УДК 539.184.5

О ДИПОЛЬНОМ КУЛОН-БОРНОВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ДЛЯ СЕЧЕНИЙ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ РИДБЕРГОВСКИМИ СОСТОЯНИЯМИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С ЭЛЕКТРОНАМИ

И. Л. Бейгман, С. А. Чернягин

Рассмотрены переходы n-n' в многозарядных ридберговских ионах при столкновениях с электронами в дипольном кулон-борновском приближении. Показано, что дипольное кулон-борновское приближение с полюсным потенциалом завышает сечение перехода как при больших, так и при малых энергиях столкновения. Приведен рецепт регуляризации. Регуляризованное дипольное кулон-борновское приближение удовлетворительно согласуется с прямыми численными расчетами по программе "АТОМ".

Сечения переходов между ридберговскими состояниями ионов представляют интерес как с точки зрения исследования общей квантовой задачи трех тел, так и с точки зрения приложений к кинетике горячей лабораторной и астрофизической плазмы. С точки зрения кинетических приложений наиболее интересны сечения переходов между ридберговскими уровнями, усредненные по угловым квантовым числам. Именно такие n-n' переходы и являются предметом данной работы.

В борновском приближении сечения переходов n-n' при столкновении с электронами были исследованы в работах [1, 2] (см. также монографию [3]). Методы, выходящие за рамки теории возмущений и основанные на использовании классической механики для этих переходов были развиты в ряде работ (см., напр., [3 – 5]). Наиболее адекватным методом для исследования многозарядных ионов с электронами является кулон-борновское

приближение, непосредственно учитывающее эффекты дальнодействующего кулоновского взаимодействия многозарядного иона с электроном. Это приближение широко используется для расчета сечений переходов из основного состояния или между слабовозбужденными уровнями (см., напр., [3]). Однако прямое использование этих методов для переходов между ридберговскими состояниями встречается с вычислительными трудностями, которые чрезвычайно резко возрастают с увеличением главного квантового числа n. Эти трудности могут быть преодолены в рамках дипольного приближения для потенциалов взаимодействия. Дипольное приближение для переходов между ридберговскими состояниями впервые использовалось в работе [6] и как показано, например, в [2, 4] справедливо для переходов с разностью главных квантовых чисел $\Delta n = \mid n - n' \mid$ порядка 1. Кулон-борновская теория возмущений с дипольным приближением для потенциала рассматривалась в ряде работ [7 – 10] (см. также обзор [11]).

В настоящей работе исследовались переходы между ридберговскими уровнями многозарядных ионов в рамках кулон-борновской теории возмущений с дипольным приближением для потенциала взаимодействия. Потенциал взаимодействия, использованный в [7 – 11], расходится на малых расстояниях, что приводит к неправильным результатам при больших энергиях. Мы укажем способ регуляризации потенциала и сравним полученные результаты как с обычным (полюсным) дипольным приближением, так и с прямыми расчетами сечений переходов в кулон-борновском приближении по программе "АТОМ" [12].

Борновское и кулон-борновское приближения.

Полный гамильтониан системы ион + внешний электрон имеет вид:

$$H = H_a + \frac{e^2}{\mid \mathbf{R} - \mathbf{r} \mid} + T_e - \frac{Ze^2}{R}, \tag{1}$$

где H_a – гамильтониан атома, R – радиус-вектор внешнего электрона, r – радиус-вектор ридберговского электрона. $T_e = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ – оператор кинетической энергии внешнего электрона, m – масса электрона, Z – спектроскопический символ ридберговского иона.

В борновском приближении в качестве возмущения рассматривается взаимодействие:

$$V_b = \frac{e^2}{\mid \mathbf{R} - \mathbf{r} \mid} - \frac{Ze^2}{R}. \tag{2}$$

В этом случае сечение перехода n-n'

$$\sigma^b_{nn'} = \frac{m^2 a_0^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{k'}{k}\frac{1}{n^2}\sum_{l,m,l',m'} \mid \int e^{-i\mathbf{qR}}\varphi_{nlm}(\mathbf{r})V_b\varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r})d\mathbf{R}d\mathbf{r} \mid^2 d\Omega, \tag{3}$$

где $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ – волновые векторы налетающего электрона до и после взаимодействия; $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, $\varphi_{nlm}(r)$, $\varphi_{n'l'm'}(r)$ – волновые функции ридберговского электрона в начальном и конечном состояниях соответственно.

В борновском приближении можно выполнить интегрирование по координатам внешнего электрона. Тогда

$$\sigma^b_{nn'} = \frac{8\pi}{k^2}\frac{1}{n^2}\sum_{l,m,l',m'}\int \mid < nlm \mid \exp(-i\mathbf{qR} \mid n'l'm' > \mid^2 \frac{dq}{q^3}. \tag{4}$$

В кулон-борновском приближении в качестве возмущения рассматривается взаимодействие

$$V_c = \frac{e^2}{\mid \mathbf{R} - \mathbf{r} \mid} - \frac{e^2}{R}. \tag{5}$$

Сечение возбуждения имеет вид (в этом случае удобно нормировать волновые функции непрерывного спектра на δ-функцию по энергии):

$$\sigma^c_{nn'} = \frac{mE'}{2\pi^2}\frac{a_0^2}{\hbar^2}\frac{1}{n^2}\sum_{l,m,l',m'} \mid \int F_E(\mathbf{R})\varphi_{nlm}(\mathbf{r})V_c\varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r})F_{E'}(\mathbf{R})d\mathbf{r}d\mathbf{R} \mid^2 d\Omega. \tag{6}$$

Здесь F_E и $F_{E'}$ – собственные волновые функции гамильтониана $H_c = T_e - \frac{(Z-1)e^2}{R}$, с энергиями E и E' соответственно.

В отличие от борновского приближения интегрирование по координатам внешнего электрона не выполняется в аналитическом виде. Мы приведем выражение для сечения возбуждения через кулоновскую функцию Грина. Раскрывая квадрат шестимерного интеграла в выражении (6), рассматривая его как двенадцатимерный, учитывая, что

$$\int F_E(\mathbf{R})F_E(\mathbf{R}')d\Omega_E = i\pi \mathrm{Im}\{G^+_E(\mathbf{R},\mathbf{R}')\}, \tag{7}$$

$$\int F_{E'}(\mathbf{R})F_{E'}(\mathbf{R}')d\Omega_{E'} = i\pi \mathrm{Im}\{G^-_{E'}(\mathbf{R},\mathbf{R}')\}, \tag{8}$$

и обозначая $d^{12}r = d\mathbf{r}d\mathbf{r}'d\mathbf{R}d\mathbf{R}'$, получаем:

$$\sigma^c_{nn'} = \frac{mE'}{8\pi}\frac{a_0^2}{\hbar^2}\int \mathrm{Im}\{G^+_E(\mathbf{R},\mathbf{R}')\}\varphi_{nlm}(\mathbf{r})\varphi_{nlm}(\mathbf{r}')V_c(\mid \mathbf{R}-\mathbf{r}\mid)\times$$
$$\times V_c(\mid \mathbf{R}'-\mathbf{r}'\mid)\varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r})\varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r}')\mathrm{Im}\{G^-_{E'}(\mathbf{R},\mathbf{R}')d^{12}r,$$

но $\sum\limits_{l,m}\varphi_{nlm}(\mathbf{r})\varphi_{nlm}(\mathbf{r}') = \lim_{E\to E_n}(E-E_n)G_n(\mathbf{r},\mathbf{r}') = P_n(\mathbf{r},\mathbf{r}')$, где $P_n(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ – матрица плотности, являющаяся вычетом функции Грина для полюса в точке E_n.

Окончательно:

$$\sigma^c_{nn'} = \frac{mE'}{8\pi}\frac{a_0^2}{\hbar^2}\int \mathrm{Im}\{G^+_E(\mathbf{R},\mathbf{R}')\}P_n(\mathbf{r},\mathbf{r}')V_c(\mid \mathbf{R}-\mathbf{r}\mid)\times$$
$$\times V_c(\mid \mathbf{R}'-\mathbf{r}'\mid)P_{n'}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\mathrm{Im}\{G^-_{E'}(\mathbf{R},\mathbf{R}')\}d^{12}r. \tag{9}$$

Аналитические выражения для кулоновской функции Грина приведены в [13]. Таким образом, использованная функция Грина для кулоновского поля позволяет выполнить суммирование по орбитальным квантовым числам до вычисления матричных элементов.

В рамках борновской теории возмущений дипольное приближение можно получить из формулы (3) разложением экспоненты по степеням **qr** (известная формула Борна-Бете [3]):

$$\sigma_{nn'} = \frac{Ry}{\Delta E_{nn'}}\frac{8\pi}{k^2}f_{nn'}\ln\frac{q_m}{k-k'}, \tag{10}$$

где $\Delta E_{nn'} = E_n - E_{n'} = \Delta E$, $f_{nn'}$ – сила осциллятора перехода n-n', $q_m = k + k'$.

Сила осциллятора для переходов между высоковозбужденными уровнями согласно [2] равна:

$$f_{nn'} = \left[\frac{\epsilon\epsilon'}{(\Delta\epsilon)^3}\right]\frac{32}{3n^2}\frac{1}{\sqrt{3}}\left(1-\frac{0,25}{\Delta n}\right), \tag{11}$$

где $\epsilon = 1/n^2$, $\epsilon' = 1/n'^2$, $\Delta\epsilon = \mid \epsilon\text{-}\epsilon' \mid$, $\Delta n = \mid n\text{-}n' \mid$.

В рамках кулон-борновской теории возмущений дипольное приближение следует из формулы (6), если в разложении V по мультиполям

$$V_c = \frac{e^2}{\mid \mathbf{R}-\mathbf{r}\mid} - \frac{e^2}{\mathbf{R}} = e^2\left(\frac{1}{R_>} + \frac{(\mathbf{R},\mathbf{r})}{R_>^2} + \ldots\ldots - \frac{1}{R}\right)$$

оставить первый неисчезающий на больших r (дипольный) член разложения

$$V_d = \frac{(\mathbf{R}, \mathbf{r})}{R^2}. \tag{12}$$

Подставляя V_d в формулу (6), получаем выражение, аналогичное выражению для тормозного излучения, в котором можно выполнить аналитическое интегрирование методом, предложенным Зоммерфельдом (см., например, [11]). Согласно [10] имеем:

$$\sigma_{nn'} = \frac{Ry^2\pi}{\Delta E^2_{nn'} k_0^2} f_{nn'} \sigma_0 \left(\frac{\Delta E}{z^2}, \frac{E}{\Delta E} \right), \tag{13}$$

где

$$\sigma_0 \left(\frac{\Delta E}{z^2}, \frac{E}{\Delta E} \right) = 2\pi^2 \frac{\Delta E}{E} \frac{\exp(2\pi\eta)}{[\exp(2\pi\eta) - 1][\exp(2\pi\eta') - 1]} \times$$

$$\times x \frac{d}{dx} \mid F(i\eta, i\eta', 1, x) \mid^2;$$

$$x = -\frac{4\eta\eta'}{(\eta - \eta')^2}; \ \eta = -z \left(\frac{Ry}{E} \right)^{1/2}; \ \eta' = -z \left(\frac{Ry}{E - \Delta E} \right)^{1/2};$$

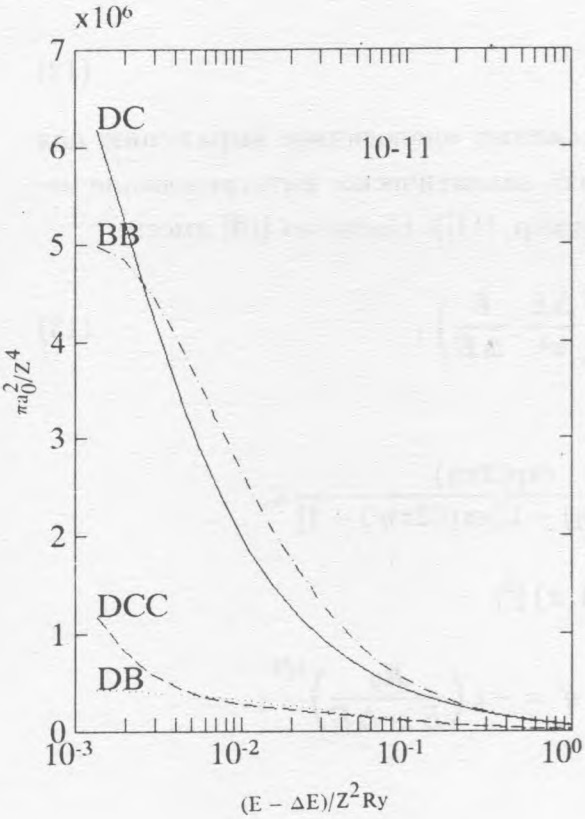
F – гипергеометрическая функция.

Регуляризация дипольного приближения.

На рис. 1 представлено сравнение сечений перехода 10-11 в дипольном кулон-борновском приближении с дипольной частью борновского сечения, вычисленного по формулам [2]. Дипольное кулон-борновское сечение при больших энергиях переходит в формулу Борна-Бете и значительно превышает борновское на больших энергиях. Это отличие связано с полюсным характером дипольного потенциала, который дает неправильное поведение амплитуды перехода при больших переданных импульсах q.

Сравнение выражений [4] с формулой (10) показывает, что при больших энергиях параметр регуляризации q_m должен быть равен $q_0 = Zp_0 \frac{\Delta n}{n^2}$, где p_0 – импульс электрона на первой боровской орбите. Введение q_0 приводит к отличию, которое в предельном случае больших энергий составляет фактор 2, однако рис. 1 демонстрирует, что в области максимума борновского сечения и вплоть до энергий $Z^2 Ry$ это отличие значительно больше.

Остановимся на физической интерпретации этой величины. Средний импульс на орбите с главным квантовым числом n есть $p_n = \frac{Zp_0}{n}$. Если рассматривать переход n-n' в рамках классического бинарного приближения, то минимально-возможный переданный импульс есть $\mid p_n - p_{n'} \mid \cong Zp_0 \frac{\Delta n}{n^2}$, что как раз и соответствует параметру $q_m = q_0$.



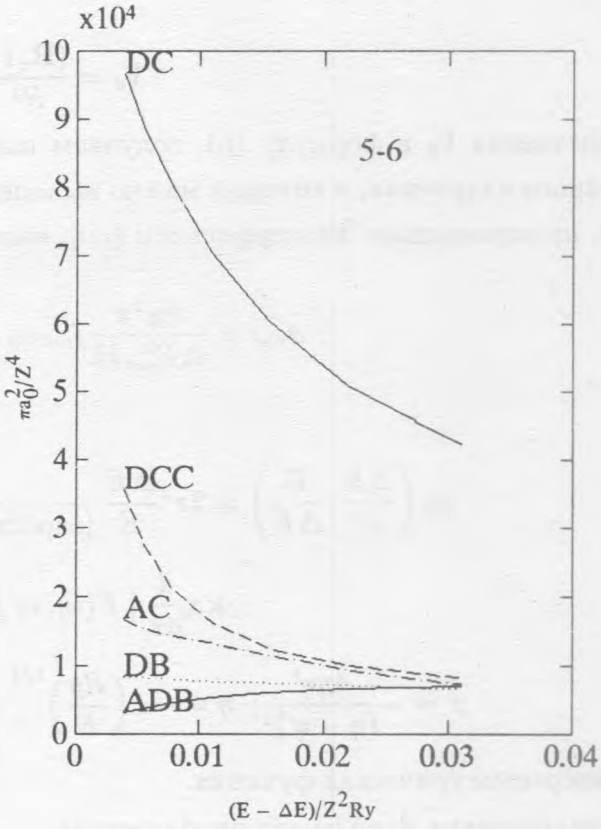


Рис. 1. *Сечение перехода 10-11. "BB" – формула Борна-Бете, "DB" – дипольная часть аналитической формулы борновского приближения из [2], "DC" – дипольное кулон-борновское приближение (см. (13)), "DCC" – регуляризованное дипольное кулон-борновское приближение (см. (16)).*

Рис. 2. *Сечение перехода 5-6. "DB" – дипольная часть аналитической формулы борновского приближения из [2], "DC" – дипольное кулон-борновское приближение (см. (13)), "DCC" – регуляризованное дипольное кулон-борновское приближение (см. (16)). "ADB" – сумма дипольных переходов в борновском приближении (программа "ATOM" [12]), "AC" – сумма дипольных переходов в кулон-борновском приближении (программа "ATOM" [12]).*

Рассмотрим асимптотическое поведение сечения в дипольном кулон-борновском приближении при больших энергиях. Используя асимптотическое разложение для гипергеометрической функции

$$\frac{d}{dx} \mid F(i\eta, i\eta', 1, x) \mid^{2\eta,\eta'\to 0} \frac{1}{\pi x^2} \frac{[\exp(2\pi\eta)-1][\exp(2\pi\eta')-1]}{\exp(2\pi\eta)} \ln(\sqrt{x}), \tag{14}$$

получаем

$$\sigma_{nn'} = \frac{Ry}{\Delta E} \frac{8\pi}{k^2} f_{nn'} \ln\left(\frac{\sqrt{E}+\sqrt{E-\Delta E}}{\sqrt{E}-\sqrt{E-\Delta E}}\right). \tag{15}$$

Таким образом, для полюсного потенциала дипольное кулон-борновское приближение при больших энергиях переходит в формулу Борна-Бете с $q_m = k + k'$. Для того, чтобы "регуляризовать" полюсной потенциал, необходимо положить $q_m = q_0$. Однако, если для всех энергий положить верхний предел интегрирования по переданным импульсам равным q_0, то при средних энергиях верхний предел станет меньше нижнего $(k - k')$. Поэтому в работе используется интерполяционная формула:

$$q_m = q_0 + (k + k' - q_0)\left(\frac{1}{1 + 2nn'(E - \Delta E)/Z^2 Ry}\right), \tag{16}$$

которая при больших энергиях стремится к величине $Zp_0\frac{\Delta n}{nn'}$, а вблизи порога – к величине $k + k'$.

Результаты и обсуждение.

На рис. 2 представлено сравнение сечения перехода 5-6 в дипольном кулон-борновском приближении с параметром q_m из формулы (16) (DCC) с суммой всех дипольных переходов 5-6, вычисленных в кулон-борновском приближении с помощью программы "АТОМ" [12] (AC). Там же приведены дипольная часть борновского приближения из работы [2] (DB) и сумма всех дипольных переходов в борновском приближении, вычисленных по программе "АТОМ" (ADB). Мы видим, что кулон-борновское приближение с соответствующим образом выбранным параметром регуляризации q_m (формула 16) при средних энергиях (в диапазоне, где имеется максимум борновского сечения) согласуется с прямыми расчетами кулон-борновского приближения и превышает борновское сечение более чем в два раза. Дипольное кулон-борновское приближение с полюсным потенциалом завышает результаты почти на порядок. В качестве иллюстрации на рис. 1 представлено также сечение перехода 10-11 в дипольном кулон-борновском приближении с регуляризацией (DCC). Видно, что в области средних энергий сечение с полюсным дипольным потенциалом завышает результаты более, чем на полпорядка.

Авторы выражают признательность Л. А. Вайнштейну и Л. П. Преснякову за обсуждение работы.

Эта работа была частично поддержана Российским Фондом фундаментальных исследований (заявка N 94-02-05371-а) и Международным Научным Фондом Сороса (грант N MQ 7000 от ISF).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Бейгман И. Л., Урнов А. М., Шевелько В. П., ЖЭТФ, **58**, 1825 (1970).

[2] Бейгман И. Л., Труды ФИАН, **119**, 130 (1980).

[3] Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А., Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М., Наука, 1973.

[4] Бейгман И. Л., Труды ФИАН, **119**, 143 (1980).

[5] Percival I. C. and Richards D., Adv. Atom. and Molec. Phys., **11**, 2 (1975).

[6] Seaton M. J., Proc. Phys. Soc., **79**, 1105 (1962).

[7] Huby R. and Newns H. C., Proc. Phys. Soc., **64A**, 619 (1951).

[8] Mullin C. L. and Guth E., Phys. Rev., **82**, 141 (1951).

[9] Тер-Мартиросян К. А., ЖЭТФ, **22**, 619 (1952).

[10] Гайлитис М. К., Атомные столкновения, Рига, 1963, с. 93.

[11] Adler K., Bohr A., Huus T., Mottelson M., and Winther A., Rev. Mod. Phys., **28**, 432 (1956).

[12] Вайнштейн Л. А., Шевелько В. П., Структура и характеристики ионов в плазме. М., Наука, 1986.

[13] Hostler L. and Pratt R. H., Phys. Rev. Lett., **10**, 469 (1969).

Поступила в редакцию 6 апреля 1994 г.