак, ми обмежимося знайденими членами y_{-1}, y_0 і φ_0 , які відповідають відомому виразу для класичної хвильової функції в нерелятивістській квантовій механіці:

$$\psi \propto p^{-1/2} \exp \left(\pm i \int p dr \right), \quad (15)$$

оскільки врахування поправок порядку \hbar, \hbar^2 і т.д., як правило, не покращує узгодження методу ВКБ з точним розв'язком. Причина цього, як відомо [2,29], полягає в тому, що формальний ряд за степенями \hbar – не збіжний, а тільки асимптотичний.

Умову (12) завжди можна задовольнити в наступний спосіб. Підставляючи в (12) вирази (7) і (9), приходимо до рівняння

$$\frac{A_1 B_1' - A_1' B_1}{A_1 B_1} = - \frac{V'}{q \left(q \pm \frac{\chi}{r} \right)}, \quad (16)$$

звідки

$$\psi = \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} = \left[2q \left(q \pm \frac{\chi}{r} \right) \right]^{-1/2} \exp \left[\pm \int q dx + \frac{1}{2} \int \frac{V'}{q \left(q \pm \frac{\chi}{x} \right)} dx \right] \begin{pmatrix} \frac{1}{c} (c^2 + E - V) \\ \frac{\chi}{r} \pm q \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Використання другої форми запису власних векторів f_i і \overline{f}_i (з множниками A_2

і B_2 в (7) і (9) приводить після аналогічних обчислень до наступного виразу:

$$\psi = \left[2q \left(q + \frac{\chi}{r} \right) \right]^{-1/2} \exp \left[\pm \int q dx - \frac{1}{2} \int \frac{V'}{q \left(q + \frac{\chi}{x} \right)} dx \right] \begin{pmatrix} \pm q - \frac{\chi}{r} \\ \frac{1}{c} (c^2 - E + V) \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Обговоримо зміст одержаних формул. Насамперед зауважимо, що q збігається (з точністю до i) з радіальним імпульсом релятивістської квазікласичної частинки. Знаки $+$ ($-$) у (17) і (18) відповідають розв'язку, зростаючому (спадному) із зростанням r . Для спадного розв'язку (знак $-$) потрібно використовувати формулу (17) при $\chi < 0$ і формулу (18) при $\chi > 0$; для зростаючого розв'язку – навпаки. Вибір зручної форми запису розв'язку визначається тим, щоб величина $Q_{\pm} = q \pm \chi/r$ була додатна у підбар'єрній області. При іншому виборі розв'язку у виразах для $G(r)$ і $F(r)$ з'являються сингулярності (обертання в нуль множника $q \pm \chi/r$, що наявний у знаменнику). Неважко помітити, що ця сингулярність фіктивна, так як в цій же точці обертається в нуль і чисельник. Однак одержання формул для $G(r)$ і $F(r)$, позбавлених від сингулярностей, вимагало б розкриття цієї невизначеності, що пов'язано з додатковими обчисленнями.

Хвильова функція квазістаціонарного стану має різний вигляд в різних областях:

класично дозволена область $r_0 < r < r_+$ ($q^2 < 0$);
 підбар'єрна область $r_- < r < r_+$ ($q^2 > 0$);
 класично дозволена область з неперервним спектром $r_+ < r$ ($q^2 < 0$).

Тут r_0, r_-, r_+ – є точками повороту ($q=0$). Розглянемо в наступному пункті поведінку розв'язку в цих областях.

3. Хвильова функція діраківського електрона в класично дозволених та забороненій областях

Формули (17), (18) можна зобразити в більш зручній для подальшого розгляду формі:

$$G(r) = \frac{C_1}{2} \left(\frac{E - V + c^2}{2c^2 q} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ - \int_r^r \left(q - \frac{\chi w}{qx} \right) dx \right\}, \quad (24)$$

$$G = \left(\frac{E - V + c^2}{2c q} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \pm \int^r \left(q - \frac{\chi w}{qx} \right) dx \right\}, \quad (19)$$

$$F = \text{sgn } \chi \left(\frac{E - V - c^2}{2c q} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \pm \int^r \left(q - \frac{\chi \bar{w}}{qx} \right) dx \right\}, \quad (20)$$

де

$$w(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{V'}{c^2 + E - V} - \frac{1}{x} \right),$$

$$\bar{w}(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{V'}{c^2 - E + V} + \frac{1}{x} \right).$$

Знак $+$ ($-$) відповідає зростаючому (спадному) із зростанням r розв'язку.

Область $r_0 < r < r_+$ ($q^2 < 0$) – класично дозволена; в ній хвильові функції (19), (20) осцилюють:

$$G = C_1 \left(\frac{E - V + c^2}{2c^2 p} \right)^{1/2} \sin \Theta_1, \quad (21)$$

$$F = C_1 \text{sgn } \chi \left(\frac{E - V - c^2}{2c^2 p} \right)^{1/2} \sin \Theta_2$$

Тут

$$p(r) = \frac{1}{c} \sqrt{(E - V)^2 - c^4 - \frac{c^2 \chi^2}{r^2}} \quad (22)$$

- квазікласичний імпульс для радіального руху частинки, C_1 – стала нормування,

$$\Theta_1 = \int_{r_0}^r \left(p + \frac{\chi w}{px} \right) dx + \frac{\pi}{4} \quad (23)$$

$$\Theta_2 = \int_{r_0}^r \left(p + \frac{\chi \bar{w}}{px} \right) dx + \frac{\pi}{4}$$

Підбар'єрна область $r_- < r < r_+$ ($q^2 > 0$) – класично заборонена. Тут $p = iq$, а величини q, y_{-1} і y_0 – дійсні. Як відомо [2], хвильова функція повинна спадати вглиб цієї області. Отже, розв'язками системи рівнянь Дірака (2) в підбар'єрній області є:

$$F(r) = \frac{C_l}{2} \operatorname{sgn} \chi \left(\frac{E - V - c^2}{2c^2 q} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ - \int_{r_-}^r \left(q - \frac{\chi \bar{w}}{qx} \right) dx \right\}. \quad (25)$$

Найбільш цікавим є результат для області неперервного спектру ($r > r_+$). Тут хвильова функція виражається як розбіжна хвиля:

$$G = A \left[\frac{1 + \varepsilon - \frac{V}{c^2}}{2p} \right]^{1/2} \exp \left(\frac{i}{h} \left[\int_{r_-}^r p(x) dx \right] + i \frac{\pi}{4} \right) \quad (26)$$

$$F = A \left[\frac{\varepsilon - 1 - \frac{V}{c^2}}{2p} \right]^{1/2} \exp \left(\frac{i}{h} \left[\int_{r_-}^r p(x) dx \right] + i \frac{\pi}{4} \right)$$

Одержані формули визначають квазікласичну асимптоту розв'язків рівняння Дірака (1) при $\hbar \rightarrow 0$ і справедливі при всіх значеннях r , за винятком околів точок повороту. Для обходу цих точок і зшивання розв'язків (21) і (24), (25), (26) застосовується стандартний метод [2]. Так, поблизу точки повороту r_+ система рівнянь Дірака (2) зводиться до рівняння Шредінгера з лінійно залежним від r - r_+ ефективним потенціалом, розв'язок якого виражається через функцію Ейрі. Можна використати також метод Цваана [2,30]. В результаті одержуємо рецепт зшивання квазікласичних розв'язків, який можна сформулювати таким чином: справедливі стандартні (звичайні) формули зв'язку розв'язків зліва і справа від точок повороту, якщо у розв'язках (21), (24) і (25), (26) слідкувати за поведінкою в околі точок повороту тільки головних множників типу (15), сингулярних при $r \rightarrow r_{\pm}$. Саме таким чином і було встановлено зв'язок між сталими нормування у формулах (21), (24) і (25), (26). Таким чином A зв'язане з C_l через бар'єрний фактор наступним чином:

$$A = -iC_l \exp \left(- \int_{r_-}^{r_+} q dr \right). \quad (27)$$

Квазікласичні формули (24) і (25), (26) відрізняються від аналогічних формул нерелятивістської квазікласики [2] релятивістським виразом для квазіімпульсу p , включенням поправки, що враховує спін-орбітальну взаємодію, а також наявністю додаткового передекспоненційного множника.

Переходячи до прикладів, у наступному розділі проілюструємо застосування отриманих формул до конкретних задач з сферичною симетрією, для яких всі обчислення проводяться аналітично.

4. Сферична модель ефекту Штарка в атомі водню

При визначенні квазістаціонарних станів зазвичай вимагають, щоб розв'язок рівняння Дірака на нескінченності являв собою розбіжну хвилю; це відповідає частинці, яка в решті решт вилітає із системи при її розпаді [1,2]. Умова відсутності збіжної компоненти в асимптотичному виразі для хвильової функції відбирає комплексні власні значення для енергії:

$$\varepsilon_{nlm} = \varepsilon_r - i \frac{\gamma}{2}, \quad (28)$$

де ε_r визначає положення рівня, що відповідає квазістаціонарному стану, а γ характеризує його ширину. Величина γ – додатна, вона й характеризує ймовірність розпаду (іонізації) квазістаціонарного стану атома в одиницю часу: $W = \gamma/\hbar$.

В якості застосування отриманих вище формул напишемо рівняння, що визначатиме положення і ширину квазістаціонарних рівнів для сферичного потенціалу. Нехтуючи проникністю бар'єру в області $r_- < r < r_+$ отримаємо з (21) і (23) квазікласичну умову квантування:

$$\int_{r_0}^{r_1} \left(p + \frac{\chi w}{pr} \right) dr = (n + \gamma') \pi. \quad (29)$$

Тут $n=0, 1, 2, \dots$ - радіальне квантове число; константа γ' рівна $\frac{3}{4}$ для основного стану (s -рівнів) і $\frac{1}{2}$ для всіх інших; r_0 - ліва точка повороту у випадку сферично-симетричного потенціалу.

Рівняння (29) визначає дійсну частину ε_r енергії рівня: $Re \varepsilon_{njlm} = \varepsilon_r$. Воно відрізняється від звичайного правила квантування Бора-Зомерфельда [2] релятивістським виразом (22) для імпульсу $p(r)$ і включенням поправки w , що виникає внаслідок спин-орбітальної взаємодії.

Перейдемо до обчислення ширини рівня $\gamma = 2 Im \varepsilon_{njlm}$, що визначає ймовірність розпаду квазістаціонарного стану в одиницю часу ($W = \gamma/\hbar$). (Ми відновили тут у явному вигляді постійну Планка \hbar і масу m).

Для цього помножимо перше рівняння системи (2) радіальних рівнянь Дірака на F^* , а друге - на G після попередньої комплексифікації (* означає комплексне спряження). Додавши дві отримані рівності і проінтегрувавши результат від 0

до $+\infty$ по r , врахувавши граничні умови $F(0)=0, G(0)=0$, а також квазістаціонарний

характер спектру $E = E_0 - \frac{\gamma}{2} i$, де E_0 - визначає положення рівня, а γ - його ширину, розділяючи дійсну і чисто уявну частини, маємо:

$$-i \left(Im [F^* G]_{r \rightarrow \infty} - \frac{\gamma}{2} \int_0^{\infty} (|F|^2 + |G|^2) dr \right) = 0 \quad (30)$$

Скориставшись умовою нормування на одну частинку: $\int_0^{\infty} (G^2 + F^2) dr = 1$, маємо:

$$\gamma = 2 Im [F^* G]_{r \rightarrow \infty} \quad (31)$$

Врахуємо, що при $r \rightarrow \infty$ F і G задаються формулою (26), тоді:

$$F^* G = i \frac{A^2 [(E - V)^2 - m^2]^{1/2}}{2p}. \quad (32)$$

Скориставшись зв'язком між сталими нормування (27) і виразом для p (22), ймовірність тунелювання запишеться як:

$$\gamma = C_2^2 \exp \left(2\chi \int_{r_1}^{r_2} \frac{w}{qr} dr \right) \exp \left(-2 \int_{r_1}^{r_2} q dr \right) = \frac{1}{T} \exp \left(2\chi \int_{r_1}^{r_2} \frac{w}{qr} dr \right) \exp \left(-2 \int_{r_1}^{r_2} q dr \right). \quad (33)$$

Тут T - період коливань релятивістської частинки у ямі, C_2 - нормувальна константа в (24) і (25), при цьому $C_2^2 = T^{-1}$.

У нерелятивістському випадку зміст T^{-1} зрозумілий - це число ударів у одиницю часу частинки (локалізованої в ямі) об стінку потенціального бар'єру при $r=r_1$, а експонента відповідає ймовірності просочитися крізь бар'єр при кожному ударі. Врахування релятивізму і спіну $s=1/2$ змінює вираз для періоду коливань і дає у (33) додатковий множник, що залежить, зокрема, і від знаку χ .

Розглянемо потенціал:

$$V(r) = -\frac{Z}{r} - Fr, \quad (34)$$

де Z - заряд атомного залишку, F - напруженість електричного поля.

При $F > 0$ цей потенціал є сферичною моделлю ефекту Штарка. А при заміні $F \rightarrow -F$ потенціал (34) переходить у запираючий потенціал, що має тільки дискретний спектр і служить моделлю кваркового конфайнменту.

Відмітимо також, що рівняння Дірака з потенціалом (34) при $F < 0$ може служити еталонним рівнянням для релятивістської

теорії квазістаціонарних станів квантових об'єктів. Такі стани вводяться, як відомо, по аналогії із звичайними стаціонарними станами дискретної частини спектра власних значень гамільтоніана. На комплексній площині енергій E їм відповідають полюси релятивістської стаціонарної функції Гріна (див. [7]),

$$G(E) = \left(E - \hat{H} + iq \right)^{-1} \quad (\text{тут } \hat{H} - \text{ повний гамільтоніан системи [7]}).$$

Застосуємо отриману формулу (33) для визначення ширини квазістаціонарних рівнів у випадку потенціалу (34). Для малої напруженості поля F існує область відстаней від водневоподібного іона, що набагато більше його розміру ($r \gg 2Z/\lambda$) і набагато менше значення F^{-1} . Тобто в цій області можна знехтувати проникністю потенціального бар'єра $r_- < r_1 < r_+$, і нормувати хвильову функцію на електрон, локалізований у широкій потенціальній ямі $r_0 < r < r_-$ багатозарядного іона (в області I):

$$\int_{r_0}^{r_-} (G^2 + F^2) dr = 1 \quad (35)$$

При цьому нехтується проникненням електрона через класично заборонену область, де G і F спадають експоненційно, а $\sin^2 \theta_i$ ($i=1,2$) замінюється на $1/2$. Таке наближення зазвичай використовується в квазікласиці [2]; його обґрунтування дане Фаррі [31]. В цьому наближенні константа нормування C_1 рівна:

$$C_1 = 2C_2 = \left\{ \int_{r_0}^{r_-} \frac{E - V}{2c^2 p} dr \right\}^{-1/2}. \quad (36)$$

Для знаходження аналітичного вигляду сталої C_1 необхідно розв'язати рівняння $p=0$, враховуючи, що полем в околі ядра можна знехтувати, відповідні точки повороту запишуться так:

$$r_+ \approx \frac{1}{\lambda^2} \left(\varepsilon Z + \sqrt{\varepsilon^2 Z^2 + \lambda^2 \alpha^2 Z^2} \right) = \frac{(1+\varepsilon)Z}{\lambda^2},$$

$$r_0 \approx \frac{1}{\lambda^2} \left(\varepsilon Z - \sqrt{\varepsilon^2 Z^2 + \lambda^2 \alpha^2 Z^2} \right) = -\frac{(1-\varepsilon)Z}{\lambda^2} \quad (37)$$

де

$$\varepsilon = \frac{E}{c^2}, \quad \lambda = c\sqrt{1-\varepsilon^2}, \quad \alpha = \frac{1}{c}.$$

Враховуючи (37) і обчислюючи інтеграл у (36) приходимо до наступної формули для сталої нормування:

$$C_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} Z N^{-3/2}, \quad N = Z/\lambda \quad (38)$$

Вираз (38) є релятивістським аналогом відповідної нерелятивістської формули для нормувальної константи:

$$A = 2^{1/2} Z \pi^{-1/2} n^{-3/2}, \quad (39)$$

де n – головне квантове число в задачі про атом водню для рівняння Шредінгера.

Існують і інші методи знаходження сталої C_1 , наприклад, шляхом зшивання отриманого нами розв'язку з асимптотою розв'язків системи Дірака для нормованих радіальних функцій G і F в кулонівському полі при $r \rightarrow \infty$:

$$\Psi_{ac} = \begin{pmatrix} G_{ac}(r) \\ F_{ac}(r) \end{pmatrix} = \frac{A}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\varepsilon} [I + C_+ r^{-l} + \dots] \\ -\sqrt{1-\varepsilon} [I + C_- r^{-l} + \dots] \end{pmatrix} r^{\varepsilon Z/\lambda} e^{-\lambda r}, \quad (40)$$

де

$$A = \lambda(2\lambda)^{\varepsilon Z/\lambda} \left[\frac{\left(\frac{Z}{\lambda} - \chi\right)}{Z\Gamma\left(\frac{\varepsilon Z}{\lambda} - \gamma + 1\right)\Gamma\left(\frac{\varepsilon Z}{\lambda} + \gamma + 1\right)} \right]^{1/2}, \quad (41)$$

$$C_{\pm} = \frac{1}{2\lambda} \left(\chi + \frac{Z}{\lambda}\right) \left(\chi - \frac{Z}{\lambda} \pm l\right), \quad \gamma = (\chi^2 - \alpha^2 Z^2)^{1/2}, \quad (42)$$

а $\Gamma(\chi)$ – гамма-функція Ейлера.

Порівнявши цей асимптотичний вираз із квазікласичними формулами (24), (25) в області зшивки $\frac{2Z}{\lambda^2} \ll r \ll F^{-1}$, знайдемо зв'язок між постійними $C_2 = C_1/2$ і A :

$$C_2 = A \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{2e\lambda^2}\right)^{\varepsilon Z/\lambda} \exp(-\alpha Z \arccos \varepsilon). \quad (43)$$

Результати цих методів відрізняються в межах похибки між формулою Стірлінга і $n!$

Як видно з (31), (33), (43) ширина атомного рівня пропорційна $|A|^2$. Це й не дивно, оскільки при $F \ll 1$ іонізація йде з “хвоста” атомної хвильової функції ψ , а бар'єр є широким.

Обчислимо головний (експоненційний) фактор у (33). Запишемо інтеграл, що визначає квантову проникність потенціального бар'єру у вигляді:

$$J = \int_{r_-}^{r_+} q(r) dr = \alpha F \int_{r_-}^{r_+} \sqrt{\frac{(r-r_-)(r_+-r)(r-r'_-)(r-r'_+)}{r^2}} dr. \quad (44)$$

Точки повороту r_{\pm} і r'_{\pm} дорівнюють:

$$r_{\pm} = \frac{\lambda^2}{2(1 \pm \varepsilon)F} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4ZF(1 \pm \varepsilon)^2}{\lambda^4}} \right], \quad r'_{\pm} = \frac{\lambda^2}{2(1 - \varepsilon)F} \left[-1 \pm \sqrt{1 - \frac{4ZF(1 - \varepsilon)^2}{\lambda^4}} \right]. \quad (45)$$

Встановимо правильну асимптотичну границю точок повороту при $F \ll 1$. За

допомогою простого розкладу (45) отримаємо:

$$\begin{aligned} r_- &= \frac{Z}{\lambda^2} (1 + \varepsilon) + O(F); & r'_- &= -\frac{Z(1 - \varepsilon)}{\lambda^2} + O(F); \\ r_+ &= \frac{\lambda^2}{(1 + \varepsilon)F} - \frac{Z}{\lambda^2} (1 + \varepsilon) + O(F); & r'_+ &= -\frac{\lambda^2}{(1 - \varepsilon)F} + \frac{Z}{\lambda^2} (1 - \varepsilon) + O(F) \end{aligned} \quad (46)$$

Положення ближніх (“атомних”) точок повороту r_- і r'_- від поля F практично не залежить і визначається тільки кулонівським полем ядра. Дальні від атома точки повороту r_+ і r'_+ залежать в основному від поля $\left(\pm \frac{\lambda^2}{(l \pm \varepsilon)F}\right)$, але їх значення “підправляється” на величину $\left(\frac{-Z(l \pm \varepsilon)}{\lambda^2}\right) \propto l$, обумовлену кулонівською далекодією. При виконанні умови $F \ll l$ (границя слабого поля) виконуються також умови $\{r_+, |r'_+\} \gg \{r_-, |r'_-\}$. Це дозволяє розкласти бар’єрний інтеграл J за додатними степенями напруженості поля. Практично розклад здійснюється наступним чином.

Розбиваємо область інтегрування $r_- < r < r_+$ на дві області, вводячи точку r'_0 , що задовольняє умову: $r_- \ll r'_0 \ll r_+$. У першій з цих областей ($r < r'_0$) переважає кулонівська взаємодія, а взаємодію електрона з електричним полем можна розглядати як збурення, в другій області – навпаки, домінуючим є потенціал електричного поля, а кулонівське поле ядра можна розглядати як збурення. Розкладаючи радіальний квазіімпульс електрона $p(r)$ в кожній області по малому параметру – збуренню, отримуємо для J асимптотичне представлення:

$$J = \alpha F (j_1 + j_2) \tag{47}$$

де

$$j_1 = \int_{r_-}^{r'_0} \frac{\sqrt{(r-r_-)(r_+-r)(r-r'_-)(r-r'_+)}}{r} dr \approx \sqrt{-r_+r'_+} \left[\int_{r_-}^{r'_0} \frac{\sqrt{(r-r_-)(r-r'_-)}}{r} dr - \frac{r_++r'_+}{2r_+r'_+} \int_{r_-}^{r'_0} \sqrt{(r-r_-)(r-r'_-)} dr + \dots \right] \tag{48}$$

$$j_2 = \int_{r'_0}^{r_+} \frac{\sqrt{(r-r_-)(r_+-r)(r-r'_-)(r-r'_+)}}{r} dr \approx \int_{r'_0}^{r_+} \sqrt{(r_+-r)(r-r'_+)} dr - \frac{r_-+r'_-}{2} \int_{r'_0}^{r_+} \frac{\sqrt{(r_+-r)(r-r'_+)}}{r} dr + \dots \tag{49}$$

Обчислюючи ряд табличних інтегралів у $j_{1,2}$ отримуємо:

$$J = \frac{\Phi(\varepsilon)}{2\alpha^3 F} - \frac{\varepsilon Z}{\lambda} - 2\alpha Z \arccos \varepsilon - \eta \ln \left(\frac{4\lambda^4}{ZF} \right) + O(F) \tag{50}$$

де

$$\Phi(\varepsilon) = \arccos \varepsilon - \varepsilon \sqrt{\varepsilon - 1} \tag{51}$$

$$\eta = \frac{Z\alpha\varepsilon}{\sqrt{1-\varepsilon^2}}$$

Підставляючи вираз (50) у (33) і нехтуючи поправкою на спин-орбітальну взаємодію, отримуємо вираз для ймовірності іонізації водневоподібного іона електричним полем:

$$W = |A_{ac}|^2 \frac{\lambda}{2} \left(\frac{2\lambda^2}{F} \right)^{2\eta} \exp \left(-\frac{\Phi(\varepsilon)}{\alpha^3 F} + 2\alpha Z \arccos \varepsilon \right) \tag{52}$$

5. Заключні зауваження

Розглянемо деякі граничні випадки отриманого виразу:

А) Почнемо з іонізації s-рівня, зв'язаного короткодійними силами ($Z=0$). В цьому випадку формула (52) зображатиметься у вигляді:

$$W = |A_{ac}|^2 \frac{\lambda}{2} \exp\left(-\frac{\Phi(\varepsilon)}{\alpha^3 F}\right), \quad (53)$$

що з точністю до передекспоненційного множника збігається з результатами робіт [19,20], для штарківської іонізації s-рівня від'ємних іонів (типу H^-, Na^- і т.д.).

Б) При наявності кулонівського поля доцільно розглянути різні граничні випадки для величин, що фігурують у формулі (52):

$$\arccos \varepsilon = \begin{cases} (1-\varepsilon^2)^{1/2} + \frac{(1-\varepsilon^2)^{3/2}}{6} + \dots, & \varepsilon \rightarrow 1, \\ \frac{\pi}{2} - \varepsilon - \frac{\varepsilon^3}{6} + \dots, & \varepsilon \rightarrow 0, \\ \pi - (1-\varepsilon^2)^{1/2} - \frac{(1-\varepsilon^2)^{3/2}}{6} + \dots, & \varepsilon \rightarrow -1. \end{cases} \quad (54)$$

$$\Phi(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{2^{5/2}}{3} (1-\varepsilon)^{3/2} \left[1 - \frac{3}{20} (1-\varepsilon) + \dots \right], & \varepsilon \rightarrow 1, \\ \frac{\pi}{2} - 2\varepsilon + \frac{1}{3} \varepsilon^3 + \dots, & \varepsilon \rightarrow 0, \\ \pi - \frac{2^{5/2}}{3} (1+\varepsilon)^{3/2} + \dots, & \varepsilon \rightarrow -1. \end{cases} \quad (55)$$

У нерелятивістській границі ($\varepsilon \rightarrow 1$, $\alpha \rightarrow 0$) формула (52) переходить у відомий результат роботи [7]:

$$W = a_{\text{нер}}^2 \frac{\gamma}{2} \left(\frac{2\gamma^2}{F} \right)^{2Z \cdot \gamma} \exp\left(-\frac{2\gamma^3}{3F}\right). \quad (56)$$

При $\varepsilon \rightarrow -1$, тобто для рівня, що опустився до межі нижнього континуума, експоненційний множник стає рівним

$\exp\left(-\frac{\pi}{\alpha^3 F}\right)$, що співпадає з відповідним

множником у формулі Швінгера [32] для ймовірності народження електрон-позитронних пар з вакууму в постійному електричному полі.

Робота виконана при фінансовій підтримці міжнародної організації INTAS (INTAS Ref. No: 99-1326).

1. Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Москва: Физматгиздат, 1960. – 586 с.

2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Квантовая механика (нерелятивистская теория). Москва: Наука, 1974. 760 с.
3. Б.М. Смирнов. Физика атома и иона. Москва: Энергоатомиздат, 1986.

4. Ридберговские состояния атомов и молекул: Пер. с англ./ Под ред. Р. Стебингса и Ф. Даннинга. Москва: Мир, 1985. – 496 с.
5. C. Lanczos. // *Zs. Phys.*, 1930., bd. 62, s. 518; 1931, bd. 68, s. 204.
6. J.R. Oppenheimer. // *Phys. Rev.*, 1928, V_o 31, p.66.
7. Р.Я. Дамбург, В.В. Колосов. Теоретическое исследование поведения водородных ридберговских атомов в электрических полях. Рига: Саласпилс, 1980.
8. H.J. Silverstrone. // *Phys. Rev. A*, 1978, V_o 18, p.1853; *Phys. Rev. Lett.*, 1979, V_o 43, p. 1498.
9. V. Franceschini, V. Grecchi, H.J. Silverstrone. // *Phys. Rev. A*, 1985, V_o 32, p. 1338.
10. В.М. Вайнберг В.Д. Мур, В.С. Попов и др., // *Письма в ЖЭТФ*, 1986, том 44, стр. 9; 1987, том 46, стр. 178; *ЖЭТФ*, 1987, том 93, стр. 450.
11. V.S. Popov, V.D. Mur, A.V. Sergeev et al. // *Phys. Lett. A*, 1987, V_o 124, p. 77; 1990, V_o 149, p. 418 and 425.
12. V.S. Popov. // *Phys. Lett. A*, 1993, V_o 173, p. 63.
13. F.M. Fernandez. // *Phys. Rev. A*, 1996, V_o 54, p. 1206.
14. Б.М. Смирнов. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. Москва: Атомиздат, 1968, с. 244.
15. Б.М.Смирнов, М.И. Чибисов. Разрушение атомных частиц полем и электронным ударом // *ЖЭТФ*, 1965, том 49, вып. 3, с. 841-851.
16. А.М. Переломов, В.С. Попов, М.В. Терентьев. Ионизация атомов в переменном электрическом поле. // *ЖЭТФ*, 1966, том 50, с. 1393-1409; 1966, том 51, с. 309-325.
17. Н.Н. Демков, Г.Ф. Друкарев. Распад и поляризуемость отрицательного иона в электрическом поле. // *ЖЭТФ*, 1964, том 47, вып. 3, с. 918-924.
18. Н.Н. Демков, В.Н. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Ленинград: Изд-во Ленинградского университета, 1975, с. 240.
19. В.С. Попов, Б.М. Карнаков, В.Д. Мур. Ионизация атомов в электрическом и магнитных полях и метод мнимого времени. // *ЖЭТФ*, 1998, том 113, вып. 5, стр. 1579-1605.
20. В.С. Попов, А.В. Сергеев. Ионизация атомов в слабых полях и асимптотика высших порядков теории возмущений. // *ЖЭТФ*, 1998, том 113, вып. 6, с. 2047-2055.
21. В.С. Попов, А.В. Сергеев, А.В. Щерблюкин. О структуре высших порядков $1/n$ -разложения. // *ЖЭТФ*, 1992, том 102, вып. 5, с. 1453-1463.
22. М.С. Маринов, В.С. Попов. // *ЖЭТФ*, 1974, том 67, с.1250.
23. В.П. Крайнов. // *Письма в ЖЭТФ*, 1971, том 13, с.359.
24. В.С. Попов. // *Письма в ЖЭТФ*, 1970, том 11, с.254.
25. Я.Б. Зельдович, В.С. Попов. // *УФН*, 1971, том 105, с.403.
26. В.С. Попов, Д.Н. Воскресенский, В.Л. Елецкий, В.Д. Мур. Метод ВКБ при $Z > 137$ и его приложения к теории сверхкритических атомов. // *ЖЭТФ*, 1979, том 76, вып. 2, с. 431-459.
27. В.Д. Мур, В.С. Попов. Квазиклассическое приближение для уравнения Дирака в сильных полях. // *Ядерная физика*, 1978, том 28, вып. 3(9), с. 837-849
28. А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика. – М.: Наука, 1981, 432 с.
29. А.Б. Мигдал. Качественные методы в квантовой теории. – М.: Наука, 1975.
30. J. Heading. *An Introduction to Phase-Integral Methods*. – London, Methuen, 1962/
31. W.H. Furry. *Phys. Rev.*, 1947, v.71, p.360.
32. J. Schwinger, *Phys. Rev.*, 1951, v.82, p.664.

RELATIVISTIC SPHERICAL MODEL OF STARK EFFECT IN H-LIKE ION

A.A. Horvat (y.), V.Yu. Lazur, A.K. Reity

Uzhgorod State University, 88000 Uzhgorod, Voloshina Str. 32

The relativistic version of WKB-method, allowing us to find the wave functions of a Dirac electron for spherically symmetric potentials in the classically allowed regions and in the forbidden region is developed. Using obtained wave functions, we compute the probability of Stark ionization of H-like ion in constant homogeneous electric field. Comparing of obtained results with the analogous data of non-relativistic approximation is carried out.



Андріана Андріївна Горват – аспірант кафедри теоретичної фізики
Народилась у 1978 р. Закінчила фізичний факультет УжДУ в 2000 р.



Олександр Константинович Рейтій – аспірант кафедри теоретичної фізики
Народився у 1976 р. Закінчив фізичний факультет УжДУ в 1996 .



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.