01;02

О критическом расстоянии при столкновении тяжелых ионов

© В.И. Матвеев, Д.У. Матрасулов, Х.Ю. Рахимов

Отдел теплофизики АН Узбекистана,
700135 Ташкент, Узбекистан

(Поступило в Редакцию 10 июня 1998 г.)

Получено аналитическое выражение для энергетического терма электрона путем решения дираковской двухцентровой задачи. Это выражение имеет правильные асимптотики в предельных случаях приближения Попова и нерелятивистской задачи.

Задача двух центров (т. е. задача о движении электрона в поле двух фиксированных кулоновских центров с зарядами Z_1 и Z_2, удаленных на расстояние R) является классической проблемой нерелятивистской квантовой механики и имеет приложения в теории химической связи, в физике μ-мезонных процессов и т. д. Ей посвящена обширная литература (см., например, [1–3]). Соответствующая задача для уравнения Дирака обладает рядом новых особенностей, затрудняющих ее решение: 1) переменные в уравнении Дирака с потенциалом

$$V = -\alpha\left(\frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{r_2}\right)$$

не разделяются ни в одной ортогональной системе координат; 2) при больших Z возникает падение на центр; 3) волновая функция является многокомпонентной, причем при $Z\alpha \approx 1$ все компоненты одного порядка.

Интерес к релятивистской задаче двух центров возник после указания в [4] на возможность проверки квантовой электродинамики в опытах по столкновению тяжелых ионов. Как известно [6,7], для зарядов $Z \approx Z_{\mathrm{cr}} = 170$ наинизший уровень энергии одноцентрового уравнения Дирака погружается в нижний континуум и при этом начинается спонтанное рождение позитронов. Поскольку ядра с $Z \approx 170$ не существуют, то в [4] предполагалось получить эти поля при столкновении тяжелых ионов. Для получения сечения рождения позитронов необходимо знать энергию квазимолекулярных состояний (Z_1, Z_2, e^-) как функцию расстояния, т. е. знать энергетический терм. В связи с этим были проведены расчеты энергетического терма и критического расстояния (т. е. расстояния, при котором терм погружается в нижний континуум), как численные [5], так и аналитические [6,7]. В работе [5], содержащей результаты обширных численных расчетов, уравнение Дирака для двухцентрового кулоновского потенциала было решено методом диагонализации дираковского гамильтониана по двухцентровому базису. Приближенные аналитические расчеты терма энергии и критического расстояния проведены в серии работ В.С. Попова [6–18]. Но полученные в этих работах формулы позволяют вычислить энергетический терм и критическое расстояние либо только численно, либо при выполнении условия

$$\frac{Z_1 + Z_2 - Z_{\mathrm{cr}}}{Z_{\mathrm{cr}}} \ll 1$$

(условие малой надкритичности) и для малых межцентровых расстояний.

В данной работе уравнение Дирака для задачи двух центров решается методом, аналогичным методу линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО), широко применяемым при решении нерелятивистской задачи двух центров [2]. Как известно, метод ЛКАО в применении к молекулярному иону и молекуле водорода позволяет в аналитическом виде вычислить терм энергии. Однако аналогичные расчеты для дираковского электрона до настоящего времени не проведены. Полученная в результате применения этого метода к релятивистской задаче двух центров аналитическая формула позволяет вычислить энергетический терм в широком диапазоне суммарных зарядов ядер и межцентровых расстояний.

Всюду далее использована система единиц $\hbar = c = m_e = 1$, R — расстояние между ядрами, r_1 и r_2 — расстояние от электрона до ядер, $Z_1 = Z_2 = Z$.

Движение релятивистского электрона в поле двух кулоновских центров описывается стационарном уравнением Дирака

$$H\Psi = E\Psi, \qquad (1)$$

где $H = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \beta + V$ — дираковский гамильтониан, $\boldsymbol{\alpha}$ и β — матрицы Дирака.

Мы будем решать (1) методом ЛКАО, выбирая волновую функцию в виде

$$\Psi = d_1\Psi_1 + d_2\Psi_2,$$

где Ψ_1 и Ψ_2 — волновые функции электрона, движущегося в поле первого и второго центров соответственно.

Как известно [2], симметрия задачи ($Z_1 = Z_2$), условия нормировки $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$, $\langle\Psi_j|\Psi_j\rangle = 1$ ($j = 1, 2$) и тот факт, что основное состояние не должно иметь узлов, дают, что

$$d_1 = d_2 = d = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}},$$

где $S = \langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$ — интеграл перекрытия.

Энергия электрона может быть вычислена как матричный элемент

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle, \tag{2}$$

где

$$\langle \Psi | = [\varphi \chi], \qquad |\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix}$$

— биспинор в стандартном представлении.

В качестве функций Ψ_1 и Ψ_2, как было упомянуто выше, мы возьмем релятивистские волновые функции водородоподобного атома [9] с эффективным зарядом $Q\alpha$

$$\varphi_j = A r_j^{\gamma-1} e^{-Q\alpha r_j} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = A g_j \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\chi_j = iAB r_j^{\gamma-1} e^{-Q\alpha r_j} \begin{bmatrix} \cos\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta \end{bmatrix} = iAB g_j \begin{bmatrix} \cos\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta \end{bmatrix},$$

где $g_j = r_r^{\gamma-1} e^{-Q\alpha r_j}$; $j = 1, 2$;

$$A \frac{(2Q\alpha)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}} (2Q\alpha)^{\gamma-1},$$

$$B = \frac{1-\gamma}{Q\alpha}, \quad \gamma = \sqrt{1 - Q^2\alpha^2}.$$

Подставляя эти волновые функции в (2), мы получаем для энергии выражение, содержащее пять интегралов, которые аналитически выражаются через полные $\Gamma(x)$ и неполные $\Gamma(x, y)$ гамма-функции [10]

$$E = \frac{2\pi A^2 b R^{2\gamma}}{1+S} \Big[Q\alpha (I_1 + I_2) + \frac{a\gamma}{2Q\alpha}(I_3 + I_4) - 2Z\alpha(I_2 + I_5) \Big], \tag{3}$$

$$S = 2\pi A^2 R^{2\gamma+1} b I_4,$$

где интегралы I_1–I_5 имеют вид

$$I_1 = \frac{1}{\alpha^{2\gamma}} 2\Gamma(2\gamma),$$

$$I_2 = \frac{1}{a^{2\gamma}} \Big[\Big(2 - \frac{a^2}{3(2\gamma-1)}\Big) \Gamma(2\gamma, a) + \Big(\frac{1}{3} + \frac{a}{3(2\gamma-1)}\Big) a^{2\gamma} e^{-a} \Big],$$

$$I_3 = \frac{1}{a^{2\gamma+1}} 4\gamma\Gamma(2\gamma),$$

$$I_4 = \frac{1}{a^{2\gamma+1}} \Big[\Big(4\gamma - \frac{2a^2\gamma}{3(2\gamma-1)}\Big) \Gamma(2\gamma, a) + \Big(2 + \frac{2a\gamma}{3(2\gamma-1)}\Big) a^{2\gamma} e^{-a} \Big],$$

$$I_5 = \frac{1}{a^{2\gamma+1}} \Big[(a-\gamma)\Gamma(2\gamma, 2a) + (a+\gamma)\Gamma(2\gamma)\frac{1}{2}(2a)^{2\gamma} e^{-2a} \Big],$$

$$a = 2Q\alpha R, \quad b = \frac{2}{1+\gamma}.$$

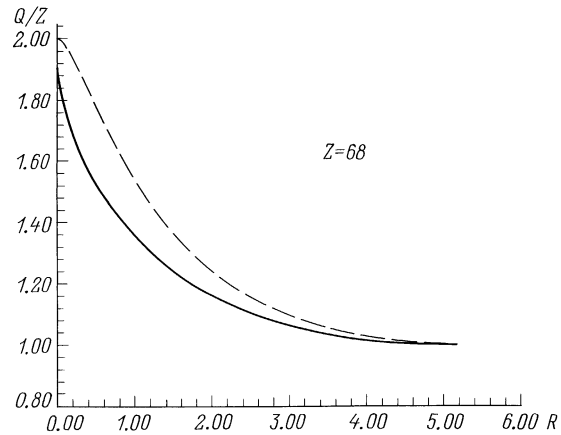

Рис. 1. Зависимость отношения Q/Z для $z = 68$: штриховая кривая — зависимость, полученная минимизацией выражения для нерелятивистского терма; сплошная кривая получена минимизацией выражения для релятивистского терма.

Таким образом, мы получили энергетический терм электрона в виде функции расстояния R, заряда Z и пробного заряда Q. При $Q\alpha \ll 1 (\gamma \simeq 1)$ формула (3) принимает вид

$$E = Q^2\alpha^2 F_1(a) + Q\alpha F_2(a), \tag{4}$$

где

$$F_1(a) = \frac{1}{2} \frac{1 + e^{-a}\Big(1 + a - \frac{a^2}{3}\Big)}{1 + e^{-a}(1 + a + \frac{a^2}{3})},$$

$$F_2(a) = -Z\alpha \frac{1 + 2e^{-a}(1+a) + \frac{1}{a} - \big(\frac{1}{a} + 1\big) e^{-2a}}{1 + e^{-a}\Big(1 + a + \frac{a^2}{3}\Big)}.$$

Формула (4) совпадает с выражением, полученным в нерелятивистском методе ЛКАО для молекулярного иона водорода [2].

Заряд Q является, вообще говоря, функцией R и Z, т.е.

$$Q = Q(R, Z),$$

причем, как известно [2],

$$Q|_{R\to 0} = 2Z, \tag{5}$$

$$Q|_{R\to\infty} = Z. \tag{6}$$

На рис. 1 приведена зависимость Q/Z от R для релятивистской и нерелятивистской систем $Er{-}Er$ с зарядом $Z = 68$, полученная численной минимизацией выражений (3) и (4) соответственно. Как видно, в предельных случаях $R \to \infty$ и $R \to 0$ эффективный заряд стремится к заряду изолированного и объединенного атомов соответственно.

На рис. 2 приведены релятивистские и нерелятивистские энергетические термы для заряда $Z = 68$. Видно, что релятивистские поправки становятся существенными при ма́лых R.

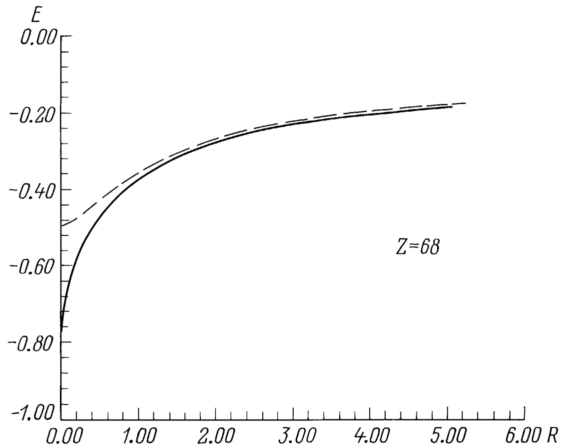

Рис. 2. Энергетический терм для $Z = 68$. Штриховая кривая — нерелятивистская система, сплошная — релятивистская система.

Вычисляя предел (3) при $R \to 0$ с учетом (4), находим (объединенный атом)

$$E(R \to 0) = \sqrt{1 - 4Z^2\alpha^2}.$$

и при $R \to \infty$ с учетом (5) имеем (изолированный атом)

$$E(R \to \infty) = \sqrt{1 - Z^2\alpha^2}.$$

Отметим, что в рассмотренных выше случаях суммарный заряд ядра меньше 137. Случай $Z_1 + Z_2 > 137$, вообще говоря, требует учета конечных размеров ядер, т. е. регуляризации кулоновского потенциала на малых расстояниях. Однако для $Z_1 + Z_2 > 137$ формула Попова (для критического расстояния, при котором происходит погружение уровня основного состояния в нижний континуум), полученная в [6] методом сшивки асимптотик на больших расстояниях от ядер, может быть получена непосредственно из (3) в тех же предположениях, что и в работе [6]. Действительно, учитывая, что в этом случае $\gamma = i\sqrt{4Z^2\alpha^2 - 1}$, $a \ll 1$ и $Q = 2Z$, из условия погружения в нижний континуум

$$E(R_{\mathrm{cr}}) = -1$$

имеем

$$[(1-\gamma)4^\gamma + 2\gamma]a^{2\gamma} = -4\gamma\Gamma(2\gamma + 1)$$

или

$$(2R)^{-2\gamma}\frac{4\gamma}{(1-\gamma^2)^\gamma((\gamma-1)4\gamma - 2\gamma)}\Gamma(2\gamma+1) = 1 \equiv e^{2\pi i}.$$

После несложных преобразований это выражение преобразуется к виду

$$R_{\mathrm{cr}}C\exp\Big(-\frac{\pi}{\sqrt{4Z^2\alpha^2 - 1}}\Big).$$

эта формула совпадает с формулой, полученной ранее в [8].

Таким образом, мы получили аналитическую формулу (3) для терма энергии релятивистского электрона, движущегося в поле двух неподвижных кулоновских центров. Эта формула справедлива в широком диапазоне суммарных зарядов ядер и межцентровых расстояний. В случае когда суммарный заряд ядер близок критическому ($Z_1 + Z_2 \sim 170$), из этой формулы получается хорошо известная формула Попова [6–8] для критического расстояния между ядрами, при котором уровень погружается в нижний континуум и происходит рождение электрон-позитронных пар.

Список литературы

[1] *Бете Г.* Квантовая механика простейших систем. М.: ОНТИ, 1935.
[2] *Слетэр Дж.* Электронная структура молекул. М.: Мир, 1965.
[3] *Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю.* Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.
[4] *Герштейн С.С., Зельдович Я.Б.* // ЖЭТФ. 1969. Т. 57. С. 654.
[5] *Müller B., Rafelski J. and Greiner W.* // Phys. Lett. 1973. Vol. 47B. P. 5.
[6] *Попов В.С.* Ядерная физика. 1973. Т. 17. С. 621.
[7] *Попов В.С.* Ядерная физика. 1974. Т. 19. С. 155.
[8] *Гриб А.А., Мамаев С.Г., Мостепаненко В.М.* Вакуумные квантовые эффекты в сильных полях. М.: Энергоатомиздат, 1988.
[9] *Бьеркен Дж.Д., Дрелл С.Д.* Релятивистская квантовая теория. Т. 1. М.: Наука, 1978.
[10] *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.