УДК 539.182

Г. Я. Коренман
С. И. Роговая

ОБМЕННЫЙ МАТРИЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ В ТЕОРИИ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

Разработан метод вычисления борновских матричных элементов обменного типа от оператора кулоновского взаимодействия с водородоподобными волновыми функциями.

В ряде задач теории атомных столкновений, таких как неупругое рассеяние электрона, атомная перезарядка иона, захват отрицательно заряженного мезона атомом, встречаются обменные матричные элементы следующего вида:

$$M_{nlm}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{r}_1\,d\mathbf{r}_2\,\Phi^*_{nlm}(\mathbf{r}_2)\,e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}_1}\frac{1}{|\,\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\,|}\,e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_2}\,\varphi_{1s}(\mathbf{r}_1) \tag{1}$$

или, в импульсном представлении,

$$M_{nlm}=\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{d\mathbf{q}}{q^2}\,\Phi^*_{nlm}(\mathbf{k}+\mathbf{q})\,\varphi_{1s}(\mathbf{p}+\mathbf{q}). \tag{2}$$

Одночастичные волновые функции связанных состояний φ_{1s} и Φ_{nlm} во многих случаях можно считать водородоподобными, но соответствующими, вообще говоря, частицам с разными приведенными массами и эффективными зарядами. Пусть $\lambda=Z_1m_1$ и $\mu=Z_2m_2$ — соответствующие размерные параметры этих волновых функций, $\hbar=e=1$. Величины $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$ в задачах о рассеянии электрона на атоме и об атомном захвате мезона есть импульсы начальной и конечной частиц, а в задаче о перезарядке являются их линейными комбинациями (см., например, [1], гл. 16, § 10 и гл. 19, § 2).

Обычная техника разложения по парциальным волнам при вычислении матричного элемента (1) оказывается неудобной, поскольку возникающие при этом подынтегральные выражения в типичных случаях быстро осциллируют, а число парциальных волн, которые нужно учитывать, очень велико.

Для переходов в состояния с малыми значениями n при рассеянии электрона на атоме водорода ($\lambda=\mu$) матричный элемент (1) был вычислен аналитически в работе [2] с использованием импульсного представления и фейнмановской параметризации подынтегрального выражения. Аналогичные матричные элементы для перезарядки в состояния с малыми n сведены к однократному интегралу по параметру [3, 4].

В настоящей работе найдено аналитическое выражение для матричного элемента (1) при малых n и любых λ, μ, $\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}$. Для произвольных n выражение (1) сведено к однократному интегралу по параметру, что позволяет находить его простыми численными методами.

Введем вспомогательный интеграл

$$J(\varkappa, \lambda, \mathbf{k}, \mathbf{p}) = \frac{1}{16\pi^2}\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\exp[-\varkappa r_2 - \lambda r_1 - i\mathbf{p}\mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}\mathbf{r}_2] =$$

$$= \frac{1}{2\pi^2}\frac{d^2}{d\varkappa\, d\lambda}\int \frac{d\mathbf{q}}{q^2}\cdot\frac{1}{[(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2 + \varkappa^2][(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2 + \lambda^2]}. \tag{3}$$

Используя фейнмановскую параметризацию для двух последних сомножителей, можно проинтегрировать по $\mathbf{q}$:

$$J = \frac{1}{2}\frac{d^2}{d\varkappa\, d\lambda}\int\limits_0^1 \frac{dx}{[\alpha x + \beta(1-x)]\sqrt{-Q^2x^2 + (Q^2 + \varkappa^2 - \lambda^2)x + \lambda^2}}. \tag{4}$$

Здесь $\alpha = k^2 + \varkappa^2$, $\beta = p^2 + \lambda^2$, $\mathbf{Q} = \mathbf{k} - \mathbf{p}$. Интеграл по x вычисляется с помощью второй подстановки Эйлера и после ряда преобразований сводится к простому виду

$$J(\varkappa, \lambda, \mathbf{k}, \mathbf{p}) = \frac{d^2}{d\varkappa\, d\lambda}\left(\frac{1}{R}\operatorname{arctg}\frac{R}{A}\right), \tag{5}$$

где $\mathbf{R} = \alpha\mathbf{p} - \beta\mathbf{k}$, $A = \alpha\lambda + \beta\varkappa$. Используя найденное выражение для интеграла (3) и учитывая явный вид водородоподобных волновых функций, нетрудно получить

$$M_{1s} = \frac{2}{\pi^2}(\lambda\varkappa)^{3/2} J(\varkappa, \lambda, \mathbf{k}, \mathbf{p}), \tag{6}$$

$$M_{2s} = \frac{2}{\pi^2}(\lambda\varkappa)^{3/2}\left(1 + \varkappa\frac{d}{d\varkappa}\right) J(\varkappa, \lambda, \mathbf{k}, \mathbf{p}), \tag{7}$$

$$M_{2pm} = -i\frac{2}{\pi^2}\lambda^{3/2}\varkappa^{5/2}(\mathbf{e}_m^* \nabla_{\mathbf{k}}) J(\varkappa, \lambda, \mathbf{k}, \mathbf{p}). \tag{8}$$

Здесь $\mathbf{e}_m$ — циклические орты ($m=0, \pm 1$); параметр $\varkappa$ после дифференцирования следует положить равным μ/n.

Аналогичные формулы матричных элементов можно получить для любых конкретных значений n и l. Однако с ростом n окончательные выражения (после дифференцирования по параметрам) становятся очень сложными и неудобными в практических расчетах. Более того, в задачах, где асимптотический закон $\sigma_n \sim n^{-3}$ выполняется лишь при очень больших n (например в задаче об атомном захвате отрицательных мезонов), необходимо явно учитывать очень много конечных состояний. При этом для расчетов на ЭВМ нужна универсальная формула матричного элемента, общая для всех n и l.

Для получения такой формулы подставим в (2) явный вид волновой функции φ_{1s} в импульсном представлении и снова воспользуемся фейнмановской параметризацией, но применим ее к другим сомножителям:

$$\frac{1}{q^2[(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2 + \lambda^2]^2} = -\frac{d}{d\beta}\int\limits_0^1 \frac{dx}{[q^2 + 2\mathbf{q}\mathbf{p}\,x + \beta x]^2}. \tag{9}$$

Тогда после замены $\mathbf{q} = \mathbf{s} - \mathbf{p}x$ получим

$$M_{nlm} = \sqrt{2}\,\lambda^{5/2}\pi^{-3}\left(-\frac{d}{d\beta}\right)\int\limits_0^1 dx\, I(\beta, x), \tag{10}$$

$$I(\beta, x) = \int \frac{ds}{(s^2+\sigma^2)^2} \Phi^*_{nlm}(\mathbf{s}+\mathbf{\Delta}), \tag{11}$$

где $\sigma^2 = x(\beta - p^2x)$, $\mathbf{\Delta} = \mathbf{k} - \mathbf{p}x$.

Выражая $\Phi_{nlm}(\mathbf{s}+\mathbf{\Delta})$ через волновую функцию в координатном представлении, проинтегрируем по $\mathbf{s}$, а затем по направлениям радиус-вектора:

$$I(\beta, x) = i\pi\sqrt{2\pi}\,\sigma^{-1} Y^*_{lm}(\Omega_\Delta) \int\limits_0^\infty e^{-\sigma r} j_l(\Delta r) R_{nl}(r) r^2 dr. \tag{12}$$

Для вычисления остающегося радиального интеграла можно воспользоваться известным методом [5], выразив предварительно $j_l(\Delta r)$ и $R_{nl}(r)$ через вырожденные гипергеометрические функции. После преобразования к вещественной форме он сводится к следующему выражению:

$$\frac{\sigma \Delta^l (2\varkappa)^{l+3/2}}{(2l+1)!!} \sqrt{\frac{2(n+l)!}{n(n-l-1)!}} \left(-\frac{d}{d\gamma}\right) f_{nl}(\gamma), \tag{13}$$

где

$$f_{nl}(\gamma) = \frac{[(\gamma-\varkappa^2)^2 + 4\varkappa^2\Delta^2]^{(n-l-1)/2}}{[\gamma+\varkappa^2+2\varkappa\sqrt{\gamma-\Delta^2}]^n} F(-n+l+1;\ n+l+1;\ l+3/2;\ z), \tag{14}$$

$$z = \left[1 - \frac{\gamma-\varkappa^2}{\sqrt{(\gamma-\varkappa^2)^2+4\varkappa^2\Delta^2}}\right] \Big/ 2, \tag{15}$$

$$\gamma = \sigma^2 + \Delta^2 = k^2 + (\beta - 2\mathbf{kp})x. \tag{16}$$

Подставляя (12), (13) в (10) и используя формулы (5), (17), (35) из [6] для разложения $J_{lm}(\mathbf{k}-\mathbf{p}x)$, получим:

$$M_{nlm} = i^l C_{nl} \sum_{M\overline{M},\ L+\overline{L}=l} (-1)^L \langle \overline{L}\,\overline{M} L M | lm\rangle Y^*_{\overline{L}\overline{M}}(\Omega_\mathbf{k}) \times$$
$$\times Y^*_{LM}(\Omega_\mathbf{p})\, Q^{(L)}_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{p}), \tag{17}$$

где

$$C_{nl} = \frac{16(2k\varkappa)^l}{\pi(2l+1)!!} \left[\frac{\lambda^5\varkappa^3(n+l)!!}{n(n-l-1)!}\right]^{1/2}; \tag{18}$$

$$Q^{(L)}_{nl}(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = \left(\frac{p}{k}\right)^L \sqrt{\frac{(2l+1)!}{(2L+1)!\,(2\overline{L}+1)!}} \int\limits_0^1 dx\, x^{L+1} \frac{d^2 f_{nl}(\gamma, x)}{d\gamma^2}. \tag{19}$$

Таким образом, вычисление обменных матричных элементов типа (1) при произвольных значениях квантовых чисел сводится к однократным интегралам по параметру. Можно показать, что подынтегральная функция в (19) является в типичных случаях достаточно гладкой, что позволяет использовать в расчетах сравнительно простые численные методы, в отличие от вычислений с разложением по парциальным волнам. Применение полученных соотношений для обменного матричного элемента к процессу образования мезоатомов и соответствующие количественные результаты будут изложены отдельно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., 1969.
2. Corinaldesi E., Trainor L. «Nuov. Cim.», 1952, 9, 940.
3. Jackson J. D., Schiff H. «Phys. Rev.», 1953, 89, 359.
4. Mapleton R. A. «Phys. Rev.», 1961, 122, 528.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1963, § 1.
6. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. Л., 1975.

Поступила в редакцию
1.7 1977 г.
НИИЯФ