АСИМПТОТИЧНІ МЕТОДИ В РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ЗАДАЧАХ З НЕВІДОКРЕМЛЮВАЛЬНИМИ ЗМІННИМИ

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

Кафедра теоретичної фізики, Ужгородський національний університет,
88000, Ужгород, вул. Волошина, 32
e-mail: Lazur@univ.uzhgorod.ua

За допомогою методу пограничного шару розвинуто релятивістську версію методу ВКБ для рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає повного відокремлення змінних. На базі розробленої рекурентної схеми отримання ВКБ-розкладів знайдено асимптотику хвильової функції діраківського електрона в задачі двох кулонівських центрів Z_1eZ_2 релятивістської квантової механіки. В рамках теорії збурень побудовано асимптотики адіабатичних термів релятивістської задачі Z_1eZ_2 в граничних випадках малих та великих міжядерних відстаней R. Обчислено перші два члени асимптотичного розкладу за степенями R^{-1} величини обмінного розщеплення термів в задачі двох кулонівських центрів для рівняння Дірака.

1. Вступ

Метою роботи є розробка нових та розвинення вже відомих асимптотичних методів розв'язування релятивістської квантово-механічної задачі двох кулонівських центрів Z_1eZ_2 для рівняння Дірака та задачі про штарківську іонізацію релятивістського атома у постійному однорідному електричному полі. Для цього розвинуто релятивістську версію методу ВКБ, яка, в поєднанні з методом пограничного шару [1,2], дозволяє розв'язувати рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає повного відокремлення змінних в жодній ортогональній системі координат.

Застосування методу ВКБ до цієї задачі полягає в зведенні рівняння Дірака до еквівалентного, більш звичного рівняння другого порядку, яке за формою нагадує рівняння Шредінгера. Оскільки потенціал володіє аксіальною симетрією, то гамільтоніан комутує з оператором проекції повного кутового моменту на вісь симетрії z, і отримане рівняння допускає відокремлення змінної φ. Проводячи в цьому рівнянні розклад за степенями $\hbar$, отримуємо систему зачеплених матричних диференціальних рівнянь першого порядку. Дана система послідовно розв'язується за допомогою релятивістської версії методу пограничного шару, започаткованого М. А. Леонтовичем та В. А. Фоком [1]. Основна ідея цього методу зводиться до наступного.

Досить часто для розв'язання квантово-механічної задачі достатньо знайти хвильову функцію не у всьому конфігураційному просторі, а тільки в околі деякого многовиду M меншої розмірності, де зосереджена хвильова функція. Стани, що описуються такими хвильовими функціями, називаються "локалізованими". Як приклад таких станів наведемо задачу про обмінну взаємодію атомних частинок на великих міжядерних відстанях. Обмінне розщеплення термів при квазіперетинах в такій задачі, як відомо [3], визначається в основному областю розподілу електрона, яка лежить в околі міжядерної осі $\vec{R}$ (M – пряма лінія). Інший приклад локалізованого стану – процес тунельної іонізації атома водню в досить слабкому постійному електричному полі, коли в підбар'єрній області потік ймовірності зосереджений в околі осі симетрії (M – пряма лінія).

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

В даній роботі вказаним методом ми детально вивчимо релятивістську задачу двох кулонівських центрів Z_1eZ_2. Трудність розгляду цієї задачі пов'язана з тим, що рівняння Дірака не відокремлюється для потенціалу двох кулонівських центрів в жодній ортогональній системі координат і потрібно мати справу з системою рівнянь в частинних похідних першого порядку, що істотно ускладнює всю конкретну проблему знаходження термів і хвильових функцій електрона. На жаль, навіть чисельний розв'язок цієї системи є досить важкою і громіздкою задачею, яка вимагає проведення заново досить складних обчислень для кожної окремої системи Z_1eZ_2. Це призводить до необхідності створення і дослідження наближених методів розв'язування даної задачі, які побудовані на фундаменті ясних фізичних уявлень, добре розробленого математичного апарату і мають чітку область застосування. Дана робота являє собою спробу зробити крок в цьому напрямку.

Робота побудована наступним чином. В розділі 2 для обчислення асимптотики енергії електрона $E(R)$ як функції міжядерної відстані R використовується метод теорії збурень, який не вимагає відокремлення змінних. При малих (великих) значеннях міжядерної відстані R в якості нульового наближення використовуються енергії та хвильові функції релятивістського об'єднаного (роз'єднаного) атома з зарядом $Z = Z_1 + Z_2$ ($Z = Z_1$ або $Z = Z_2$). В результаті проведених обчислень одержано асимптотичні розклади для енергії системи Z_1eZ_2 з точністю до $O(R^3)$ ($O(R^{-3})$). Отримані формули можуть бути використані, зокрема, для побудови одноелектронних релятивістських кореляційних діаграм важких квазімолекул в області між границями об'єднаного та роз'єднаного атомів. В розділі 3 розроблено метод розв'язування в квадратурах рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає повного відокремлення змінних, в підбар'єрній області в околі осі симетрії. В розділі 4 за допомогою даного підходу побудовано асимптотики квазікласичного типу для хвильової функції діраківського електрона в двоцентровій задачі Z_1eZ_2. За допомогою побудованої хвильової функції обчислено перші два члени асимптотики величини обмінного розщеплення термів в загальному нерезонансному випадку. В останньому розділі роботи отримані результати обговорюються і порівнюються з аналогічними нерелятивістськими результатами.

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

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

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

де r_i − віддаль від електрона до відповідного ядра ($i = 1,2$); $Z_{1,2}$ − заряди кулонівських центрів у полі яких рухається електрон; $\hat{\vec{p}} = -i\vec{\nabla}_r$ − оператор імпульсу електрона; c - швидкість світла.

У стандартному зображенні [4] матриці $\vec{\alpha}$, β мають вигляд:

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

де $\vec{\sigma}$ − матриці Паулі, а 0 та I − нульова та одинична матриці 2×2. Розіб'ємо повний гамільтоніан двоцентрової задачі $\hat{H}$ на гамільтоніан нульового наближення $\hat{H}^{UA}$ і збурення $\hat{W}$.

$$\hat{H} = \hat{H}^{UA} + \hat{W}. \tag{3}$$

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

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

який знаходиться на осі oz в точці z_0:

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

Точка z_0 ділить міжцентрову віддаль на два відрізки:

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

Уведемо сферичну систему координат r_0, θ_0, φ_0, початок якої знаходиться в точці (0,0, z_0), а кут θ_0 відраховується від осі oz, направленої від центра Z_1 до центра Z_2.

За функції нульового наближення виберемо незбурені хвильові функції об'єднаного атома з гамільтоніаном (4). Власні стани цього гамільтоніана характеризуються набором сферичних квантових чисел n, j, l, m, де n -головне квантове число; j і l -повний і орбітальний моменти електрона; m -проекція j на міжядерну вісь. Для даних j і l існують два типи розв'язків, які відрізняються парністю $P = (-1)^l$, замість якої, надалі, будемо використовувати орбітальний момент $l = j \pm 1/2$. Розв'язки рівняння Дірака для двоцентрової задачі Z_1eZ_2 повинні переходити при неперервному зближенні ядер $R \to 0$ у відповідні розв'язки одноцентрової кулонівської задачі. Тому в задачі двох центрів слід

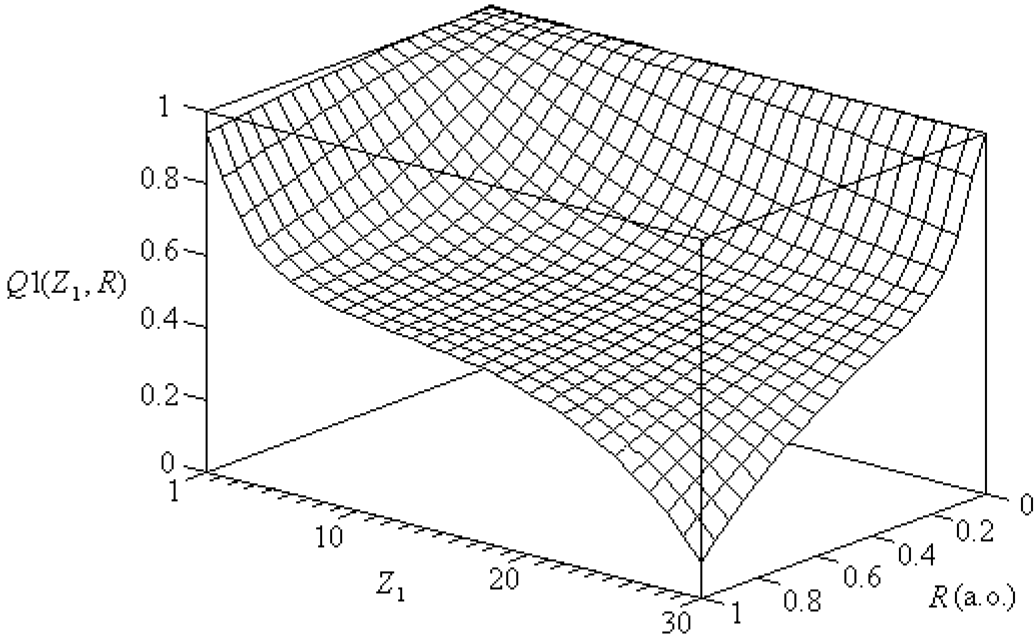


Рисунок 1. Відносний вклад $Q1(Z_1, R)$ релятивістських ефектів в енергію системи Z_1eZ_2 у резонансному випадку $Z_1 = Z_2$ для $2P_{3/2}\sigma$ стану.

розрізняти два типи термів і, відповідно до цього, два типи розв'язків рівняння Дірака з гамільтоніаном (1). А саме ті, які при неперервному зближенні ядер Z_1 і Z_2 переходять в стани з $l = j - 1/2$ і $l = j + 1/2$ для об'єднаного атома із зарядом ядра $Z = Z_1 + Z_2$. Явний вигляд власних функцій і власних значень оператора $\hat{H}^{UA}$ можна знайти в [4]. Розклавши оператор збурення $\hat{W}$ в ряд за поліномами Лежандра і обчисливши матричні елементи матриці $\left\| W_{njlm}^{njl'm'} \right\|$ до першого незникаючого доданку, ми пересвідчимося що вона є діагональною при $R \to 0$ по відношенню до кожної групи взаємовироджених (по l і m) станів. Кінцевий результат для енергії системи $Z_1 e Z_2$ при $R << 1$ має вигляд:

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

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

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

де $\alpha_0 = 1/c \approx 1/137.037$.

Для того, щоб оцінити вклад релятивістських ефектів в енергію системи $Z_1 e Z_2$, на рис. 1 зображено відношення $Q1(Z_1, R) = E_{bin} / E_{bin}^{(n)}$ між релятивістським $E_{bin} = (E_{njlm}^2 - c^4)/(2c^2)$ (див (7)-(9)) і нерелятивістським $E_{bin}^{(n)}$ [5] виразами для енергетичних термів, коли $Z_1 = Z_2$. Видно, що із зростанням сумарного заряду ядер Z та міжцентрових відстаней R роль релятивістських ефектів зростає.

В іншому граничному випадку, коли міжцентрові відстані R великі ($R >> 1$), а заряди Z_1, Z_2 різні, власні значення $E(R)$ двоцентрової задачі $Z_1 e Z_2$ розпадаються на два класи: $E_I -$ та $E_{II} -$терми, які при $R \to \infty$ переходять в енергетичні рівні ізольованих атомів eZ_1 і eZ_2, відповідно. Аналогічно до (3), розіб'ємо оператор повної енергії $\hat{H}$ на гамільтоніан нульового наближення $\hat{H}^{SA}$ і збурення $\hat{V}$:

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

Введемо сферичну систему координат r_1, θ_1, φ_1, початок якої знаходиться в точці (0,0,0), а кут θ_1 відраховується від осі oz, направленої від центра Z_1 до центра Z_2. Тоді в якості $\hat{H}^{SA}$ виберемо гамільтоніан водневоподібного релятивістського атома із зарядом ядра Z_1:

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

Власні стани оператора $\hat{H}^{SA}$ будемо характеризувати набором сферичних квантових чисел n_1, j_1, l_1, m_1, де n_1 -головне квантове число; j_1 і l_1 -повний і орбітальний моменти електрона; m_1 -проекція j_1 на міжядерну вісь [4]. Як і в попередньому випадку, розкладемо оператор збурення $\hat{V} = -Z_2 / \left|\vec{r}_1 - \vec{R}\right|$ в ряд за поліномами Лежандра і обчислимо матрицю $\left\| V_{njlm}^{njl'm'} \right\|$ оператора збурення до першого незникаючого недіагонального елемента.

Діагоналізуючи повну матрицю енергії по кожній групі взаємовироджених станів, отримаємо для E_I – термів системи Z_1eZ_2 у першому порядку теорії збурень аналітичний вираз у формі асимптотичного ряду за степенями R^{-1}:

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

Тут знаки “$\pm$” відповідають станам з $l_1 = j_1 \pm 1/2$ і використані наступні позначення

$$n_1' = n_1 - j_1 - \frac{1}{2} \qquad \aleph_1 = (-1)^{k_1 - l_1} k_1\,, \qquad k_1 = j_1 + \frac{1}{2}\,, \quad l_1 = j_1 \pm 1/2\,, \tag{13}$$

$$N_1 = \sqrt{n_1^2 - 2n_1'(k_1 - \gamma_1)}\,, \qquad \gamma_1 = \sqrt{k_1^2 - (\alpha_0 Z_1)^2}\,, \;\; \varepsilon_1 = \left[1 + \left(\frac{\alpha_0 Z_1}{n_1' + \gamma_1}\right)^2\right]^{-1/2}. \tag{14}$$

Останній доданок у формулі (12) збігається при $\alpha_0 \to 0$ з добре відомим виразом для лінійного ефекту Штарка рівнів тонкої структури, обчисленого в наближенні Паулі [6].

3. Аксіально-симетрична задача

Розглянемо тривимірну аксіально-симетричну квантово-механічну задачу, коли дві класично дозволені області розділені потенціальним бар'єром. Така ситуація реалізується при дослідженні штарківської іонізації релятивістського водневоподібного атома у постійному однорідному електричному полі та в задачі двох кулонівських центрів для рівняння Дірака. У цих випадках електронна хвильова функція зосереджена в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання, що є віссю симетрії z потенціалу. Знайдемо її квазікласичну асимптотику в підбар’єрній області.

Для біспінора

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

рівняння Дірака має вид

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

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

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

отримаємо матричне диференціальне рівняння другого порядку для невідомої функції Φ:

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

З огляду на аксіальну симетрію потенціалу V, розв’язок рівняння (16) будемо шукати в циліндричній системі координат $\{\rho z \varphi\}$, зобразивши його у мультиплікативній формі

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

Увівши в розгляд спінор $F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}$ та підставивши (17) в (16), отримаємо матричне диференціальне рівняння для F. Зображуючи його розв’язки у вигляді формального степеневого ряду

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

та прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях $\hbar$, отримуємо систему диференціальних рівнянь першого порядку для невідомих функцій S і компонент спінора $\varphi^{(n)}$.

Користуючись описаною вище схемою, знайдемо асимптотику хвильової функції в підбар'єрній області. В цій області функція F локалізована в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання електрона, що збігається з віссю симетрії z потенціалу. А тому, будемо шукати функцію S і компоненти спінора $\varphi^{(n)}$ у вигляді степеневого ряду:

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

Після підстановки цих розкладів у відповідні рівняння для S і $\varphi^{(n)}$ та прирівнювання до нуля коефіцієнтів при однакових степенях ρ, одержуємо систему звичайних диференціальних рівнянь першого порядку, які легко інтегруються. Вираз для нижньої компоненти η біспінора Ψ отримується з виразу для ξ заміною $W^+\to W^-$.

4. Квазікласична асимптотика двоцентрової хвильової функції та обмінне розщеплення адіабатичних термів

Знайдемо асимптотику (при $z\sim R>>1$) хвильової функції діраківського електрона в полі двох фіксованих ядер із зарядами Z_1 і Z_2, розташованих на великій відстані R один від одного. Потенціал такої задачі подамо у вигляді:

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

Розв'язки рівняння Дірака з потенціалом (20) будемо шукати з граничною умовою $\Psi_I \xrightarrow[z<<R]{} \Psi_1$, яка означає, що при наближенні електрона до атома 1, двоцентрова функція Ψ_I прямує до незбуреної атомної хвильової функції Ψ_1. Застосовуючи розроблену в розділі 3 загальну схему розв'язування Дірака до розглядуваного тут потенціалу (20), отримуємо вирази для функцій

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

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

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

де верхній (нижній) знак + (–) відповідає компоненті ξ (η). Хвильова функція Ψ_{II}, яка відповідає власному значенню E_{II}, будується аналогічно.

Для обчислення величини обмінного розщеплення адіабатичних термів скористаємося отриманим в [7] представленням цієї величини через інтеграл по поверхні S, яка умовно розділяє області локалізації електрона в Ψ_I- і Ψ_{II}-станах:

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

Зазначимо, що зображення (24) справедливе тільки в околі точок R_p квазіперетину E_I - і E_{II} - термів. З умови $E_I \cong E_{II}$ отримуємо вираз для точок квазіперетину

$$R_p = \frac{Z_2 - Z_1 + \sqrt{(Z_2 - Z_1)^2 - 4(E_1 - E_2)(Z_2\xi_1 - Z_1\xi_2)}}{2(E_1 - E_2)} . \qquad (25)$$

Обчислюючи поверхневий інтеграл (24) методом стаціонарної фази, приходимо до аналітичного виразу для перших двох членів асимптотичного розкладу $\Delta E(R)$:

$$\Delta E = \frac{2A_1A_2}{(|m|-1/2)!(\lambda_1+\lambda_2)^{|m|-1/2}} D_{j_1j_2m} R^{\frac{\varepsilon_1 Z_1}{\lambda_1}+\frac{\varepsilon_2 Z_2}{\lambda_2}-|m|-1/2} exp\left\{-\frac{R(\lambda_1+\lambda_2)}{2} - \frac{1}{2}\left(\frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1} + \frac{\varepsilon_2 Z_1}{\lambda_2}\right)\right\}\left[1+\frac{I}{R}\right], \quad (26)$$

$$D_{j_1j_2m} = \sqrt{\frac{(j_1+|m|)!(j_2+|m|)!}{(j_1-|m|)!(j_2-|m|)!}}, \qquad m = m_1 = m_2 , \qquad (27)$$

$$I = \frac{1}{\lambda_1+\lambda_2}\left[\aleph_1^2 + \aleph_2^2 - (|m|+1/2)^2 - \frac{\aleph_1\aleph_2}{|m|+1/2}\right] + \frac{|m|+1/2}{2}\left(\frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1^2} + \frac{\varepsilon_2 Z_1}{\lambda_2^2}\right) + \frac{\varepsilon_1 Z_2 \xi_1}{2\lambda_1} + \frac{\varepsilon_2 Z_1 \xi_2}{2\lambda_2} - \frac{Z_1^2}{4\lambda_1^3} - \frac{Z_2^2}{4\lambda_2^3} . \quad (28)$$

5. Обговорення результатів

В даній роботі запропоновано загальну схему побудови квазікласичних розв'язків рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає повного відокремлення змінних. Це дозволило отримати аналітичні вирази для асимптотики двоцентрової хвильової функції в підбар'єрній області й обчислити обмінне розщеплення

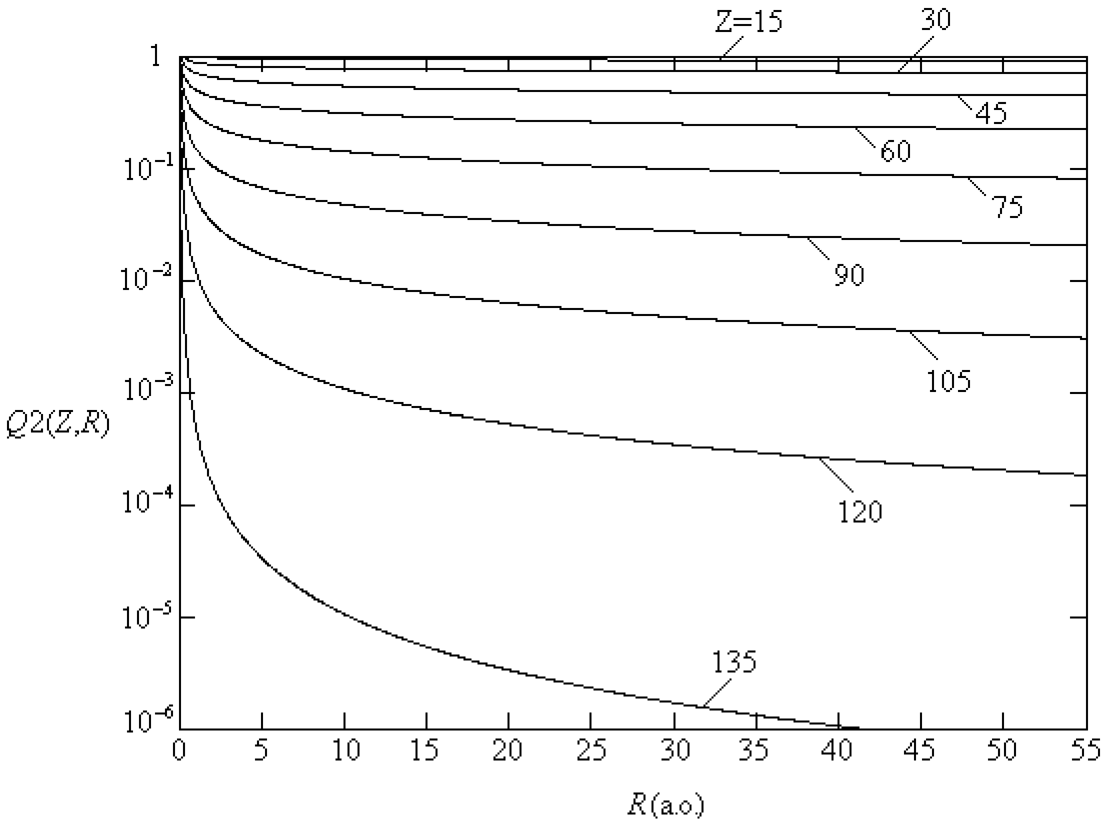


Рисунок 2. Відносний вклад $Q2(Z,R)$ релятивістських ефектів в величину обмінного розщеплення термів в резонансному випадку для $1S_{1/2}\sigma$ стану.

термів в релятивістській задачі Z_1eZ_2. Отримані результати для ΔE виражаються через відомі характеристики роз'єднаних атомів: заряди атомних залишків Z_1 і Z_2, асимптотичні коефіцієнти A_1, A_2, енергії зв'язку $\lambda_{1,2}^2/2$ і квантові числа електрона в розглянутих станах атомів (іонів). Для оцінки ролі релятивістських ефектів на рис. 2 зображено відношення $Q2(Z,R) = \Delta E / \Delta E^{(n)}$ між релятивістськими (26)-(28) і нерелятивістськими [5] розрахунками величини обмінного розщеплення симетричного g і антисиметричного u термів системи (Z,e,Z). Видно, що із збільшенням заряду ядер $Z = Z_1 = Z_2$ вклад релятивістських ефектів зростає і становить ~50% вже при $Z = 45$.

Робота виконана при частковій фінансовій підтримці міжнародної асоціації INTAS, грант № 99-01326.

Література

1. М. А. Леонтович, В. А. Фок, ЖЭТФ, **16,** с. 647, (1946).
2. В. М. Бабич, В. С. Булдырев, Асимптотические методы в задачах дифракции коротких волн, М.: Наука, (1972).
3. Б. М. Смирнов, Асимптотические методы в теории атомных столкновений, М.: Атомиздат, (1973).
4. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц,. Л. П. Питаевский, Квантовая электродинамика, М.: Наука, (1989).
5. Й. В. Комаров, Л. Й. Пономарев, С. Ю. Славянов, Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, М.: Наука, (1976).
6. С. А. Запрягаев, Оптика и спектроскопия, **44**, с. 892, (1978).
7. П. П. Горват, В. Ю. Лазур, С. Й. Мигалина, Й. М. Шуба, Р. К. Янев, ТМФ, **109,** с.232, (1996).

ASYMPTOTIC METHODS IN RELATIVISTIC PROBLEMS WITH UNSEPARABLE VARIABLES

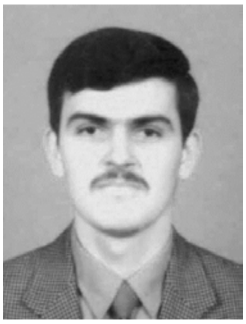
A. V. Katernoha, V. Yu. Lazur, O. K. Reity

Department of Theoretical Physics, Uzhgorod National University,
32 Voloshina Str., Uzhgorod, 88000, Ukraine,
e-mail: Lazur@univ.uzhgorod.ua

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

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

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



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