УДК 539.186

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА НА ВЕРОЯТНОСТИ СВОБОДНО-СВОБОДНЫХ ПЕРЕХОДОВ ЭЛЕКТРОНОВ

Н. Ю. Добролюбов, В. Д. Кукин, В. С. Ростовский

(кафедра квантовой статистики и теории поля; кафедра квантовой теории и физики высоких энергий)

Рассмотрен метод вычисления матричного элемента электрического дипольного перехода между состояниями непрерывного спектра с учетом существования во внешней области атома кулоновского и поляризационного потенциалов. Получены рекуррентные формулы, позволяющие вычислить вклад в матричный элемент от интеграла по области вне атома, используя значения радиальных волновых функций и их первых производных на границе.

1. При изучении взаимодействия электромагнитного поля с реальными нагретыми газами (плазмой) надо учитывать вклады от свободно-свободных электронных переходов, при которых начальное и конечное состояния электрона принадлежат к непрерывному спектру. Вероятность таких переходов зависит [1] от квадрата модуля матричных элементов вида

$$R_{E_1,l_1;E_2,l_2} = \int_0^\infty r\, P_{E_1,l_1}(r)\, P_{E_2,l_2}(r)\, dr, \tag{1}$$

где $rP_{E,l}(r)$ — радиальная часть волновой функции электрона (в поле иона) с энергией E и орбитальным моментом l. Исследуем случай, когда вне атома функция $P_{E,l}(r)$ удовлетворяет уравнению Шрёдингера вида (используется атомная система единиц: $e = m = \hbar = 1$)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2z}{r} + \frac{\varkappa}{r^4} + 2E\right] P_{E,l}(r) = 0, \tag{2}$$

где кроме орбитального и кулоновского поля (z — заряд атомного остова) учтен также и вклад поляризационного потенциала $-\varkappa/2r^4$.

Происхождение этого потенциала известно [1]: остов атома под воздействием электрического поля свободного электрона с напряженностью e/r^2 поляризуется и приобретает электрический дипольный момент, равный произведению напряженности поля на поляризуемость атома. Поэтому поляризационный потенциал есть энергия взаимодействия этого дипольного момента с электрическим полем свободного электрона и зависит от r, как $1/r^4$, а параметр $\varkappa$ определяется поляризуемостью остова атома.

При вычислении интегралов типа (1) удобно разбить область интегрирования на две части. Во внутренней области, $r \le a$, потенциал отличен от кулоновского и волновую функцию находят, как правило, с помощью численного интегрирования, поэтому и вычисление интеграла по этой области также проводится численно. Однако при вычислении интеграла по внешней области, $r \ge a$, возникают некоторые сложности. Прежде всего, как видно из уравнения (2), функции $P(r)$ при больших r и при $E > 0$ осциллируют, вследствие чего интеграл (1) не имеет определенного значения на верхнем пределе. Эта проблема известна давно [2, 3], и существует много рецептов выделения физически разумных значений подобных интегралов. Мы используем процедуру включения обрезающего фактора сходимости [4] и в дальнейшем будем исследовать поведение интегралов более общего вида

$$R_n^{asymp} = \lim_{\lambda\to 0} \int_a^\infty r^n\, P_1(r)\, P_2(r)\, \exp(-\lambda r)\, dr, \tag{3}$$

где P_1 и P_2 — два решения уравнения (2).

2. Наша основная цель — найти представление интеграла типа (3) в виде асимптотического ряда по степеням $1/a$ и выделить вклад поляризационного потенциала. Удобно ввести набор базисных функций

$$\begin{aligned} v_1(r) &= \tfrac{1}{\mu} P_1 P_2, & v_2(r) &= \tfrac{2}{\mu^3} P_1' P_2', \\ v_3(r) &= \tfrac{1}{\mu^2}(P_1 P_2' + P_1' P_2), & v_4(r) &= \tfrac{1}{\mu^2}(P_1 P_2' - P_1' P_2), \end{aligned} \tag{4}$$

где $\mu = \sqrt{2(E_1 - E_2)}$ — параметр обратной длины, штрих обозначает дифференцирование по r. Легко видеть, что производные от этих базисных функций по r выражаются в виде линейных комбинаций этих же базисных функций с коэффициентами, зависящими от соответствующих потенциалов в уравнениях (2) для P_1 и P_2, т. е. остаются в том же базисе (4). Введем также вспомогательные функции

$$g_i^{(n)}(a) = \frac{\mu}{a^n} \lim_{\lambda\to 0} \int_a^\infty r^n\, v_i(r)\, \exp(-\lambda r)\, dr, \quad i = 1, 2, 3, 4,$$

причем интересующая нас величина $R_n^{asymp} = a^n g_1^{(n)}(a)$.

Если подставить в очевидную формулу

$$\Phi(a) + \lim_{\lambda\to 0} \int_a^\infty \frac{d\Phi(r)}{dr} \exp(-\lambda r)\, dr = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4,$$

функции $\Phi(r) = (r/a)^n v_i(r)$ и заменить с помощью (4) и (2) производные v_i' через сами функции v_i, то получится система рекуррентных уравнений для $g_i^{(n)}$, которую можно записать в матричной форме:

$$v - Fg^{(n)} + G(n)g^{(n-1)} + Hg^{(n-2)} + Kg^{(n-4)} = 0,$$

или, более удобно, введя обратную матрицу $S = F^{-1}$:

$$g^{(n)} = Sv + SG(n)g^{(n-1)} + SHg^{(n-2)} + SKg^{(n-4)}, \quad (5)$$

где $g^{(n)} = \{g_i^{(n)}\}$ и $v = \{v_i\}$ следует рассматривать как столбцы при $i = 1, 2, 3, 4$. При этом матрицы $S, G(n), H, K$ имеют вид

$$S=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -\gamma \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad G(n)=\begin{pmatrix} \beta n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta n & -\alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & \beta n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta n \end{pmatrix},$$

$$H = \beta^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L & M \\ L & 0 & 0 & 0 \\ -M & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K = \delta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь введены безразмерные параметры $L = l_1(l_1+ +1) + l_2(l_2 + 1)$, $M = l_1(l_1 + 1) - l_2(l_2 + 1)$, $\gamma = = (E_1 + E_2)/\mu^2$ и три безразмерных «параметра малости»: $\alpha = 4z/(a\mu^3) \sim 1/a$, $\beta = 1/(a\mu) \sim 1/a$, $\delta = 2\varkappa/(a^4\mu^2) \sim 1/a^4$. Хорошо видно, что матрица S имеет нулевой порядок малости по степеням $1/a$, матрицы G, H, K — соответственно первый, второй и четвертый.

Ищем решение системы (5) в виде разложения в асимптотический ряд по степеням параметра малости $1/a$:

$$g^{(n)} = \left(\sum_{m\geq 0} Q^{(m)}(n)\right) v. \quad (6)$$

Подставляя (6) в (5) и собирая вместе слагаемые одного порядка малости, получим рекуррентную формулу

$$Q^{(m+1)}(n) =$$
$$= SG(n)Q^{(m)}(n-1) + SHQ^{(m-1)}(n-2) + SKQ^{(m-3)}(n-4) =$$
$$= Q^{(m)}(n)G(n-m)S + Q^{(m-1)}(n)HS + Q^{(m-3)}(n)KS, \quad (7)$$

при этом выбираются начальные значения $Q^{(0)}(n) = S$, $Q^{(-1)}(n) = Q^{(-2)}(n) = Q^{(-3)}(n) = 0$. Первая часть формулы (7) наглядно показывает способ ее получения, вторая более удобна при практических расчетах.

Так как для вычисления матричных элементов (3) достаточно знать лишь первую строку матричного равенства (6), то можно для первой строки матрицы Q ввести особое обозначение A, $A_i^{(m)} = Q_{1i}^{(m)}(n)$, тогда искомый результат записывается в явном виде:

$$R_n^{asymp} = a^n g_1^{(n)} = a^n \left(\sum_{m\geq 0} A_i^{(m)}\right) v_i(a),$$

где $A_i^{(-3)} = A_i^{(-2)} = A_i^{(-1)} = \{0, 0, 0, 0\}$, $A_i^{(0)} = = \{0, 0, 0, -1\}$,

$$A_i^{(m+1)} = A_j^{(m)} (G(n-m)S)_{ji} + A_j^{(m-1)} (HS)_{ji} +$$
$$+ A_j^{(m-3)} (KS)_{ji}, \quad m = 0, 1, 2, \ldots$$

или, в явном виде,

$$\begin{aligned} A_1^{(m+1)} &= \left[\alpha A_2^{(m)} - \beta(n-m)A_3^{(m)} + \beta\gamma(n-m)A_4^{(m)}\right] + \\ &\quad + \beta^2(\gamma M - L)A_2^{(m-1)} + \delta A_2^{(m-3)}, \\ A_2^{(m+1)} &= \left[\beta(n-m)A_4^{(m)}\right] + \beta^2 M A_2^{(m-1)}, \\ A_3^{(m+1)} &= \left[-\beta(n-m)A_2^{(m)}\right], \\ A_4^{(m+1)} &= \left[-\beta(n-m)A_1^{(m)} - \beta\gamma(n-m)A_2^{(m)} + \alpha A_3^{(m)}\right] + \\ &\quad + \beta^2\left[-LA_3^{(m-1)} + MA_4^{(m-1)}\right] + \delta A_3^{(m-3)}. \end{aligned} \quad (8)$$

Рекуррентные формулы (8) позволяют достаточно просто вычислить вклад в матричный элемент электрического дипольного (или более высокой мультипольности) перехода от интеграла по области вне атома, используя при этом только значения волновой функции и ее производной на поверхности. Однако следует предупредить о некоторой опасности: при очень близких значениях энергий E_1 и E_2 параметр μ возрастает и, в принципе, «параметры малости» α, β, δ могут оказаться уже не слишком малыми.

Литература

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М., 1974.
2. *Гольдбергер М., Ватсон К.* Теория столкновений. М., 1967.
3. *Друкарев Г.Ф.* Столкновения электронов с атомами и молекулами. М., 1978.
4. *Кукин В.Д., Ростовский В.С., Юдин Н.П.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1988. №6. С. 34 (Moscow University Phys. Bull. 1988. N 6. P. 38).

Поступила в редакцию
09.04.97