

ПЕРЕХОДЫ  $n_1 \rightarrow n_1'$  МЕЖДУ РИДБЕРГОВСКИМИ  
СОСТОЯНИЯМИ В БОРНОВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

И. Л. Бейтман, М. И. Сиркин

УДК 539.184.5

Получены аналитические выражения для матричных элементов и их простые аппроксимации. Даны формулы Борновских сечения перехода при столкновении с заряженными частицами.

Введение. Сечения переходов  $n_1 m \rightarrow n_1' m'$  атомов при столкновении с заряженными частицами в борновском приближении выражаются через квадрат матричного элемента  $\langle n_1 m | e^{i\vec{q}\vec{r}} | n_1' m' \rangle$ , где  $\vec{q}$  — переданный импульс. Если  $z$  достаточно велико, то естественно считать волновые функции водородоподобными. Использование численных методов связано с большими трудностями, так как выражения для матричных элементов содержат большие, примерно равные по абсолютной величине, но противоположные по знаку члены, число которых с ростом  $n$  быстро увеличивается. Аналитические методы развивались в работах /1-3/. В настоящей работе получены поправочные множители к выражениям /1/, обеспечивающие правильный предел при  $q \rightarrow 0$ , и простые аналитические аппроксимации для области  $q$ , дающей основной вклад в сечение перехода.

Сечения переходов в борновском приближении с дипольным потенциалом для перехода типа  $n_1 \rightarrow n_1 \pm 1$  рассматривались в работах /4-7/. В настоящей работе будут даны формулы для борновских сечений переходов типа  $n_1 \rightarrow n_1 \pm x$  ( $x > 1$ ) и дан рецепт для выбора параметра обрезания  $E_0$  в дипольном потенциале.

В дальнейшем всюду используются атомные единицы с единицей Ридберга для энергии.

I. Общие соотношения. Сечение  $n_1 0 \rightarrow n_1$  перехода, как из-

вестно /4/, записывается в виде:

$$\sigma = \sum_x \sigma_x(l_0, 1), \quad \frac{\sigma_x}{\pi a_0^2} = \frac{8}{\pi} \Pi_x(l_0, 1) T_x \quad (1)$$

$$\Pi_x(l_0, 1) = (2x + 1)(2l + 1) \begin{pmatrix} 1_0 & 1 & x \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_x = \int_{k-k'}^{k+k'} R_x^2(q) \frac{dq}{q}$$

$$R_x(q) = \int_0^{\infty} P_{nl_0}(r) P_{nl}(r) j_x(qr) dr, \quad |l_0 - l| \leq x \leq l_0 + 1,$$

где  $j_x(qr)$  - сферическая функция Бесселя,  $k$  и  $k'$  - начальный и конечный импульсы рассеянной частицы, соответственно. Рассмотрим ведущий член  $x = \Delta l$ .

Основные трудности связаны с радиальным интегралом  $R_x$ . В работе /1/ для  $R_x(q)$  были получены выражения:

$$R_{2m}(q) = \langle nl_0 | j_{2m} | nl \rangle \approx j_m(qn^2) J_m(qn^2), \quad (2)$$

$$R_{2m+1}(q) = \langle nl_0 | j_{2m+1} | nl \rangle \approx j_m(qn^2) J_{m+1}(qn^2).$$

Выражения (2) получены в пренебрежении разницей между  $l_0$  и  $l$  в обкладках матричных элементов, так что согласно (2)  $R_x(q)$  есть лишь нулевая фурье-компонента  $j_x(qr)$  или, другими словами, среднее значение  $j_x(qr)$  по состоянию  $|nl\rangle$ . По этой причине (2) не обеспечивают правильный предел при  $q \rightarrow 0$ , и, кроме того, неясно, начиная с каких  $n$  и  $l$  выражения (2) достаточно близки к точным квантовым асимптотикам.

Для вывода этих последних используем интегральное представление для  $J_x$ :

$$J_x(z) = \frac{z^x}{\Gamma(x+1)2^{x+1}} \int_0^1 (e^{izt} + e^{-izt})(1-t^2)^x dt. \quad (3)$$

Меняя в  $R_x(q)$  порядок интегрирования, найдем:

$$R_x(q) = \frac{2^{l_0+1+2}}{n^{l_0+2} n^{1+2} \Gamma(2l+2)} \left[ \frac{\Gamma(n+l_0+1)\Gamma(n+1+1)}{\Gamma(n-l_0)\Gamma(n-1)} \right]^{1/2} \times$$

$$\times \frac{\Gamma(2l+2)}{\Gamma(x+1)} \frac{q^x}{2^{x+1}} \sum_{k=0}^{2x} K_k \int_0^1 \frac{dt}{t} (1-t^2)^x \frac{\partial}{\partial q} \left[ (\lambda - iqt)^{\alpha_k + \alpha_k^* - \gamma} \times \right. \quad (4)$$

$$\times (\lambda - iqt - p)^{-\alpha - \alpha_k^*} F \left[ \alpha, \alpha_k^*, \gamma; \frac{p^2}{(\lambda - iqt - p)^2} \right] - (\lambda + iqt)^{\alpha + \alpha_k^* - \gamma} \times$$

$$\left. \times (\lambda + iqt - p)^{-\alpha - \alpha_k^*} F \left[ \alpha, \alpha_k^*, \gamma; \frac{p^2}{(\lambda + iqt - p)^2} \right] \right],$$

где  $\alpha = -n + l_0 - 1$ ,  $\alpha_k^* = -n + l_0 - 1 + k$  ( $k = 0, 1, 2, \dots, 2x$ ),  
 $p = 1/n$ ,  $\lambda = 2p$ ,  $\gamma = 2l + 2$ , причем  $l - l_0 = x$ . По поводу (4)  
 заметим лишь, что  $K_k$  есть результат применения рекуррентных со-  
 отношений для вырожденных гипергеометрических функций при ин-  
 тегрировании по  $t$ . Их явный вид здесь не приводится.

2. Дипольные переходы  $\Delta l = 1$ . В этом случае из (4) при  
 дополнительном условии, чтобы  $R_x(q)$  при  $q \rightarrow 0$  переходил в  
 точное выражение  $R_1^0(q) = 0,5 \varepsilon_1 q n^2$ ,  $\varepsilon_1 = [1 - (1/n)^2]^{1/2}$ ,  $l = l_{\max}$ ,  
 получаем с помощью асимптотического разложения для гипергеомет-  
 рических функций /8/

$$R_1(q) = \varepsilon_1 J_0(qn^2) J_1(qn^2). \quad (5)$$

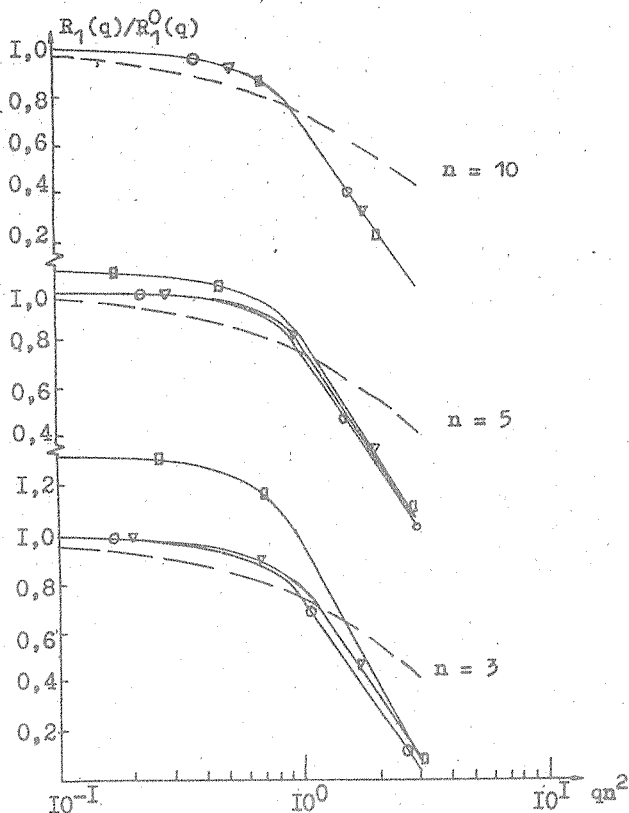
Сравнение (5) с точным расчетом показывает, что (5) верна не  
 только асимптотически при  $1 \ll n$ , но, в отличие от (2), являет-  
 ся практически точной при любых  $l$  для заданного  $n$  вплоть до  
 $qn^2 \sim 1 \div 3$ , т.е. фактически до границы по переданному импульсу.  
 На рис. 1 эта ситуация иллюстрируется для  $p = 1$  переходов.

Поскольку  $T_1$  логарифмически расходится при  $q \rightarrow 0$ , выделим  
 эту особенность с помощью аппроксимации

$$\tilde{R}_1(q) = C_1 \varepsilon_1 q n^2 \exp(-\frac{C_1}{2} q n^2). \quad (6)$$

Здесь  $C_1$  выбирается так, чтобы  $\tilde{R}_1$  совпадал с (5) при  $q \rightarrow 0$ , а  
 $\alpha_1$  так, чтобы

$$\int_0^{\infty} \frac{R_1^2(q) - \tilde{R}_1^2(q)}{q^2} dq = 0.$$



Р и с. 1. Радиальный интеграл  $R_1(q)/R_1^0(q)$ , отнесенный к своему пределу при  $q \rightarrow 0$ ,  $p$  -  $d$  переходы.  $\nabla$  - расчет по точным радиальным функциям,  $\circ$  - расчет по (5),  $---$  - аппроксимация (6),  $-\square-$  - квазиклассическое приближение (2)

Вычисленное таким образом  $\alpha_1$  оказывается равным 0,59, и, как и должно быть, совпадает с  $\alpha_1$ , полученным по точным ради-

альным функциям при  $l \ll n$ . Отсюда для дипольного сечения имеем:

$$\frac{\sigma_1}{\pi a_0^2 n^4} = 6 \frac{\max(l_0, 1)}{2l_0 + 1} \frac{\varepsilon_1^2}{\varepsilon} \ln \left( \frac{\gamma}{n^2} \frac{\varepsilon^{1/2}}{\Delta E} \right), \quad \gamma = 1,96. \quad (7)$$

Сопоставляя (7) с /5/ и /6/, находим для  $\gamma$  соответственно 1,67 и 1,36. Последнее значение связано с тем, что в /6/ радиус  $R_0$  обрезания дипольного потенциала полагался равным  $n^2$ , между тем как, согласно (7),  $R_0$  должен быть равен  $0,7n^2$ . Что касается поведения  $\alpha_1$  при различных  $l$  и данном  $n$ , то оказывается, что для  $l \ll n/2$   $\alpha_1$  меняется в пределах не более 5%, и даже при  $l \sim n - 1$  отклонения не превосходят 20-30%.

3. Мультипольные переходы  $\Delta l > 1$ . Поскольку

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{R_x(q)}{q^x} = \frac{1}{(2x + 1)!!} \langle n l - x | r^x | n l \rangle, \quad (8)$$

то при  $q \rightarrow 0$   $R_x(q) \rightarrow P_x \varepsilon_x (qn^2)^x$ , где  $P_x = \overline{r^x} |_{l=0}$ ,  $\varepsilon_x =$

$$= \left[ \prod_{i=0}^{x-1} \left[ 1 - \left( \frac{1-i}{n} \right)^2 \right] \right]^{1/2}. \text{ Учитывая (8), из (4) находим}$$

$$R_{2m}(q) = \varepsilon_{2m} j_m(qn^2) J_m(qn^2), \quad (9)$$

$$R_{2m+1}(q) = \varepsilon_{2m+1} j_m(qn^2) J_{m+1}(qn^2).$$

Качество формул (9) аналогично качеству формулы (5).

Переходя к сечениям, напишем:

$$T_x = \int_0^\infty \int_0^\infty dr dr' \rho(r) \rho(r') \int_0^\infty \frac{dq}{q^3} j_x(qr) j_x(qr'), \quad \rho(r) = P_{nl_0}(r) P_{nl}(r). \quad (10)$$

Если ввести  $\varphi(r, r') = \frac{\pi}{2} \frac{\Gamma(x-1)}{2^4 \Gamma(\frac{x}{2}) \Gamma(x + \frac{x}{2})} \frac{r^{x-1} r'^{x-1}}{(r+r')^{2x-2}}$

$$\times F \left[ x-1, x+1, 2x+2; \frac{4rr'}{(r+r')^2} \right], \text{ то } T_x = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} dr dr' \rho(r) \rho(r') r r'.$$

В основной области  $r \approx r' \varphi(r, r') \sim x^{-4}$ , зависимость  $T_x$  от  $n$  и  $l$  в существенной части есть  $n^4 \varepsilon_x^2$ . Поэтому

$$\frac{\sigma_x}{\pi a_0^2 n^4} = 8(2x+1) [2\max(1_0, 1) + 1] \begin{pmatrix} 1_0 & 1 & x \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\varepsilon_x^2}{6} \frac{K_x(n, 1)}{x^4}, \quad (\text{II})$$

где  $K_x(n, 1)$  - медленная функция всех аргументов. Для больших  $x$

$$\frac{\sigma_x}{\pi a_0^2 n^4} \approx \frac{32 \Gamma(21_0 + 1)}{2^{21_0+1} \Gamma^2(1_0 + 1)} \frac{\varepsilon_x^2}{6} \frac{K_x(n, 1)}{x^2}. \quad (\text{II}')$$

Для  $x = 2, 3, 4, 5$   $K_x$  равно 0,438, 0,422, 0,411, 0,405 соответственно при  $1 \ll n$ . Для  $1 \ll n/2$  эти значения меняются на несколько процентов, а заметные изменения получаются лишь при  $1 \sim n - 1$ .

Поступила в редакцию  
24 ноября 1982 г.

#### Л и т е р а т у р а

1. M. Matsuzawa, J. Phys. B., 12, 3743 (1979).
2. H. Regemorter, H. V. Du, M. Prud'homme, J. Phys. B., 12, 1053 (1979).
3. L. Cheng, H. Regemorter, J. Phys. B., 14, 4025 (1981).
4. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М., "Наука", 1979 г.
5. I. C. Percival, D. Richards, J. Phys. B., 10, 1497 (1977).
6. А. В. Виноградов, И. Ю. Скобелев и др., Тр. ФИАН, 119, 120 (1981).
7. D. R. Herrick, Mol. Phys., 35, 1211 (1978).
8. Г. Бейтман, А. Эрдейи, Высшие трансцендентные функции, тт. I, 2, М., "Наука", 1974 г.