УДК 539.186

В.Ю. Лазур, І.Ю. Король, П.П. Горват,
С.І. Мигалина, О.К. Рейтій

Квазікласичний підхід до проблеми розщеплення термів у релятивістській задачі двох центрів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України $\boxed{\textit{В.І. Фущичем}}$*)*

An asymptotic expression for the value of the exchange splitting of terms fission in the case of interaction of an atom with a multicharged ion within the framework of the relativistic quasiclassical approach at large internuclear distances is obtained. Validity criteria for the results obtained are presented. Comparison with the corresponding nonrelativistic approach is done.

Сучасні досягнення техніки прискорення важких іонів зробили можливим постановку нового класу фізичних експерементів в області фізики атомних зіткнень і, зокрема, дослідження процесів одноелектронної перезарядки багатозарядних іонів [1]

$$A^{(Z_1-1)} + B^{Z_2+} \to A^{Z_1+} + B^{(Z_2-1)}, \qquad Z_1, Z_2 \gg 1. \tag{1}$$

При теоретичному описі таких процесів у повільних зіткненнях атомних частинок основною проблемою є обчислення величин обмінного розщеплення $\Delta E = E_I - E_{II}$ квазімолекулярних термів E_I і E_{II} системи $(AB)^{(Z_1+Z_2-1)+}$, що відповідають вхідному та вихідному каналам реакції (1). Хоча ці питання досить традиційні для загальної теорії повільних атомних зіткнень (див., наприклад, [2]), проте докладно розвинуті в нерелятивістському наближенні асимптотичні (за великими міжядерними віддалями) методи [2–4] обчислення розщеплення термів ΔE незастосовні в розглянутому нами випадку великих значень зарядів Z_1, Z_2 з огляду на суттєво релятивістський характер руху електрона у багатозарядних квазімолекулярних системах $(AB)^{(Z_1+Z_2-1)+}$. Тому послідовна теорія таких систем повинна будуватися на релятивістській основі з урахуванням того, що релятивістські ефекти складають вже не малі поправки, а істотно визначають порядки шуканої величини ΔE.

При побудові такої теорії необхідно мати розв'зок задачі двох центрів для рівняння Дірака. Оскільки змінні у цьому рівнянні не відокремлюються в жодній ортогональній системі координат, то дана задача не має точного аналітичного розв'язку, а чисельні розрахунки надто громіздкі і проведені [5] лише для малих зарядів: $Z_1 = 1$, $Z_2 = 2$.

У зв'зку із складністю проблеми особливого значення набувають наближені методи обчислення розщеплення термів, що грунтуються на фізично наочній картині підбар'ерного переходу електрона. З цієї точки зору доцільно скористатися методом ВКБ (або квазікласичним наближенням), який дає можливість знайти наближені аналітичні розв'язки релятивістської задачі двох центрів, а також виразити шукану величину обмінного розщеплення термів при квазіперетинах через квантову проникність потенціального бар'єра, що розділяє атомні частинки, вздовж міжядерної осі.

Квазікласична асимптотика одноелектронної хвильової функції. Для обчислення асимптотики розщеплення термів при квазіперетинах необхідно визначити хвильову функцію електрона в області між ядрами, де найбільш важлива специфіка силового поля двоцентрової задачі Z_1eZ_2. В цій області взаємодію електрона з кожним атомним залишком можна вважати кулонівською і тому двоцентрове рівняння Дірака для розглядуваної задачі можна записати у вигляді ($m_e = e = \hbar = 1$):

$$\hat{H}\Psi_j(\vec{r};R) = E_j(R)\Psi_j(\vec{r};R), \qquad j = I, II, \tag{2а}$$

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + c^2\beta - Z_1/r_1 - Z_2/r_2. \tag{2б}$$

Тут r_i — віддаль від електрона до відповідного ядра ($i = 1,2$); $Z_{1,2}$ — ефективні заряди атомних залишків A^{Z_1+} і B^{Z_2+}, у полі яких рухається електрон; $E_j(R)$ — власні значення (терми) релятивістської задачі двох центрів, які включають і енергію спокою m_ec^2 і залежать від міжядерної віддалі R як від параметра; $\hat{\vec{p}} = -i\vec{\nabla}_r$ — оператор імпульсу; c — швидкість світла. У стандартному зображенні [6] матриці $\vec{\alpha}$ і β мають вигляд

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \tag{3}$$

де $\vec{\sigma}$ — матриці Паулі, а 0 та I — нульова та одинична матриці 2×2.

Наявність двох притягуючих потенціалів у діраківському гамільтоніані $\hat{H}$ (2б) призводить до того, що в границі $R \to \infty$ розв'язки $\Psi_j(\vec{r};R)$ двоцентрової задачі (2) локалізуються поблизу одного з двох зарядів і переходять у хвильові функції роз'єднаних атомів $A^{(Z_1-1)+}$ або $B^{(Z_2-1)+}$. Відповідно до цього всі терми системи $(AB)^{(Z_1+Z_2-1)+}$ розбиваються на два класи: $E_I(R)$- і $E_{II}(R)$-терми, які при $R \to \infty$ відповідають рівням енергії ізольованих атомів $A^{(Z_1-1)+}$ і $B^{(Z_2-1)+}$, тобто вхідному та вихідному каналам реакції (1). На цій підставі енергетичні терми $E_j(R)$ дискретного спектра задачі двох центрів зручно класифікувати двома наборами квантових чисел $j = I, II$, що характеризують стан незбурених атомів $A^{(Z_1-1)+}$ і $B^{(Z_2-1)+}$ відповідно.

При великих $r_1 \approx R$ будемо шукати асимптотичну форму розв'язку Ψ_I рівняння (2) у вигляді (Ψ_{II} знаходяться аналогічно):

$$\Psi_I = \frac{q_1(\vec{r}_1)}{r_1} Z_{j_1l_1m_1}(\vec{n}_1), \qquad \vec{n}_1 = \frac{\vec{r}_1}{r_1}, \tag{4}$$

де j_1 і l_1 — повний та орбітальний момети електрона у вільному атомі $A^{(Z_1-1)+}$; m_1 — проекція повного моменту на міжядерну вісь $\vec{R}$; $q_1(\vec{r}_1)$ — нова невідома функція. Основна кутова залежність функції Ψ_I визначається біспінором $Z_{j_1l_1m_1}$, утвореним із кульових спінорів $\Omega_{j_1l_1m_1}$ [6]:

$$Z_{jlm}(\vec{n}) = \begin{bmatrix} \Omega_{jlm}(\vec{n}) \\ -i\sqrt{\dfrac{1-\varepsilon_1}{1+\varepsilon_1}}\,\Omega_{jl'm}(\vec{n}) \end{bmatrix}, \qquad l = j \pm 1/2,\ l' = 2j - l = j \mp 1/2. \tag{5}$$

Тут $\varepsilon_1 = E_1/c^2$, а через E_1 позначено повну енергію (яка містить і енергію спокою m_ec^2) незбуреного ізольованого стану атома $A^{(Z_1-1)+}$: $E_I(\infty) = E_1$. Залежність функції $q_1(\vec{r}_1) = q_1(r_1, |\vec{r}_1 - \vec{R}|)$ від напрямку $\vec{n}_1$ більш слабка і зумовлена наявністю на великій віддалі R збурюючого центра B^{Z_2+}.

Ми вважаємо, що віддалі між ядрами досить великі, так що поблизу центра A^{Z_1+} розв'язок Ψ_I рівняння (2) повинен переходити у незбурену хвильову функцію атома $A^{(Z_1-1)+}$ (точніше, в її асимптотику). Це дає асимптотичну граничну умову для шуканої функції q_1 [7, 8]:

$$q_1 \underset{2\lambda_1^1 \ll r_1 \ll R}{\longrightarrow} q_1^{(0)} \equiv A_1 r_1^{\varepsilon_1 Z_1/\lambda_1} e^{-\lambda_1 r_1},$$
$$\lambda_1 = \alpha^{-1}\sqrt{1-(E_1/c^2)^2}, \qquad \alpha = 1/c = 1/137, \tag{6}$$

де амплітуда A_1 визначається [7, 8] шляхом зшивання асимптотики (4), (6) з чисельними хвильовими функціями Дірака – Фока – Слейтера [9, 10]. Для виконання умови (6) необхідно, щоб міжядерні віддалі R були набагато більші за віддаль R_0, при якій зникає потенціальний бар'єр по осі $\vec{R}$ між ядрами, тобто

$$R \gg R_0 = \frac{1+\varepsilon_1}{\lambda_1^2}\left(Z_1 + 2\sqrt{Z_1 Z_2}\right). \tag{7}$$

Після підстановки Ψ_I у вигляді (4) в (2) одержимо рівняння відносно q_1, яке, з огляду на матричний характер операторів вихідного рівняння (2), має досить складну матричну структуру. Труднощі аналітичного інтегрування такого рівняння очевидні. Простіший спосіб знаходження функції $q_1(\vec{r}_1)$ полягає у використанні рівняння другого порядку (квадрованого рівняння Дірака), яке, як відомо [6], задовольняє діраковська біспінорна хвильова функція Ψ_I:

$$\left[\left(E_I + \frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{r_2}\right) + ic\left(\frac{Z_1}{r_1^2}\alpha_{r_1} + \frac{Z_2}{r_2^2}\alpha_{r_2}\right)\right]\Psi_I = c^2(p^2+c^2)\Psi_I. \tag{8}$$

Тут $\alpha_{r_i} = (\vec{\alpha}\vec{r}_i)/r_i$, а енергія терма E_I в нульовому наближенні дорівнює

$$E_I = E_1 - \frac{Z_2}{R}, \tag{9}$$

де другий доданок репрезентує енергію взаємодії електрона з частинкою B^{Z_2+}.

Для подальшого розгляду необхідно фіксувати величину параметрів Z_1, Z_2, j_1, l_1, m_1 відносно асимптотичного параметра R. Нижче асимптотичні розв'язки задачі двох центрів будуються для випадку, коли великими параметрами одного порядку є одночасно R, Z_1 і Z_2, а j_1 та інші квантові числа — порядку одиниці.

Підставляючи вираз (4) для Ψ_I у (8) і зберігаючи в асимптотичній області $r_1 \approx R$ величини порядку одиниці та $Z_{1,2}/R$ і нехтуючи членами $\sim R^{-2}$, приходимо до рівняння для невідомої функції $q_1(\vec{r}_1)$

$$\frac{d^2 q_1}{dr_1^2} + p^2(\vec{r}_1) q_1 = 0, \qquad p^2(\vec{r}_1) = \frac{1}{c^2}\left[\left(E_I + \frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}|}\right)^2 - c^4\right]. \tag{10}$$

де $p(\vec{r}_1)$ — релятивістський квазіімпульс електрона, центрованого на іоні A^{Z_1+}. Залежність функції q_1 від сферичних кутів θ_1, φ_1, що визначаються напрямком $\vec{n}_1$, параметрична.

Зауважимо, що при переході до одновимірного рівняння (10) неможна в прийнятому асимптотичному наближенні зберегти член з "відцентрованою енергією" $l_1(l_1+1)/r_1^2$, оскільки він порядку R^{-2}, як і члени $(Z_i/r_i^2)\alpha_{r_i}$, зумовлені спіном електрона. Врахування цих спінових членів привело б нас до матричного диференціального рівняння.

Дослідимо тепер розв'язок рівняння (10) у підбар'єрній області (при $r_{1,2} \sim R/2$) поблизу міжядерної осі $\vec{R}$. У цій області $p^2(\vec{r}_1) < 0$, $p = i\widetilde{p}$, а величина $\widetilde{p}$ дійсна, причому

$$\tilde{p}^2(\vec{r}_1) = \frac{1}{c^2}\left[c^4 - \left(E_I + \frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}|}\right)^2\right] \cong \tilde{p}^2(x) + O\left(\frac{\rho^2}{R^2}\right),$$

$$r_1 \cong x + \frac{\rho^2}{2x} + \cdots, \qquad r_2 \cong |\vec{r}_1 - \vec{R}| \cong R - x + \frac{\rho^2}{2(R-x)} + \cdots, \qquad \rho \ll R \approx x, \tag{11}$$

де x — віддаль від електрона до ядра A^{Z_1+} вздовж міжядерної осі, а ρ — віддаль від цієї осі. Далі, оскільки $dr_1 = d(\rho^2/2x)$ при $x = \mathrm{const}$, то асимптотична форма розв'язку рівняння (10) поблизу міжядерної осі $\vec{R}$ має вигляд

$$q_1(\vec{r}_1) = q_1(x)\exp(-\rho^2\tilde{p}(x)/2x), \qquad \rho \ll r \approx x, \tag{12}$$

де функція $q_1(x)$ є розв'язком рівняння

$$\frac{d^2q_1(x)}{dx^2} + \tilde{p}^2(x)q_1(x) = 0, \qquad \tilde{p}^2(x) = \frac{1}{c^2}\left[c^4 - \left(E_I + \frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{|\vec{r}_1 - \vec{R}|}\right)^2\right]. \tag{13}$$

Оскільки функція (12) експоненціально згасає на віддалях від осі $\vec{R}$ порядку $\rho \approx x^{1/2} \approx R^{1/2} \ll R$, то експоненту цієї функції можна зберегти в нерозкладеному вигляді.

Квазікласичний розв'язок рівняння (13), який задовольняє граничну умову (6), має вигляд

$$q_1(x) = \frac{A_1}{\sqrt{\frac{\tilde{p}(x)}{\lambda_1}}}\left(\frac{\varepsilon_1 Z_1}{2\lambda_1^2 e}\right)^{\frac{\varepsilon_1 Z_1}{\lambda_1}} \exp\left\{-\int_{x_1}^{x}\tilde{p}(x')dx'\right\}, \tag{14}$$

а точки повороту на міжядерній осі дорівнюють:

$$x_{1,2} = \frac{R/2}{1 + \frac{(1+\varepsilon_1)Z_2}{\lambda_1^2 R}}\left[1 + \frac{Z_1(1+\varepsilon_1)}{\lambda_1^2 R} \mp \sqrt{\left(1 - \frac{R_0}{R}\right)\left(1 + \frac{R_0 - 2Z_1(1+\varepsilon_1)/\lambda_1^2}{R}\right)}\right]. \tag{15}$$

Одержані формули визначають асимптотику розв'язків двоцентрового рівняння Дірака (2) у підбар'єрній області і придатні для застосування при виконанні умови (7). Ця умова вказує на те, що потенціальний бар'єр, який розділяє атомні частинки, повинен бути досить широким, а його квантова проникність — малою.

Асимтотика розщеплення термів при квазіперетинах. У нульовому наближенні початковий терм E_I (електрон пов'язаний з іоном A^{Z_1+}) перетинається з термом E_{II} кінцевого стану (електрон зв'язаний з іоном B^{Z_2+}) реакції (1) при міжядерних віддалях

$$R_p = (Z_2 - Z_1)/(E_1 - E_2). \tag{16}$$

Точні у нульовому наближенні перетини при врахуванні обмінної взаємодії перетворюються у квазіперетини. Величина розщеплення термів при цих квазіперетинах визначає ймовірність перезарядки (1) у зіткненнях багатозарядних іонів.

Для обчислення обмінного розщеплення термів ΔE при квазіперетинах скористаємося зображенням шуканої величини ΔE у вигляді інтеграла по поверхні S у конфігураційному просторі, перехід через яку характеризує розглядуваний процес [7, 8]

$$\Delta E = 2ic\int_S d\vec{S}(\Psi_{II}^{+}\vec{\alpha}\Psi_I), \tag{17}$$

де $d\vec{S}$ — вектор елемента поверхні, напрямлений від атомного залишка A^{Z_1+} до атомного залишка B^{Z_2+}, а для функцій $\Psi_{I,II}$ слід використовувати знайдені вище квазікласичні формули (4), (12) і (14).

Для зручності подальших обчислень за поверхню S виберемо площину, яка перпендикулярна міжядерній осі і перетинає її між точками повороту. Результат розрахунку за формолою (17) не повинен (і не буде) залежати від конкретного положення площини S.

Обчислюючи інтеграл (17) багатовимірним методом стаціонарної фази [11], приходимо до такого результату для головного члена асимптотики розщеплення термів ΔE у точці квазіперетину R_p:

$$\Delta E(R_p) = \frac{A_1 A_2}{\lambda_1}\left(\frac{\lambda_1}{1+\varepsilon_1} + \frac{\lambda_2}{1+\varepsilon_2}\right)\sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}}\left(\frac{\varepsilon_1 Z_1}{2e\lambda_1^2}\right)^{\varepsilon_1 Z_1/\lambda_1}\left(\frac{\varepsilon_2 Z_2}{2e\lambda_2^2}\right)^{\varepsilon_2 Z_2/\lambda_2} \times \tag{18}$$
$$\times B_{j_1 j_2 \mu} R_p^{-\mu-1} e^{-J},$$

де J — бар'єрний інтеграл, що дорівнює

$$J = \int\limits_{x_1}^{x_2} \widetilde{p}(x)dx; \qquad \mu = |m| - 1/2, \quad m = m_1 = m_2, \tag{19}$$

$$B_{j_1 j_2 \mu} = \frac{1}{\mu!(2\lambda_1)^\mu}\sqrt{\frac{(j_1+\mu+1/2)!(j_2+\mu+1/2)!}{(j_1-\mu-1/2)!(j_2-\mu-1/2)!}}. \tag{20}$$

Одержана формула (18) є релятивістським аналогом результату нерелятивістської квазікласики [3, 4] і виражає розщеплення термів при квазіперетинах через квантову проникність потенціального бар'єра, що розділяє атомні частинки.

Таблиця 1.

Терми	Релятивістський квазікласичний підхід (дана робота)	Нерелятивістський квазікласичний підхід [3]	Асимптотичний підхід [7, 8]
	$Z_1 = 1,\ Z_2 = 10,\ n_2 = 7$		
R_p	17,271	17,294	17,271
$\Delta E(R_p)$	$1,626 \cdot 10^{-2}$	$1,321 \cdot 10^{-2}$	$1,525 \cdot 10^{-2}$
	$Z_1 = 1,\ Z_2 = 20,\ n_2 = 12$		
R_p	21,319	21,375	21,319
$\Delta E(R_p)$	$2,623 \cdot 10^{-2}$	$1,917 \cdot 10^{-2}$	$4,881 \cdot 10^{-2}$
	$Z_1 = 1,\ Z_2 = 30,\ n_2 = 17$		
R_p	27,324	27,434	27,324
$\Delta E(R_p)$	$1,053 \cdot 10^{-3}$	$7,273 \cdot 10^{-4}$	$5,040 \cdot 10^{-3}$
	$Z_1 = 1,\ Z_2 = 40,\ n_2 = 22$		
R_p	33,643	33,828	33,643
$\Delta E(R_p)$	$3,505 \cdot 10^{-4}$	$2,313 \cdot 10^{-4}$	$4,724 \cdot 10^{-3}$

Обговорення результатів. У даній роботі в рамках релятивістського квазікласичного підходу одержано асимптотичний вираз для величини обмінного розщеплення термів при квазіперетинах. Як і в нерелятивістському випадку, $\Delta E(R_p)$ виражається через відомі параметри взаємодіючих частинок: заряди атомних залишків $Z_{1,2}$, енергії зв'язку $\lambda_{1,2}^2/2$ та квантові числа електрона у розглядуваних станах багатозарядних іонів. Щоб судити про вклад релятивістських ефектів у величину обмінного розщеплення термів, у таблиці наведено результати розрахунків $\Delta E(R_p)$ за формулами (18)–(20) порівняно з нерелятивістськими розрахунками роботи [3], а також з результатами релятивістського асимптотичного підходу [7, 8]. Як бачимо з таблиці, роль релятивістських ефектів швидко зростає при збільшенні заряду багатозарядового іона Z_2 і складає $\sim 30\%$ вже при $Z_2 = 30$. Крім того, видно, що асимптотичний підхід [6, 8] незастосовний при $Z_2 \gg Z_1$. У цьому випадку зміна потенціальної енергії атомного електрона під бар'єром не мала і тому спосіб знаходження хвильової функції шляхом запровадження поправкового множника [7, 8] незастосовний.

1. *Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К.* Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 200 с.
2. *Никитин Е.Е., Смирнов Б.М.* Медленные атомные столкновения. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 256 с.
3. *Чибисов М.И.* О перезарядке атомов на многозарядных ионах // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 1979. – **76**, вып.6. – С. 1898–1906.
4. *Чибисов М.И.* Обменное взаимодействие атома с многозарядными ионом // Журн. техн. физики. – 1981. – **51**, № 3. – С. 470–474.
5. *Люлька В.А.* Квантовомеханическая задача двух центров для уравнения Дирака // Теорет. мат. физика. – 1976. – **28**, № 2. – С. 212–222.
6. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. – М.: Наука, 1989. – 728 с.
7. *Лазур В.Ю., Горват П.П., Мигалина С.І., Шуба Й.М., Янев Р.К.* Асимптотичний підхід до проблеми розщеплення термів у релятивістській задачі двох центрів. І. Хвильова функція діраківського електрона в міжядерній області // Укр. физ. журн. – 1996. – **41**, № 5/6. – С. 605–611.
8. *Лазур В.Ю., Горват П.П., Мигалина С.И., Шуба И.М., Янев Р.К.* Расщепление термов в квантовомеханической задаче двух центров для уравнения Дирака // Теорет. мат. физика. – 1996. – **109**, № 2. – С. 232–249.
9. *Greiner W.* The decay of vacuum in supercritical fields of giant nuclear systems // Nucl. Phys. – 1985. – **A447**, No 2. – P. 271–334.
10. *Schuch R.* Collision physics with highly stripped slow ions / XIV ICPEAC. Invited papers. – Stanford University, USA, 1985.
11. *Федорюк М.В.* Метод перевала. – М.: Наука, 1977. – 368 с.

Ужгородський державний університет
Надійшло до редакції 18.02.97

УДК 530.12:531.51

В.В. Ярошенко

Возбуждение электромагнитного и гравитационного излучения гравитационной волной в потоках самогравитирующей плазмы

(Представлено академиком НАН Украины С.Я. Брауде)

Transformation of the gravitational wave energy into electromagnetic and gravitostatic wave disturbances in self-gravitating plasma streams is considered. Amplitudes, polarization, and phase velocities of three electromagnetic waves (one is reflected into vacuum and two waves pass into plasma), and two waves of the gravitational potential (gravitostatic waves) are calculated.

Гравитационные волны (ГВ), распространяясь в плазме, вызывают в ней электрические токи, порождающие, в свою очередь, электромагнитные поля. Исследованию трансформа-