Краткие сообщения по физике № 6-1989 г.

УДК 539.186

ПЕРЕХОДЫ $nl \to n'l'$ В РИДБЕРГОВСКИХ АТОМАХ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ

М.И. Сыркин

В борновском приближении получены аналитические выражения сечений оптически запрещенных переходов $nl \to n'l'$ в ридберговских атомах при столкновениях с заряженными частицами.

Переходы $nl \to n'l'$ ридберговского электрона сопровождаются передачей энергии $\Delta E \approx Z^2 Ry \times \Delta n/(nn')^{3/2}$ и момента $\Delta l = l' - l$, где n и l – главное и орбитальное квантовые числа. Ряд важных частных случаев таких переходов при столкновениях с заряженными частицами был исследован ранее. В /1/ получены сечения переходов $n \to n'$, усредненные по начальному и конечному орбитальным моментам. Такие сечения применимы для достаточно высоких уровней, заселенных по l в соответствии со статвесом. Для более низких уровней статистическое равновесие по l нарушено и необходимо рассматривать переходы между состояниями с фиксированными l. Среди таких переходов наиболее интенсивны переходы с $\Delta n = 0$, $\Delta l > 0$. Теория этих переходов развита в /2, 3/. Однако для полного количественного описания заселенности состояний с нарушенным равновесием по l, в особенности в разреженной плазме (токамаки, планетарные туманности), следует также учитывать переходы с $\Delta n \neq 0$. Среди них наиболее подробно изучены переходы $\Delta l = 1$ /4/. В работе /5/ рассматривались s-s и s-p переходы для $\Delta n = 1$, а в работе /6/ – переходы 1s-nl. Численные расчеты борновских сечений переходов $nl \to n'l'$ для $n \leqslant 6$, $\Delta n = 1, 2$ и $\Delta l = 0 - 6$ приведены в /7/.

В настоящей работе получены аналитические зависимости борновских сечений оптически запрещенных переходов от Δn и Δl, и с помощью численных расчетов построена простая аппроксимационная формула. Использована система атомных единиц с единицей Ry для энергии.

Общие формулы для сечений. При больших скоростях заряженных частиц $v \gg v_0$ ($v_0 = 2{,}18 \cdot 10^8$ см/с – атомная единица скорости) применимо борновское приближение, согласно которому сечение $nl \to n'l'$ перехода в импульсном представлении имеет вид /8/:

$$\sigma(nl \to n'l') = \frac{8\pi}{v^2}\,(2\kappa + 1)\,(2l' + 1)\begin{pmatrix} l l' \kappa \\ 000 \end{pmatrix}^2 \int_{q_0}^{q_1} \frac{dq}{q^3}\, R^2_{\Delta n,\kappa}(q), \tag{1}$$

$$R_{\Delta n,\kappa}(q) = \int_0^\infty P_{nl}(r) P_{n'l'}(r)\, j_\kappa(qr)\, dr,$$

где $\kappa = \Delta l = l' - l$, $q_0 = \Delta E/2v$, $q_1 = 2v$, ΔE – энергия перехода, $P_{nl}, P_{n'l'}$ – радиальные волновые функции (водородоподобные) ридберговского электрона. В (1) опущены малые мультипольные поправки с $\kappa > \Delta l$. При $n, n' \gg 1$ естественно использовать квазиклассическое представление радиального интеграла

$$R_{\Delta n,\Delta l}(q) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} j_{\Delta l}(Qr)\, e^{i\Delta n\theta}\, d\theta, \tag{2}$$

где $r = 1 - \epsilon\cos u$, $\theta = u - \epsilon\sin u$, $Q = qnn'a_0/Z$, $a_0 = 0{,}5 \cdot 10^{-8}$ см – атомная единица длины, Z – спектроскопический символ. При $\Delta l = 1$ $\epsilon = (1 - l^2/nn')^{1/2}$, при $\Delta l > 1$ ϵ выражается более сложным образом /3/, однако в пределе $n \to \infty$, $l/n \to 0$ имеем $\epsilon \to 1$ при всех Δl.

Согласно (1), сечения оптически разрешенных переходов $\Delta l = 1$ описываются известной формулой Бете – Борна /4, 8/. Перейдем к запрещенным переходам.

Мультипольные переходы $\Delta l \neq 1$. В случае $\Delta l = 0$ $R_{\Delta n,\Delta l}$ из (1) вычисляется точно при любом Δn и соответствующие сечения при $v \gg v_0$ можно представить в виде

$$\sigma(nl \to n'l') = 8C_{\Delta n}\pi a_0^2 (nn')^2/Z^2(\Delta n)^3 v_?^2 \tag{3}$$

где $C_{\Delta n} = (0{,}285, 0{,}235, 0{,}226, 0{,}218, 0{,}210, 0{,}190)\cdot 10^{-1}$ для $\Delta n = 1, 2, 3, 4, 5, 10$ соответственно.

В общем случае $\Delta l \geqslant 2$ аналитически вычислить $R_{\Delta n,\Delta l}$ сложно. Анализ поведения $R_{\Delta n,\Delta l}$ показывает, что основной вклад в интеграл по q в (1) вносит область импульсов q_m, в которой $R_{\Delta n,\Delta l}(q)$ максимален. Тогда

$$\int_0^\infty \frac{dq}{q^3} R^2_{\Delta n,\Delta l}(q) \approx \frac{F(\Delta n, \Delta l)}{q_m^3}, \quad F(\Delta n, \Delta l) = \int_0^\infty R^2_{\Delta n,\Delta l}(q)\, dq. \tag{4}$$

Случай $\Delta n \gg \Delta l$. В этом случае характерная область импульсов $Q_m \sim \Delta n$ и из (1), (4) при $\Delta l \gg 1$ следует

$$F(\Delta n, \Delta l) \approx K(\Delta n, \Delta l)/(\Delta l)^2, \quad K(\Delta n, \Delta l) = \int_0^\infty P^2_{nl} P^2_{n'l'}\, dr, \tag{5}$$

где K слабо зависит от Δn, Δl. Проследим получение этого результата из квазиклассического представления (2). При $\Delta n \gg \Delta l$ асимптотика $R_{\Delta n,\Delta l}$ по Δn определяется точкой стационарной фазы $\theta = 0$. Это дает $R(Q_m) \sim \sim (\Delta n)^{-1/2}$. Учитывая, что область интегрирования по Q сама порядка Δn, то F слабо зависит от Δn. Таким образом имеем

$$\sigma(\Delta n > \Delta l) \propto (2\Delta l + 1)/(\Delta n)^3(\Delta l)^2. \tag{6}$$

Случай $\Delta n \ll \Delta l$. Здесь можно ожидать, что $Q_m \sim \Delta l$. Для расчета $F(\Delta n, \Delta l)$ удобно исходить из (2). Основной вклад в интеграл (2) по θ при $\Delta n \ll \Delta l$ дает, в отличие от предыдущего случая, область резкого роста $j_{\Delta l}(Qr)$, где экспонента от Δn не успевает осциллировать. Интегрируя по частям, находим $R(Q_m) \sim \sim \Delta n^{-1}$ и $F(\Delta n, \Delta l) \propto \Delta n^{-2}$. В то же время зависимость от Δl оказывается слабой, что подтверждается численным расчетом. Поэтому

$$\sigma(\Delta n < \Delta l) \propto (2\Delta l + 1)/(\Delta n)^2(\Delta l)^3. \tag{7}$$

Объединяя (6) и (7), представим сечение в виде

$$\sigma(nl \to n'l') = \frac{\pi a_0^2 (nn')^2}{Z^2} \frac{8}{v^2} (2\Delta l + 1)(2l' + 1) \begin{pmatrix} l l' \Delta l \\ 0\,0\,0 \end{pmatrix}^2 \frac{\min(\Delta n^{-1}, \Delta l^{-1})}{(\Delta n)^2(\Delta l)^2} K(\Delta n, \Delta l, \epsilon). \tag{8}$$

Результаты численных расчетов. Значения K из (8), рассчитанные по (2) с $\epsilon = 1$, приведены в табл. 1. Видно, что $K(\Delta n, \Delta l, \epsilon)$ меняется слабо и, следовательно, (8) правильно отражает поведение сечений в квазиклассическом пределе. Функция K медленно уменьшается ($\sim 15\%$) с ростом l (уменьшением ϵ). Резкое падение отмечается лишь вблизи $l \sim n-1$. Функция K также рассчитывалась по квантовой формуле (1) до $n \leqslant 15$ (для $n < 7$ эти расчеты воспроизводят данные /6/). Оказалось, что при $\Delta n > \Delta l$ формула (2) заметно занижает функцию K ($\sim 50\%$) лишь для малых $n \lesssim 5$. Но уже при $n \sim 15$ погрешность в пределах $\sim 20 - 30\%$. Для $\Delta n < \Delta l$ расхождения при малых n более существенны (до 2 – 3 раз), а при $n > 15$ – меньше фактора 2.

Таблица 1

Значения функции 10К (Δn, Δl, ε), рассчитанные по формуле (2) при ε = 1

Δl \ Δn	1	2	4	6	8	10
2	0,204	0,124	0,134	0,135	0,132	0,129
4	0,160	0,140	0,097	0,108	0,113	0,116
6	0,138	0,144	0,120	0,096	0,106	0,111
8	0,116	0,140	0,134	0,115	0,098	0,105
10	0,099	0,135	0,142	0,111	0,105	0,099

Рассмотрим вклад запрещенных переходов в полное сечение $\sigma_{n\to n'}$. Его можно представить в виде

$$\sigma'_{n\to n'} \approx \frac{\pi a_0^2\,(nn')^2}{Z^2}\;\frac{8\bar{K}}{v^2}\;\frac{f(\Delta n)}{(\Delta n)^3}\,, \tag{9}$$

где $\bar{K} \approx 0{,}017$, $f(\Delta n) = 2\,[\ln \Delta n + 1/(1 + 1/\Delta n)]$. Сравнение (9) с полным сечением $\sigma_{n\to n'}$ из /1/ показывает, что переходы $\Delta l \geqslant 2$ вносят определяющий вклад ($\gtrsim 50\%$) при $v \sim v_0$ и достаточно больших $\Delta n \gtrsim 5 - 10$. Для больших $v \gg v_0$ и малых Δn их доля в пределах $\sim 20 - 30\%$.

Автор благодарен И.Л. Бейгману и Л.П. Преснякову за полезные советы, обсуждение результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бейгман И.Л. Труды ФИАН, **119**, 130 (1980).
2. Percival I.C., Richards D. J. Phys. B., **10**, 1497 (1977).
3. Бейгман И.Л., Сыркин М.И. ЖЭТФ, **89**, 400 (1985); Краткие сообщения по физике ФИАН, № 7, 13 (1986).
4. Percival I.C., Richards D. Adv. At. Mol. Phys., **11**, 1 (1975).
5. Sobeslavsky E. Ann. der Physik, **28**, 321 (1973).
6. Виноградов А.В., Урнов А.М., Шевелько В.П. ЖЭТФ, **60**, 2060 (1971).
7. Kingstone A.E., Lauer J.E. Proc. Phys. Soc., **87**, 399 (1966).
8. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М., Наука, 1979.

Минский государственный
педагогический институт

Поступила в редакцию 6 января 1989 г.