

ВОЗМУЩЕНИЕ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОБНЫХ ИОНОВ НЕЙТРАЛЬНЫМ АТОМОМ

*М. И. Чибисов**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 июня 2009 г.

Из-за вырождения уровней энергии волновая функция электрона в возбужденных состояниях атома водорода и водородоподобных ионов, возмущенных нейтральным атомом В, существенно отличается от волновой функции невозмущенного состояния. Возмущенная функция имеет большой и широкий максимум в области атома В, что объясняется многократностью столкновений электрона с атомом В, так как классические траектории в кулоновом поле замкнуты, а размер атома В мал по сравнению с размером возбужденной орбиты. Радиационные времена жизни возмущенных состояний оказываются существенно большими, чем у невозмущенных состояний. Очень интенсивно происходит также изменение орбитального момента L возбужденного электрона в столкновениях с атомом В в результате квантовой интерференции или перемешивания временных фаз адиабатических волновых функций. Сечения такого изменения момента оказываются на несколько порядков большими сечений, найденных в ранних исследованиях в приближении однократного столкновения электрона с атомом В.

PACS: 34.10.+x, 34.70.+e

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе исследуется возмущение атома водорода $H(NL)$ и водородоподобных ионов $A^*(NL)$, где $A^* = He^+, Li^{++}, \dots$, нейтральным атомом В, который не имеет отрицательного иона. Уровни энергии в кулоновом поле вырождены. Присутствие атома В внутри возбужденного состояния является малым возмущением, но стандартная теория возмущений не применима из-за вырождения уровней [1]. Хотя расщепление уровней энергии оказывается малым, волновые функции меняются существенно. Эта ситуация хорошо известна в случае возмущения кулоновских состояний слабым электрическим полем, когда волновыми функциями возмущенных состояний оказываются не зависящие от электрического поля кулоновские волновые функции в параболических координатах [1].

При возмущении нейтральным атомом волновые функции стационарных состояний отличаются как от сферических, так и от параболических ку-

лоновских функций. Для возмущенного атомом В состояния с главным квантовым числом N была найдена [2] волновая функция активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ в виде суммы произведений кулоновских сферических функций $\psi_{NLm}(\mathbf{r})\psi_{NLm}(\mathbf{R})$ (\mathbf{r} — координата электрона, \mathbf{R} — координата ядра атома В), и были исследованы ее свойства [3–5]. В работе [6] подробно исследовалось разложение кулоновских сферических волновых функций по кулоновским параболическим функциям и, наоборот, параболических функций по сферическим.

В данной работе рассматривается сумма произведений кулоновских параболических функций и обсуждается ее связь с суммой произведений сферических функций и с суммой произведений сферических функций [7–9]. Показано, что все эти суммы одинаковы и определяют одну и ту же функцию $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$.

Функция $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ имеет ярко выраженный максимум при $\mathbf{r} \approx \mathbf{R}$, причем ширина этого максимума не зависит от размера атома В и существенно больше его размера. Наличие максимума интерпретиру-

*E-mail: mchibisov@yahoo.com

ется свойствами классических траекторий электрона в кулоновом поле в присутствии атома В. Максимум функции $\Psi_N(\mathbf{r} \approx \mathbf{R})$ объясняется многократностью столкновений возбужденного электрона с возмущающим атомом В, которая обусловлена замкнутостью классических траекторий в кулоновском поле и малостью размера атома В по сравнению с размером кулоновской орбиты. Многократность столкновений соответствует адиабатическому приближению и указывает на неприменимость приближения однократного столкновения для расчета сечений тушения чисто кулоновских возбужденных состояний в столкновениях с медленными нейтральными атомами.

Методом ортогонализации построен полный адиабатический базис кулоновских параболических волновых функций. Найдено, что этот базис отличается от базиса ортогонализированных сферических функций, причем функции одного базиса равны линейным комбинациям функций другого базиса с теми же коэффициентами $C_{nLm}^{nn_1m}$, которые присутствуют в аналогичных соотношениях исходных кулоновских параболических и сферических функций.

Вычислены радиационные времена жизни $\tau_N(R)$ как функции межъядерного расстояния R кулоновских возбужденных состояний с главными квантовыми числами $N = 15-40$, возмущенных нейтральным атомом. Они оказываются на порядок больше времен жизни невозмущенных сферических и параболических состояний с этими же главными квантовыми числами.

Исследуются процессы изменения орбитального момента кулоновских возбужденных состояний, $L \rightarrow L'$, в столкновениях с нейтральными атомами В. Рассматриваются адиабатически «медленные» столкновения, когда относительная скорость v столкновения такова, что характерная частота изменения взаимодействия атома В с электроном возбужденного состояния атома $A^*(NL)$, равная отношению скорости v к характерному прицельному параметру ϱ , много меньше характерной частоты изменения энергетического множителя активного состояния, $\exp\left(-i \int_{-\infty}^t [\Delta E_N(R(t))/\hbar] dt\right)$. Поскольку характерный прицельный параметр примерно равен размеру орбиты возбужденного состояния, $\varrho \approx R_N = 2N^2/Z$ (Z — заряд ядра возбужденного атома), для $N \geq 10$ это приближение оказывается применимым вплоть до очень больших скоростей, что подтверждает проведенное численное решение системы адиабатических уравнений.

Как функция $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, так и ортогонализированные функции являются линейными комбинациями исходных кулоновских сферических функций. Поэтому если начальным состоянием является сферическая функция $\psi_{NLm}(\mathbf{r})$, то заселенными оказываются все адиабатические состояния. Тогда в пренебрежении переходами между адиабатическими состояниями, вероятность изменения начального момента определяется временным фазовым множителем $\exp\left(i \int_{-\infty}^{\infty} [\Delta E_N(R(t))/\hbar] dt\right)$, как и в теории резонансной перезарядки, разработанной Фирсовым [10]. Вычислено сечение изменения орбитального момента $L \rightarrow L'$, т. е. сечение тушения возбужденных состояний с $N = 10-40$ нейтральными атомами Хе со скоростями от 0.001 до 0.1 ат. ед.

Результаты исследования вырожденных состояний существенно отличаются от результатов исследования сложных атомов с большим числом электронов, энергии возбужденных состояний которых смещены относительно кулоновских энергий с квантовым дефектом $\Delta N \approx 1$ [11–13]. Однако столь относительно большими квантовыми дефектами обладают состояния с малыми орбитальными моментами $L = 0, 1, 2, 3, \dots$. При увеличении L квантовый дефект существенно уменьшается и также появляется проблема, аналогичная вырождению уровней.

В статье используется система атомных единиц, в которой $e = m_e = \hbar = 1$.

2. СУММЫ ПРОИЗВЕДЕНИЙ КУЛОНОВСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ В РАЗЛИЧНЫХ СИСТЕМАХ КООРДИНАТ

Функцию активного состояния можно выразить через суммы произведений кулоновских сферических $\psi_{NLm}(\mathbf{r})$ и параболических $F_{Nn_1m}(\mathbf{r})$ функций [2–4]:

$$\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{\sum_{Lm} \psi_{NLm}(\mathbf{r}) \psi_{NLm}^*(\mathbf{R})}{\sqrt{Q_N(R)}} = \frac{\sum_{n_1m} F_{Nn_1m}(\mathbf{r}) F_{Nn_1m}^*(\mathbf{R})}{\sqrt{Q_N(R)}}, \quad (1)$$

$$\sum_{Lm} \psi_{NLm}(\mathbf{r}) \psi_{NLm}^*(\mathbf{R}) = \sum_{n_1m} F_{Nn_1m}(\mathbf{r}) F_{Nn_1m}^*(\mathbf{R}), \quad (2)$$

$$Q_N(R) \equiv \sum_{Lm} \left| \psi_{NLm}(\mathbf{R}) \right|^2 \equiv \sum_{n_1m} \left| F_{Nn_1m}(\mathbf{R}) \right|^2. \quad (3)$$

Суммирование в этих выражениях ведется по состояниям с одним и тем же главным квантовым числом N , т. е. по состояниям с одной и той же энергией.

Функция $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ нормирована, поэтому выполняются равенства

$$\sum_{Lm} |J_{NLm}(\mathbf{R})|^2 = 1, \quad \sum_{n_1m} |I_{Nn_1m}(\mathbf{R})|^2 = 1, \quad (1a)$$

где

$$J_{NLm}(\mathbf{R}) \equiv \frac{\psi_{NLm}(\mathbf{R})}{\sqrt{Q_N(R)}}, \quad (16)$$

$$I_{Nn_1m}(\mathbf{R}) \equiv \frac{F_{Nn_1m}(\mathbf{R})}{\sqrt{Q_N(R)}},$$

а волновая функция активного состояния равна

$$\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_{Lm} J_{NLm}^*(\mathbf{R}) \psi_{NLm}(\mathbf{r}) = \sum_{n_1m} I_{Nn_1m}^*(\mathbf{R}) F_{Nn_1m}(\mathbf{r}). \quad (1b)$$

Докажем равенство друг другу сумм сферических и параболических функций, используя разложение параболических функций по сферическим и наоборот [6, 7]:

$$F_{Nn_1m}(\mathbf{r}) = \sum_{L=|m|}^{N-1} C_{NLm}^{Nn_1m} \psi_{NLm}(\mathbf{r}), \quad (4)$$

$$\psi_{NLm}(\mathbf{r}) = \sum_{n_1=0}^{N-|m|-1} C_{NLm}^{Nn_1m} F_{Nn_1m}(\mathbf{r}),$$

где

$$C_{NLm}^{Nn_1m} = \int \psi_{NLm}(\mathbf{r}) F_{Nn_1m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (4a)$$

Поскольку сферические и параболические волновые функции являются решениями одного и того же волнового уравнения, они удовлетворяют известному соотношению

$$(E_N - E_n) \int \psi_{nLm}(\mathbf{r}) F_{Nn_1m}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0, \quad (46)$$

из которого следует, что при разных главных квантовых числах $N \neq n$ (когда $E_N - E_n \neq 0$) параболические и сферические функции ортогональны друг другу при всех значениях других квантовых чисел. При равных же числах $N = n$ равна нулю разность энергий $E_N - E_n = 0$, и только в этом случае функции ψ могут быть не ортогональны функциям F . Поэтому соотношения (4) являются следствием возбуждения кулоновских уровней энергии.

Суммирование в суммах (4) ведется по орбитальному моменту L и по параболическому квантовому

числу n_1 при постоянных числах N и m [6, 7], и коэффициенты разложений (4) удовлетворяют соотношениям, которые можно лишь условно назвать ортонормировкой [6, 7],

$$\sum_{L=|m|}^{N-1} C_{NLm}^{Nn_1m} C_{NLm}^{Nn'_1m} = \delta_{n_1, n'_1}, \quad (5)$$

$$\sum_{n_1=0}^{N-|m|-1} C_{NLm}^{Nn_1m} C_{NL'm}^{Nn_1m} = \delta_{L, L'},$$

так как коэффициенты $C_{NLm}^{Nn_1m}$ отличны от нуля только при $N = n$ [6].

Подставляя в сумму произведений параболических волновых функций их разложения по сферическим функциям и меняя порядок суммирования, получаем

$$\sum_{n_1m} F_{Nn_1m}^*(\mathbf{r}) F_{Nn_1m}(\mathbf{R}) = \sum_{Lm} \psi_{NLm}^*(\mathbf{r}) \psi_{NLm}(\mathbf{R}) \sum_{n_1=0}^{N-|m|-1} |C_{NLm}^{Nn_1m}|^2 + \sum_m \sum_L \sum_{L' \neq L} \psi_{NLm}^*(\mathbf{r}) \psi_{NL'm}(\mathbf{R}) \times \sum_{n_1=0}^{N-|m|-1} C_{NLm}^{Nn_1m} C_{NL'm}^{Nn_1m}. \quad (6)$$

Сумма квадратов модулей коэффициентов $|C_{NLm}^{Nn_1m}|^2$ в (6) равна единице согласно условию нормировки (5) при $L = L'$, а сумма произведений коэффициентов $C_{NLm}^{Nn_1m}$ с различными моментами равна нулю согласно (5) вследствие ортогональности при $L \neq L'$ сферических функций [6, 7]. Следовательно, сумма произведений параболических функций равна сумме произведений сферических функций при любых значениях векторов \mathbf{r} и \mathbf{R} . При $\mathbf{r} = \mathbf{R}$ обе суммы равны нормировочному фактору $Q_N(R)$. Из этих равенств следует равенство разложений (1) волновой функции активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ по сферическим и по параболическим функциям.

Аналогичная сумма произведений кулоновских сфероидальных функций [7] также равна суммам кулоновских сферических и параболических функций, поскольку коэффициенты аналогичных формуле (4) разложений сфероидальных функций по сферическим и по параболическим функциям также удовлетворяют аналогичным ортонормировочным соотношениям (5).

Сумма произведений кулоновских сферических функций не зависит от направления оси z системы координат [2], так как ее зависимость от углов

определяется суммой произведений шаровых функций [1]

$$\sum_{m=-L}^L Y_{Lm}^*(\nu_r) Y_{Lm}(\nu_R) = \frac{2L+1}{4\pi} P_L(\cos \alpha), \quad (2a)$$

которая выражается через полином Лежандра $P_L(\cos \alpha)$, зависящий лишь от угла α между векторами \mathbf{r} и \mathbf{R} . Используя (2a), сумму (2) можно записать как однократную сумму только по моменту L ,

$$\sum_{Lm} \psi_{NLm}(\mathbf{r}) \psi_{NLm}(\mathbf{R}) = \sum_{L=0}^{N-1} f_{NL}(r) f_{NL}(R) \frac{2L+1}{4\pi} P_L(\cos \alpha), \quad (2б)$$

которая также зависит только от угла α .

Суммы произведений параболических и произведений сферидальных функций совпадают с суммой произведений сферических функций и поэтому также не зависят от направления оси z системы координат и зависят лишь от угла α между векторами \mathbf{r} и \mathbf{R} .

Объем возбужденных кулоновских состояний с большими числами N на много порядков превосходит объем нейтрального атома В. Если выбрать ось z системы координат проходящей через центр атома В (вдоль \mathbf{R}), то существенными для исследования окажутся лишь состояния с квантовым числом $m = 0$, так как и сферические, и параболические волновые функции кулоновских состояний с $m \neq 0$ равны нулю на оси z и их взаимодействие с атомом В значительно слабее. В этой системе координат функция активного состояния (1в) выражается через сферические функции с равной нулю проекцией момента ($m = 0$), которые равны

$$J_{NL0}(R) \equiv \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} \frac{f_{NL}(R)}{\sqrt{Q_N(R)}}, \quad (7)$$

где $f_{NL}(R)$ — сферическая радиальная функция [1], а от шаровой функции $Y_{Lm}(\theta, \varphi)$ при $m = 0$ и $\theta = 0$ в выражении (7) остается только нормировочный множитель $\sqrt{(2L+1)/4\pi}$. С помощью этого представления находим пределы функций $J_{NL0}(R)$ при $R = 0$ и $R \rightarrow \infty$:

$$\lim_{R \rightarrow 0} (J_{NL0}(R)) = \frac{(2ZR/N)^L}{(2L)!} \sqrt{\frac{(N+L)!}{N(2L+1)(N-L-1)!}}, \quad (7a)$$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} (J_{NL0}(R)) = (-1)^{(N-L-1)} \sqrt{\frac{(2L+1)((N-1)!)^2}{(N+L)!(N-L-1)!}}, \quad (7б)$$

которые необходимы для проводимых ниже расчетов.

В работах [2, 3] для сумм $Q_N(R)$ в системе координат с осью z , параллельной вектору \mathbf{R} , были найдены выражения, зависящие от сферических волновых функций только S -состояний ($L = m = 0$):

$$Q_N(R) \equiv \sum_{L=0}^{N-1} |\psi_{NL0}(R)|^2 = \left(\frac{d\phi_{N0}(R)}{dR} \right)^2 + 2 \left(E_N + \frac{Z}{R} \right) \phi_{N0}^2(R) = 2Z \int_R^\infty \psi_{N00}^2(r) dr, \quad (8)$$

где

$$\phi_{N0}(R) = R \psi_{N0}(R) = \frac{(Z/N)^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \times R \exp\left(-\frac{ZR}{N}\right) {}_1F_1\left(-N+1, 2; \frac{2ZR}{N}\right), \quad (9)$$

а ${}_1F_1(\dots)$ — вырожденная гипергеометрическая функция [14].

В системе координат с осью z , параллельной вектору \mathbf{R} , выражение (1в) для функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ с помощью суммы произведений кулоновских параболических функций также существенно упрощается. При $m = 0$ получаем

$$I_{Nn_10}(\mathbf{R}) \equiv \frac{F_{Nn_10}(\mathbf{R})}{\sqrt{Q_N(R)}} = \frac{{}_1F_1(-n_1, 1; 2ZR/N)}{\sqrt{\left| \sum_{n_1=0}^{N-1} \left| {}_1F_1(-n_1, 1; 2ZR/N) \right|^2 \right|}}, \quad (10)$$

$$F_{Nn_10}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi N^4}} \times \exp\left(-\frac{Zr}{N}\right) {}_1F_1\left(-n_1, 1; \frac{2Zr}{N}\right), \quad (11)$$

так как параболические переменные $\{\mu, \nu\} = r(1 \pm \cos \theta)$ на полуоси $z > 0$ равны $\mu = 2r, \nu = 0$, а числа n_1 и n_2 меняются в пределах $0 \leq n_1 \leq N-1, N-1 \geq n_2 \geq 0$. Сумма $Q_N(R)$ в этом случае равна

$$Q_N(R) = \frac{Z^3}{\pi N^4} \exp\left(-\frac{2ZR}{N}\right) \times \left| \sum_{n_1=0}^{N-1} \left| {}_1F_1\left(-n_1, 1; \frac{2ZR}{N}\right) \right|^2 \right|. \quad (12)$$

Выражения (8) и (12) формально различны, но численно должны совпадать, что следует из формулы (3). Например, пределы этих выражений одинаковы и равны

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow 0} (Q_N(R)) &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{N} \right)^3, \\ \lim_{R \rightarrow \infty} (Q_N(R)) &= \frac{Z^3}{\pi N^4} \left(\frac{(2ZR/N)^{(N-1)}}{(N-1)!} \right)^2 \times \\ &\times \exp \left(-\frac{2ZR}{N} \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Численный расчет, проведенный для $3 \leq N \leq 40$, подтверждает совпадение выражений (8) и (12) при любом межъядерном расстоянии $0 \leq R \leq \infty$. Для малых значений N это совпадение легко найти аналитически, без численного счета.

Используя (13), находим пределы параболических функций $I_{Nn_10}(R)$:

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow 0} (I_{Nn_10}(R)) &= \frac{1}{\sqrt{N}}, \\ \lim_{R \rightarrow \infty} (I_{Nn_10}(R)) &= \\ &= (-1)^{n_1} \frac{(N-1)!}{n_1!} \left(\frac{2ZR}{N} \right)^{n_1-(N-1)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Из (14) следует, что при больших расстояниях R абсолютная величина только одного члена $I_{Nn_10}(R)$ с $n_1 = N - 1$ стремится к единице, а все другие стремятся к нулю,

$$\begin{aligned} I_{N,n_1=N-1,m=0}(R) &\xrightarrow{R \rightarrow \infty} (-1)^{N-1}, \\ I_{N,n_1 < N-1,m=0}(R) &\xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0, \end{aligned} \quad (15)$$

и, следовательно, предел волновой функции активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ при $R \gg R_N$ равен параболической функции,

$$\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \approx (-1)^{N-1} F_{N,n_1=N-1,m=0}(\mathbf{r}), \quad (16)$$

с максимальным дипольным моментом и с центром заряда электрона, смещенным в сторону возмущающего атома В.

Асимптотический предел (16) функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ был найден в работе [3] при исследовании суммы произведений сферических функций. Асимптотические при $R \rightarrow \infty$ пределы всех сферических функций с одинаковыми главными квантовыми числами N одинаковы и равны R^{N-1} . Поэтому асимптотики всех членов суммы, определяющей функцию Ψ_N , не зависят от R , см. формулу (76). В работе [3] проводилось суммирование по орбитальному моменту.

2.1.1. Полные базисы адиабатических кулоновских функций

Построим два полных базиса рассматриваемых адиабатических функций для данного главного квантового числа N на основе кулоновских параболических и сферических волновых функций. Используем для этого найденный ранее способ построения таких базисов [2] с использованием системы координат, ось z которой направлена по вектору межъядерного расстояния \mathbf{R} . В этом случае необходимо ортогонализировать лишь функции с равной нулю проекцией орбитального момента, $m = 0$:

$$\Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = F_{Nn_10}(\mathbf{r}) - I_{Nn_10}(\mathbf{R}) \times [\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + F_{ort}(\mathbf{r})], \quad (17)$$

$$\Psi_{NL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi_{NL0}(\mathbf{r}) - J_{NL0}(\mathbf{R}) \times [\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + F_{ort}(\mathbf{r})], \quad (18)$$

так как кулоновские функции с $m \neq 0$ равны нулю на оси z . Отметим также, что функции (17), (18) равны нулю при $\mathbf{r} = \mathbf{R}$. Действительно, в этой точке функция активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ равна $\sqrt{Q_N(R)}$, и после ее умножения на присутствующие в выражениях (17), (18) функции $I_{Nn_10}(\mathbf{R})$ или $J_{NL0}(\mathbf{R})$ получаем слагаемые, равные первым слагаемым в правых частях формул (17), (18), но с отрицательными знаками. Ортогонализирующая же функция F_{ort} равна нулю на всей оси z , см. ниже. Следовательно, изменение энергии состояний (17), (18), вызванное возмущением атома В, является малой величиной и ее можно полагать равной энергии кулоновского состояния с данным числом N .

Для дальнейшего удобно выбрать ортогонализирующую функцию $F_{ort}(\mathbf{r})$ одинаковой в сферическом и параболическом базисах. Таковыми являются две функции с максимальной для данного N абсолютной величиной проекции момента $m_{\pm} = \pm(n-1)$:

$$\begin{aligned} F_{ort}(\mathbf{r}) &= \psi_{N,L=m=N-1}(\mathbf{r}) = F_{N,n_1=0,m=N-1}(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{Z\sqrt{2Z}}{N!N} \exp \left(-\frac{Zr}{N} \right) \left(\frac{Zr}{N} \right)^{N-1} \times \\ &\times (\sin \theta)^{N-1} \frac{\exp(im\varphi)}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned} \quad (19)$$

Функция $F_{ort}(\mathbf{r})$ ортогональна всем изначальным сферическим $\psi_{NL0}(\mathbf{r})$ и параболическим $F_{Nn_10}(\mathbf{r})$ функциям с равным нулю квантовым числом $m = 0$ и она равна нулю на всей межъядерной оси R , так как $\sin \theta = 0$ при $\theta = 0, \pi$.

Ортогонализированные сферические функции (18) ортогональны функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ и ортогональны друг другу [2]. Ортогонализированные параболические функции (17) построены по той же схеме, что и сферические функции (18), и поэтому также ортогональны функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ и ортогональны друг другу.

Кроме функций (17), (18) ортонормированные базисы содержат еще функцию активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$. Имеем полные ортонормированные сферический $\{\Psi_{NL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})\}$ [2–4] и параболический $\{F_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}); \Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})\}$ базисы. Число ортогонализированных функций (17), (18) в каждом базисе равно N , а в сумме с функцией активного состояния равно $N + 1$.

Полные адиабатические базисы содержат еще функции с отличными от нуля проекциями момента: $F_{N,n_1,m \neq 0}(\mathbf{r})$ и $\psi_{N,L,m \neq 0}(\mathbf{r})$, которые, за исключением ортогонализирующей функции $F_{ort}(\mathbf{r})$, ортогональны всем функциям ортонормированных базисов. Функция $F_{ort}(\mathbf{r})$ не ортогональна функциям (17), (18) и не принадлежит ортогонализированным параболическому и сферическому базисам. Поэтому число функций в полных базисах равно N^2 , как и должно быть без учета спина.

Поделив на $\sqrt{Q_N(R)}$ взаимные разложения волновых функций (4) при $\mathbf{r} = \mathbf{R}$, получим взаимные разложения функций $J_{NLm}(\mathbf{R})$ по функциям $I_{Nn_1m}(\mathbf{R})$ и наоборот:

$$\begin{aligned} J_{NLm}(\mathbf{R}) &= \sum_{n_1=0}^{N-|m|-1} C_{NLm}^{Nn_1m} I_{Nn_1m}(\mathbf{R}), \\ I_{Nn_1m}(\mathbf{R}) &= \sum_{L=|m|}^{N-1} C_{NLm}^{Nn_1m} J_{NLm}(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (20)$$

Из этого разложения следует, что ортогонализированные параболические (17) и ортогонализированные сферические (18) функции связаны между собой тем же соотношением,

$$\begin{aligned} \Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \sum_{L=0}^{N-1} C_{NL0}^{Nn_10} \Psi_{NL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \\ \Psi_{NL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \sum_{n_1=0}^{N-1} C_{NL0}^{Nn_10} \Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (21)$$

что и изначальные параболические и сферические кулоновские функции, см. формулу (4). Коэффициенты $C_{NLm}^{Nn_1m}$ в формулах (21) те же, что и в формулах (4).

Асимптотические пределы ортогонализированных параболических функций (21) равны

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} \Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &\approx \\ &\approx \begin{cases} (-1)^N F_{ort}(\mathbf{r}), & n_1 = N - 1, \\ F_{Nn_10}(\mathbf{r}), & n_1 < N - 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (22)$$

Поскольку ортогонализирующая функция $F_{ort}(\mathbf{r})$ ортогональна исходным параболическим функциям, из асимптотики (22) следует, что построенная ортонормированная параболическая система (17) остается ортонормированной системой и при $R = \infty$.

Поскольку согласно формуле (16) пределом функции активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ является параболическая функция с максимальным квантовым числом $n_1 = N - 1$, из формул (16) и (22) следует, что для каждого главного квантового числа N асимптотическим при $R \rightarrow \infty$ пределом вновь построенного базиса является полный базис исходных кулоновских параболических функций. Ортонормированный сферический базис (18) переходит в базис исходных сферических функций в пределе $R \rightarrow 0$ [3].

Таким образом, в рассматриваемом приближении, система $A^*(NLm) + B$, как и возбужденный водородоподобный атом $A^*(NLm)$, обладает ортонормированными сферическим и параболическим базисами. Если система $A^*(NLm) + B$ не подвержена действию электрического поля, то для ее описания можно использовать и сферический, и параболический базисы. Если же электрическое поле существует, то необходимо использовать параболический базис.

Разложения функций в ортогонализированных сферическом и параболическом базисах по исходным кулоновским функциям имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{NL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \sum_{L'=0}^{N-1} c_{NLL'}^{m=0}(R) \psi_{NL'0}(\mathbf{r}), \\ c_{NLL'}^{m=0}(R) &= \delta_{L,L'} - J_{NL0}(\mathbf{R}) J_{NL'0}^*(\mathbf{R}), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \sum_{n'_1=0}^{N-1} c_{Nn_1n'_1}^{m=0}(R) F_{Nn'_10}(\mathbf{r}), \\ c_{Nn_1n'_1}^{m=0}(R) &= \delta_{n_1,n'_1} - I_{Nn_10}(\mathbf{R}) I_{Nn'_10}(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (24)$$

Эти разложения нужны для вычисления сечений L -перемешивания.

Из формул (1в), (7), (10) следует, что коэффициенты разложения функции активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ по исходным сферическим и параболическим функциям равны соответственно $J_{NL0}(\mathbf{R})$ и $I_{Nn_10}(\mathbf{R})$.

2.1. Свойства функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$

На рис. 1 показана функция $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, вычисленная с помощью сумм сферических и параболических функций, а также с помощью квадратичного выражения (8) для нормировочного фактора $Q_N(R)$. Все результаты совпадают. На рис. 2 показаны четыре функции Ψ_N для $N = 30$ и различных R . Видно, что величины максимумов уменьшаются при приближении атома В к границе области классически разрешенного движения. Были просмотрены также зависимости функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ вдоль направления, перпендикулярного оси z , и было найдено, что ширины максимумов вдоль этого направления близки к ширинам максимумов вдоль оси z .

Из рис. 1, 2 следует также, что функция $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ существенно отличается от исходных сферических и параболических функций.

Максимумы функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ слегка сдвинуты относительно точки $r = R$, так как функция $\sqrt{Q_N(R)}$ при изменении R меняется сглаженными ступеньками. Положение максимума функции Ψ_N совпадает с точкой $r = R$ только при расстояниях R , при которых производная функции $\sqrt{Q_N(R)}$ равна нулю.

На рис. 3 показаны логарифмические производные функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ при $\mathbf{r} = \mathbf{R}$ для различных N [3]:

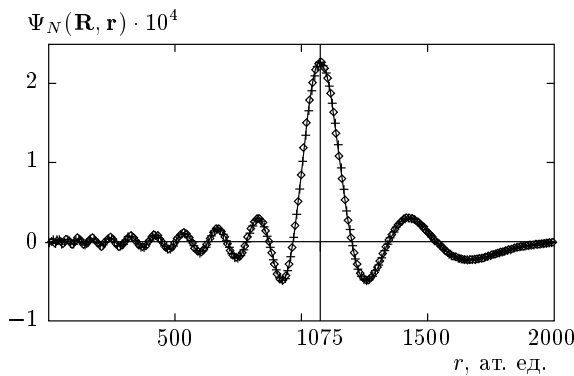


Рис. 1. Волновая функция активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ с параметрами $Z = 1$, $N = 30$, $R = 1075$ ат. ед. как функция расстояния r вдоль оси, проходящей через кулоновский центр и через ядро возмущающего атома В, вычисленная с помощью сумм сферических и параболических функций, а также с помощью квадратичного выражения, содержащего сферическую волновую функцию с нулевым орбитальным моментом $L = 0$ [2]

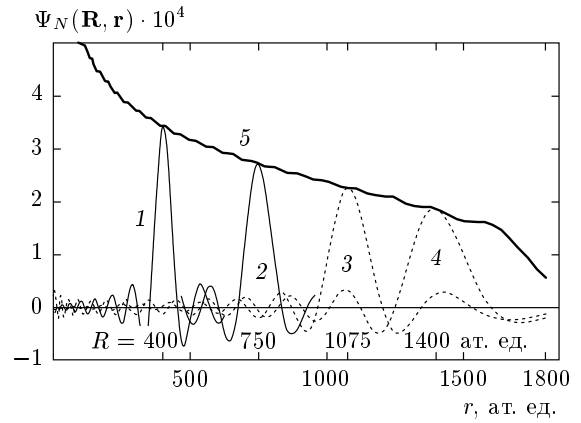


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для четырех расстояний R [ат. ед.] = 400 (1), 750 (2), 1075 (3), 1400 (4) и в сравнении с зависимостью от R корня $\sqrt{Q_N(R)}$ (кривая 5)

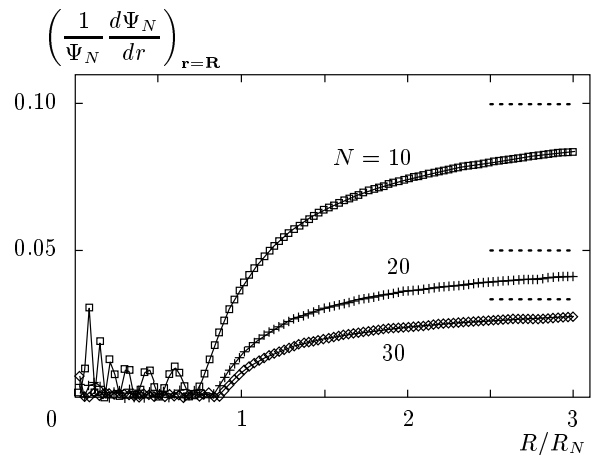


Рис. 3. Логарифмическая производная функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ при $\mathbf{r} = \mathbf{R}$, формула (25), для трех значений главного квантового числа

$$\frac{1}{\Psi_N(\mathbf{r} = \mathbf{R})} \left. \frac{d\Psi_N(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{dr} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}} = \sum_{Lm} \frac{\psi_{NLm}^*(\mathbf{R})}{Q_N(R)} \frac{d\psi_{NLm}(\mathbf{R})}{dR} = -\frac{Z\phi_{N0}^2(R)}{R^2 Q_N(R)}. \quad (25)$$

Из рис. 3 видно, что в области классически разрешенного движения эти производные на порядок меньше асимптотического предела Z/N , показанного на рисунке пунктирными прямыми.

2.1.2. Интерпретация факта наличия максимумов

Рассмотрим возбужденный электрон как классическую частицу, движущуюся в кулоновском поле ядра. Известно [15], что классические траектории в кулоновском поле (и в объемном осцилляторе) являются замкнутыми. В системе $A^*(NLm) + B$ возбужденный электрон движется в суммарном поле, состоящем из кулоновского поля и поля атома В. В таком поле траектории электрона, строго говоря, не замкнуты.

Если, двигаясь по какой-то траектории, классический электрон сталкивается с атомом В, то он меняет направление своей траектории. При этом меняется направление орбитального момента и вектора Рунге – Ленца. Однако при любом угле рассеяния (как при малом, так и при большом) новая траектория пересекается, как и начальная, с атомом В, и, совершив оборот вокруг кулоновского центра, электрон снова столкнется с атомом В. Это обусловлено тем, что размер атома В очень мал по сравнению с размером кулоновской орбиты. Действительно, удалившись после первого столкновения от атома на расстояние, большее размера атома, электрон снова начинает двигаться в кулоновском поле, и его новая траектория снова будет замкнутой. Поэтому, совершив новый оборот в кулоновском поле, электрон снова пришел бы на ту часть траектории, которая начинается после его первого столкновения с атомом В, если бы не было атома В. В присутствии атома В электрон и второй раз столкнется с атомом В и имеет возможность сталкиваться с ним еще.

На рис. 4 показан результат численного расчета классической траектории электрона в суммарном поле: кулоновское поле + поле атома Хе, которое принималось равным

$$V_{Xe}(r_{B-e}) = \exp(-ar_{B-e}^2) - \alpha_{Xe}/2(r_{B-e} + 5.0)^4$$

с параметром $a = 0.1$ и поляризуемостью атома ксенона $\alpha_{Xe} = 27.06$ ат. ед., а r_{B-e} — расстояние между электроном и атомом В. Решалась система классических уравнений

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F_x(x, y)}{m_e}, \quad \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{F_y(x, y)}{m_e},$$

где F_x и F_y — компоненты полной силы, действующей на электрон вдоль осей x и y со стороны кулоновского центра и атома В. Затем траектория изображалась как график зависимости $y(x)$. Энергия электрона была выбрана равной кулоновской энергии $E_N = -Z^2/2N^2$ в состоянии $N = 30$ ($Z = 1$),

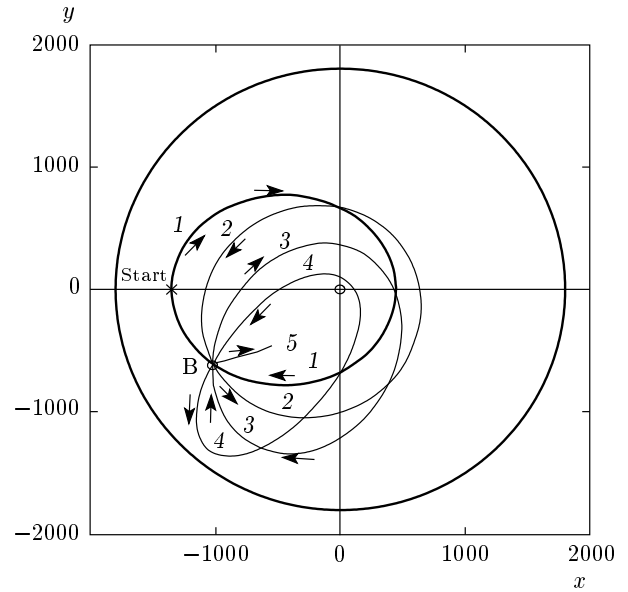


Рис. 4. Классические траектории электрона в суммарном поле, состоящем из кулоновского поля и поля атома Хе (см. текст)

а начальный момент электрона был равен $L_1 = 26$. Круг, изображенный на рис. 4 жирной линией, является границей области классически разрешенного движения, а жирный эллипс — траектория электрона в отсутствие атома В. После введения атома В электрон после первого столкновения с ним переходит на траекторию 2, после второго столкновения — на траекторию 3 и т.д. При каждом столкновении с атомом В электрон рассеивается на угол 180° , и поэтому на траекториях 1 и 3 электрон вращается по часовой стрелке, а на траекториях 2, 4 и 5 — против часовой стрелки. При этом после столкновений менялись абсолютная величина момента и его знак: $(L_1 = +26.0) \rightarrow (L_2 = -28.4) \rightarrow (L_3 = +23.8) \rightarrow (L_4 = -14.9) \rightarrow (L_5 = -9.5)$.

Многочисленность столкновений является причиной увеличения вероятности пребывания электрона вблизи атома В. Она соответствует адиабатическому приближению для описания системы $A^*(NLm) + B$, применимому при скорости движения атома В меньшей скорости возбужденного электрона, которая пропорциональна N^{-1} .

Картина траекторий существенно меняется при изменении положения атома В, но при любом его положении всегда находятся траектории, с которых начинаются многократные столкновения. При уменьшении расстояния между атомом В и кулоновским центром число многократных столкновений увеличивается в согласии с рис. 2, демонстрирующем уве-

личение амплитуды функции $\Psi_N(\mathbf{r} = \mathbf{R})$ при уменьшении R .

Если атом В находится в подбарьерной области $R \geq R_N$, то классическое рассеяние электрона на атоме В невозможно. Поэтому функция $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ не имеет максимума в этой области, что согласуется с рис. 2.

2.1.3. Дипольные моменты

Электрон в возбужденных кулоновских состояниях, возмущенных нейтральным атомом, обладает дипольными моментами, которые в работах [2–5] исследовались только в случае представления функции Ψ_N в виде суммы произведения кулоновских сферических функций. Компонента $D_z(N, R)$ дипольного момента в активном состоянии, волновая функция которого записана в виде суммы произведений кулоновских параболических функций, равна

$$D_z(N, R) = - \int r \cos \theta |\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \sum_{n_1=0}^{N-1} I_{Nn_10}^2(R) d_{Nn_10}^{(z)}, \quad (26)$$

где $d_{Nn_1m}^{(z)} = -3N(n_1 - n_2)/2Z$ — матричный элемент, причем в формуле (26) он присутствует при $m = 0$.

Дипольный момент электрона в состоянии $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ имеет только z -компоненту, а x - и y -компоненты равны нулю. Этот дипольный момент как функция межъядерного расстояния R численно совпадает с дипольным моментом активного состояния, вычисленным ранее [4, 5] с помощью функции $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, записанной в виде суммы произведений кулоновских сферических функций. Предел этого дипольного момента при $R \rightarrow \infty$ стремится к максимальному для данного главного квантового числа N дипольному моменту $3N(N - 1)/2Z$.

Дипольные моменты ортогонализированных состояний (17) равны:

$$D_z(N, n_1, R) = - \int r \cos \theta |\Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = d_{Nn_10}^{(z)} [1 - 2I_{Nn_10}^2(R)] + I_{Nn_10}^2(R) \sum_{n'_1=0}^{N-1} I_{Nn'_10}^2(R) d_{Nn'_10}^{(z)}, \quad (27)$$

а их асимптотические пределы

$$D_z(N, n_1, R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \begin{cases} d_{Nn_10}^{(z)}, & n_1 \leq N - 2, \\ 0, & n_1 = N - 1 \end{cases} \quad (28)$$

равны дипольным моментам электрона в соответствующих параболических состояниях, волновые функции которых являются пределами функций (17). Предел дипольного момента (28) при $n_1 = N - 1$ равен нулю, так как предел соответствующей волновой функции (17) равен ортогонализирующей функции $F_{ort}(\mathbf{r})$.

Зависимости от R дипольных моментов электрона в ортогонализированных параболических состояниях, формула (27), отличаются от зависимостей дипольных моментов в ортогонализированных сферических состояниях [2–5]. Численный расчет показал, что асимптотические пределы (28) дипольных моментов (27) достигаются при расстояниях R , примерно равных размеру орбиты $R = 2N^2/Z$, и даже при меньших расстояниях.

3. РАДИАЦИОННОЕ ВРЕМЯ ЖИЗНИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА И ВОДОРОДОПОДОВНЫХ ИОНОВ, ВОЗМУЩЕННЫХ НЕЙТРАЛЬНЫМ АТОМОМ

Вычислим вероятность излучения фотона электроном, находящимся в активном состоянии с волновой функцией $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ в присутствии возмущающего атома В, при переходе в любое более низкое состояние с главным квантовым числом n ($n < N$). Интенсивности радиационных переходов определяются матричными элементами дипольных переходов. Формула (1) весьма корректно определяет функцию Ψ_N вне атома В, а внутри атома В точная функция существенно отличается от формулы (1) [4, 5]. Поскольку, однако, объем атома В примерно в N^6 , n^6 раз меньше объема орбиты возбужденного состояния, этим различием можно пренебречь для больших чисел N , n . Кроме того, если атом В находится на расстоянии R порядка радиуса орбиты N , то для меньших n он может находиться в подбарьерной области, где волновые функции вообще экспоненциально малы.

Воспользуемся общим выражением для полной вероятности A_N излучения изолированного атома с переходом из начального состояния $|N\rangle$ на все нижележащие состояния, используя разложения по сферическим функциям [11, 16, 17]:

$$A_N = \frac{4}{3c^3} S_N(R), \quad S_N(R) \equiv \sum_{n=1}^{N-1} (\Delta E_n^N)^3 \sum_{L=0}^{n-1} [nL|\mathbf{r}|N]^2, \quad (29)$$

где в атомных единицах скорость света равна $c = 137.0343$, а разность энергий начального и конечного состояний равна $\Delta E_n^N = 1/2n^2 - 1/2N^2$. Радиационное время жизни состояния $|N\rangle$ в обычной системе единиц равно

$$\tau_N(R) = \frac{4.668 \cdot 10^{-11} \text{ с}}{S_N(R)}. \quad (30)$$

Вычислим вероятности излучения при переходе возбужденного электрона из активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ во все другие активные состояния с главными квантовыми числами $n < N$. Во всех этих состояниях проекция орбитального момента электрона на ось z равна нулю, $m = 0$, и отличными от нуля являются матричные элементы только компоненты $z = r \cos \theta$:

$$\begin{aligned} {}_1M_{N,n}(R) &\equiv \langle \Psi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) | r \cos \theta | \Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \rangle = \\ &= \sum_{L=0}^{n-1} J_{n,L,0}^*(R) \left\{ J_{N,L+1,0}^*(R) \frac{(L+1)(r)_{N,L+1}^{n,L}}{\sqrt{(2L+1)(2L+3)}} + \right. \\ &\quad \left. + J_{N,L-1,0}^*(R) \frac{L(r)_{N,L-1}^{n,L}}{\sqrt{(2L+1)(2L-1)}} \right\}, \quad (31) \end{aligned}$$

где

$$(r)_{N,L\pm 1}^{n,L} \equiv \int_0^\infty f_{n,L}(r) f_{N,L\pm 1}(r) r^3 dr \quad (32)$$

— радиальный матричный элемент.

Излучение атома водорода и водородоподобных ионов определяется квадратами модулей матричных элементов (32), и это излучение не зависит от их знаков. В сумме (31) присутствуют не квадраты, а первые степени матричных элементов $(r)_{N,L\pm 1}^{n,L}$, знаки которых зависят от знаков радиальных функций. Известно, что волновые уравнения определяют волновые функции с точностью до фазового множителя $\exp(i\alpha)$, где константа α не зависит от переменных, от которых зависят волновые функции. Соотношение (31), однако, содержит произведения радиальных матричных элементов на функции $J_{N,L\mp 1}^*(R)$ и $J_{n,L}^*(R)$, которые зависят от этих же, но комплексно-сопряженных множителей $\exp(-i\alpha)$. Поэтому матричный элемент (31) не зависит от фазовых множителей $\exp(i\alpha)$. Функция активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ была определена в работах [2–4] при использовании кулоновской функции Грина, найденной Хостлером и Праттом [18, 19], которая также не зависит от этих фазовых множителей.

Знаки матричных элементов $(r)_{N,L\pm 1}^{n,L}$, вычисленных с помощью формулы (32), могут зависеть от

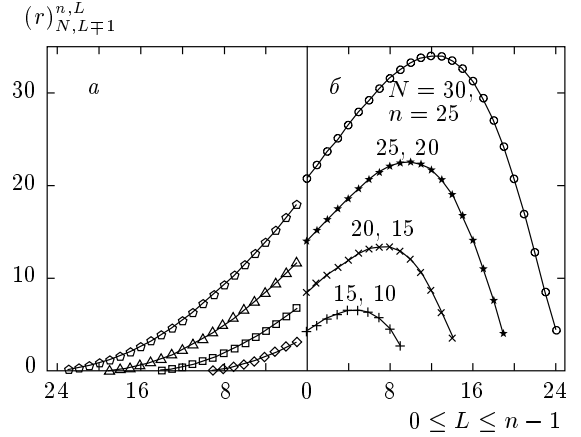


Рис. 5. Матричные элементы $(r)_{N,L-1}^{n,L}$ (а) и $(r)_{N,L+1}^{n,L}$ (б), найденные двумя способами для $n = N - 5$: кривые — численный расчет интеграла (32); символы — расчет с помощью формулы Гордона (33)

квантовых чисел n, N, L , так как радиальные функции $f_{n,L}(r), f_{N,L\pm 1}(r)$ знакопеременны. Эта зависимость влияет на величину матричного элемента (31) и может влиять на его знак. Ниже показано, однако, что радиальные матричные элементы $(r)_{N,L\pm 1}^{n,L}$ положительны при любых числах n, N, L при условии, что знаки радиальных функций выбираются положительными в пределе $r \rightarrow 0$.

Интеграл (32) был вычислен Гордоном [20], и его результат для $N > n$ можно записать в виде [11, 16, 21]

$$\begin{aligned} (r)_{N,L-1}^{n,L} &= \frac{(-1)^{n-L}}{4(2L-1)!} \sqrt{\frac{(n+L)!(N+L-1)!}{(n-L-1)!(N-L)!}} \times \\ &\quad \times \left(\frac{4nN}{(N-n)^2} \right)^{L+1} \left(\frac{N-n}{N+n} \right)^{N+n} \times \\ &\quad \times \left[{}_2F_1 \left(-n+L+1, -N+L; 2L; \frac{-4nN}{(N-n)^2} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{N-n}{N+n} \right)^2 {}_2F_1 \left(-n+L-1, -N+L; \right. \right. \\ &\quad \left. \left. 2L; \frac{-4nN}{(N-n)^2} \right) \right]. \quad (33) \end{aligned}$$

Матричный элемент $(r)_{N,L+1}^{n,L}$ получается из (33) при перестановке $n \leftrightarrow N, L \rightarrow L+1$.

На рис. 5 показано сравнение матричных элементов $(r)_{N,L\pm 1}^{n,L}$, найденных в данной работе при численном вычислении интеграла (32) и с помощью формулы Гордона (33) для состояний с главными

квантовыми числами $n, N \leq 30$. Видно, что все найденные матричные элементы положительны, а матричные элементы, полученные при численном расчете интеграла (32), совпадают с матричными элементами, вычисленными с помощью формулы Гордона (33). Формула (33) получена Гордоном также при использовании стандартного выражения для функций $f_{N,L}(r)$, в котором гипергеометрическая функция равна +1 при $r = 0$, как и в проведенном в данной работе численном определении интеграла (32).

Матричные элементы $(r)_{N,L\pm 1}^{n,L}$ были вычислены в данной работе с помощью интеграла (32) также и для больших чисел $N \leq 1000, n \leq 500$, и все они тоже были найдены положительными. Этот расчет проводился методом, описанным в работе [6].

Матричные элементы переходов между состояниями с функцией $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ и ортогонализированными сферическими функциями (18) равны

$$\begin{aligned} {}_2M_{N,(nL)}(R) &\equiv \langle \Psi_{nL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) | r \cos \theta | \Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \rangle = \\ &= J_{N,L+1,0}(R) \frac{(L+1)(r)_{N,L+1,0}^{n,L}}{\sqrt{(2L+3)(2L+1)}} + \\ &+ J_{N,L-1,0}(R) \frac{L(r)_{N,L-1,0}^{n,L}}{\sqrt{(2L+1)(2L-1)}} - \\ &- J_{n,L,0}(R) {}_1M_{N,n}(R), \quad (34) \end{aligned}$$

где ${}_1M_{N,n}(R)$ дается формулой (31). Полная вероятность перехода во все состояния (18) с данным главным квантовым числом n равна сумме квадратов модулей матричных элементов (34).

Формулы (31), (34) определяют вероятности излучения фотонов, поляризованных параллельно оси z . Излучение фотонов, поляризованных вдоль осей x и y , определяется матричными элементами для компонент x и y радиуса-вектора электрона \mathbf{r} . Для вычисления этих матричных элементов можно использовать матричные элементы для комбинаций $x \pm iy$ [16], учитывая, что для фиксированных начальных и конечных состояний абсолютные величины матричных элементов для компонент x и y одинаковы и в два раза меньше абсолютных величин матричных элементов для комбинаций $x \pm iy$. Для начального состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ эти матричные элементы отличны от нуля для переходов в состояния $\psi_{nLm}(\mathbf{r})$ с проекцией орбитального момента $m = \pm 1$. Функции $\psi_{nLm}(\mathbf{r})$ с отличным от нуля числом m изначально ортогональны функциям активных состояний $\Psi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ и не присутствуют среди функций (18). Матричные элементы для переходов в состояния $\psi_{n,L,m=\pm 1}$ различаются лишь знаком и равны

$$\begin{aligned} \langle n, L, \pm 1 | x | \Psi_N \rangle &= \langle n, L, \pm 1 | y | \Psi_N \rangle = \\ &= \mp \frac{1}{2} \sqrt{\frac{L(L+1)}{2L+1}} \left[J_{N,L+1,0}(R) \frac{(r)_{N,L+1}^{n,L}}{\sqrt{2L+3}} - \right. \\ &\quad \left. - J_{N,L-1,0}(R) \frac{(r)_{N,L-1}^{n,L}}{\sqrt{2L-1}} \right]. \quad (35) \end{aligned}$$

Сумма квадратов модулей этих четырех матричных элементов, определяющая полную вероятность излучения фотонов, поляризованных вдоль осей x, y , с переходом электрона в состояния ψ_{nLm} со всеми возможными проекциями момента m равна

$$\begin{aligned} |{}_3M_{N,(nL)}(R)|^2 &= \frac{L(L+1)}{2L+1} \times \\ &\times \left[J_{N,L+1,0}(R) \frac{(r)_{N,L+1}^{n,L}}{\sqrt{2L+3}} - \right. \\ &\quad \left. - J_{N,L-1,0}(R) \frac{(r)_{N,L-1}^{n,L}}{\sqrt{2L-1}} \right]^2. \quad (36) \end{aligned}$$

Для $n = 2$ этот результат, вообще говоря, не верен, так как в этом случае $\cos \varphi$ принадлежит ортогонализующей функции $F_{ort}(\mathbf{r})$, которая не принадлежит набору ортогонализированных функций. Однако численно формула (36) верна и при $n = 2$.

Радиационное время жизни активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ зависит от полной суммы квадратов модулей матричных элементов, умноженных на энергии перехода в кубе:

$$\begin{aligned} S_N(R) &= \sum_{n=1}^{N-1} (\Delta E_n^N)^3 \left\{ |{}_1M_{N,n}(R)|^2 + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{L=0}^{n-1} \left[|{}_2M_{N,(nL)}(R)|^2 + |{}_3M_{N,(nL)}(R)|^2 \right] \right\}. \quad (37) \end{aligned}$$

Разности энергий в этой формуле можно принять равными разностям невозмущенных уровней энергии, $\Delta E_n^N = 1/2n^2 - 1/2N^2$, так как смещения термов активных состояний много меньше разности соседних кулоновских уровней N и $N \pm 1$, см. ниже.

3.1. Излучение в параболическом базисе

Рассмотрим теперь излучение в параболическом базисе кулоновских состояний, возмущенных нейтральным атомом. Матричный элемент перехода между активными состояниями равен

$$\begin{aligned}
 {}_1M_{N,n}^{prb}(R) &\equiv \langle \Psi_N(R) | r \cos \theta | \Psi_n(R) \rangle = \\
 &= \sum_{n_1=0}^{N-1} \sum_{n'_1=0}^{n-1} I_{Nn_1 0}(R) I_{nn'_1 0}(R) \times \\
 &\quad \times \langle Nn_1 0 | r \cos \theta | nn'_1 0 \rangle. \quad (38)
 \end{aligned}$$

При $m = 0$ суммы параболических чисел равны $n_1 + n_2 + 1 = N$ и $n'_1 + n'_2 + 1 = n$. Матричные элементы в параболическом базисе были вычислены Гордоном [20]. Полученные им формулы можно найти в книге Бете и Солпитера [16]: формула (65.1) для матричных элементов $\langle |r \cos \theta| \rangle$ и формула (65.2) для матричных элементов $\langle |r \sin \theta| \rangle$.

Матричный элемент перехода между «верхним» активным состоянием Ψ_N и «нижними» ортогонализированными состояниями $\Psi_{nn'_1 0}$ равен

$$\begin{aligned}
 {}_2M_{Nnn'_1 0}^{prb}(R) &= -I_{nn'_1 0}(R) {}_1M_{N,n}^{prb}(R) + \\
 &+ \sum_{n_1=0}^{N-1} I_{Nn_1 0}(R) \langle Nn_1 0 | r \cos \theta | nn'_1 0 \rangle. \quad (39)
 \end{aligned}$$

Для переходов с излучением фотонов, поляризованных перпендикулярно оси z , матричный элемент равен

$$\begin{aligned}
 {}_3M_{Nnn'_1, 0 \rightarrow 1}^{prb}(R) &= \sum_{n_1=0}^{N-1} I_{Nn_1 0}(R) \times \\
 &\times \langle Nn_1 0 | r \sin \theta | nn'_1, m = 1 \rangle, \quad (40)
 \end{aligned}$$

причем он отличен от нуля только для переходов, при которых проекция момента m изменяется на единицу: $|m - m'| = 1$.

В отсутствие внешнего электрического поля энергия кулоновских состояний зависит только от главного квантового числа N и поэтому полная вероятность излучательного перехода равна

$$\begin{aligned}
 S_N^{prb}(R) &= \sum_{n=1}^{N-1} (\Delta E_n^N)^3 \left\{ \left| {}_1M_{N,n}^{prb}(R) \right|^2 + \right. \\
 &+ \sum_{n'_1=0}^{n-1} \left| {}_2M_{Nn_1 n'_1 0}^{prb}(R) \right|^2 + \\
 &\left. + 4 \sum_{n'_1=0}^{n-2} \left| {}_3M_{Nnn'_1, 0 \rightarrow 1}^{prb}(R) \right|^2 \right\}. \quad (41)
 \end{aligned}$$

Поскольку согласно формулам (1)–(3) волновые функции активных состояний одинаковы во всех базисах, матричные элементы $\langle \Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) | r \cos \theta | \Psi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \rangle$ между активными

состояниями также одинаковы во всех базисах. Матричные же элементы переходов между начальным активным состоянием Ψ_N и ортогонализированными функциями сферических Ψ_{nL0} и параболических $\Psi_{nn_1 0}$ состояний различны.

Для вычисления полной вероятности излучения необходимо вычислить суммы квадратов модулей матричных элементов переходов во все конечные состояния. Рассмотрим переходы в состояния с ортогонализированными волновыми функциями с конечным главным квантовым числом n , когда внешнее электрическое поле мало (или вообще равно нулю), и расщепления энергий ортогонализированных состояний малы и ими можно пренебречь. С помощью формулы (21) матричный элемент перехода в ортогонализированное параболическое состояние можно выразить через сумму матричных элементов переходов в состояния с ортогонализированными сферическими волновыми функциями:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nn_1 0} \rangle &= \\
 &= \sum_{L=0}^{n-1} C_{nL0}^{nn_1 0} \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nL0} \rangle. \quad (42)
 \end{aligned}$$

Сумма квадратов этих матричных элементов для переходов в параболический базис равна

$$\begin{aligned}
 \sum_{n_1=0}^{n-1} \left| \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nn_1 0} \rangle \right|^2 &= \\
 &= \sum_{n_1=0}^{n-1} \left| \sum_{L=0}^{n-1} C_{nL0}^{nn_1 0} \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nL0} \rangle \right|^2. \quad (43)
 \end{aligned}$$

Квадрат суммы в правой части этого равенства можно записать как произведение сумм по L и L' :

$$\begin{aligned}
 \sum_{n_1=0}^{n-1} \left| \sum_{L=0}^{n-1} C_{nL0}^{nn_1 0} \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nL0} \rangle \right|^2 &= \\
 &= \sum_{n_1=0}^{n-1} \sum_{L=0}^{n-1} C_{nL0}^{nn_1 0} \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nL0} \rangle \times \\
 &\quad \times \sum_{L'=0}^{n-1} C_{nL'0}^{nn_1 0} \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nL'0} \rangle. \quad (44)
 \end{aligned}$$

Поскольку сферические функции Ψ_{nL0} ортогонализированных состояний не зависят от параболического квантового числа n_1 , сначала можно вычислять сумму по n_1 , содержащую лишь произведение коэффициентов $C_{nL0}^{nn_1 0} C_{nL'0}^{nn_1 0}$. Эта сумма, согласно формуле (5), равна

$$\sum_{n_1=0}^{n-1} C_{nL0}^{nn_1 0} C_{nL'0}^{nn_1 0} = \delta_{L,L'},$$

и поэтому получаем

$$\sum_{n_1=0}^{n-1} \left| \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nn_1 0} \rangle \right|^2 = \sum_{L=0}^{n-1} \left| \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{nL0} \rangle \right|^2, \quad (45)$$

т. е. суммы квадратов матричных элементов переходов из начального активного состояния Ψ_N во все ортогонализированные сферические и параболические состояния с главным квантовым числом n оказываются одинаковыми, и это справедливо как для $n \neq N$, так и для $n = N$. Это совпадение выполняется только в отсутствие электрического поля. Равенство (45) получено аналогично доказательству равенства друг другу разложений функции активного состояния по кулоновским сферическим и параболическим функциям, формула (6). Оба доказательства обусловлены вырождением кулоновских уровней энергии.

Соотношение (45) справедливо для суммы матричных элементов ${}_2M$ и ${}_3M$. На рис. 6 для переходов $N = 30 \rightarrow n = 29$ и $N = 30 \rightarrow n = 26$ показаны зависимости от межъядерного расстояния R квадрата матричного элемента ${}_1M$ и сумм квадратов матричных элементов ${}_2M$ и ${}_3M$, вычисленных с помощью сферических и параболических функций. Видно, что в обоих случаях все эти зависимости одинаковы.

Рассчитанные по формулам (29)–(41) радиационные времена жизни активных состояний $N = 40, 30, 20$ и 14 показаны на рис. 7 как функции межъядерного расстояния R . Если расстояние R является асимптотически большим для начального состояния N , то оно является асимптотически большим также и для конечных состояний всех излучательных переходов. Поэтому при асимптотически больших R эти времена равны радиационным временам жизни параболических состояний с максимальным дипольным моментом. При расстояниях, равных половине размера орбиты, эти времена на полтора-два порядка больше асимптотического предела.

При равном нулю межъядерном расстоянии, $R = 0$, волновые функции активных состояний Ψ_N переходят в кулоновскую сферическую волновую функцию с нулевым орбитальным моментом $\psi_{N,0}(r)$ [2, 3], а дипольные матричные элементы ${}_1M_{N,n}(R)$ между волновыми функциями активных состояний обращаются в нуль. Этот предел излучения определяется переходами в ортогонализированные P -состояния, и их пределами являются $S \leftrightarrow P$ -пе-

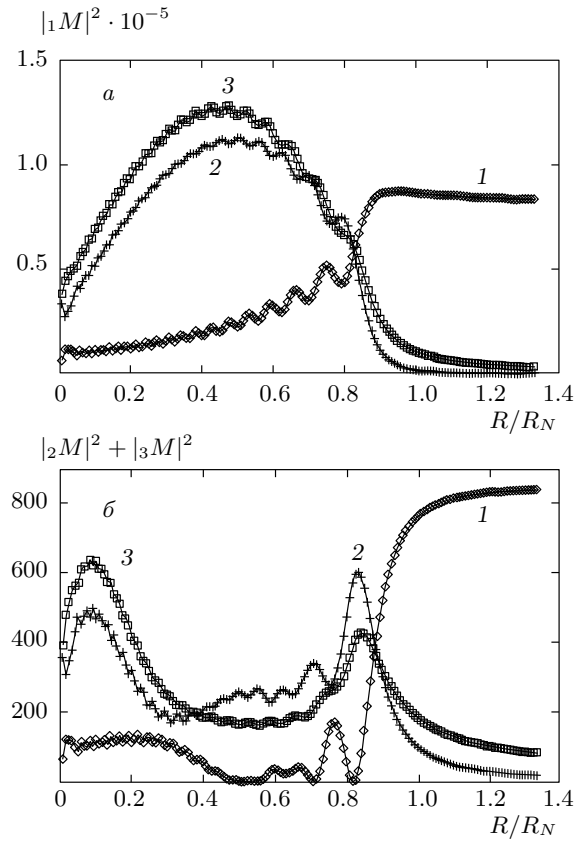


Рис. 6. Зависимости от относительного межъядерного расстояния R/R_N квадратов матричных элементов для переходов $N = 30 \rightarrow n = 29$ (а) и $N = 30 \rightarrow n = 26$ (б); полученные с помощью расчетов в сферических (кривые) и параболических (точки) координатах: 1 — квадрат матричного элемента для переходов между активными состояниями, формулы (31) и (38); 2 — сумма квадратов матричных элементов для переходов из активного состояния в ортогонализированные состояния, формулы (34) и (39); 3 — сумма квадратов матричных элементов для переходов с излучением фотонов, поляризованных перпендикулярно \mathbf{R} , формулы (36) и (40)

реды. На рис. 8 показан этот предел времен излучения для различных N .

3.2. Излучение при переходах между состояниями с одним и тем же главным квантовым числом

В используемом приближении энергия только активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ смещается относительно начальной энергии $E_n = -Z^2/2n^2$. Смещение

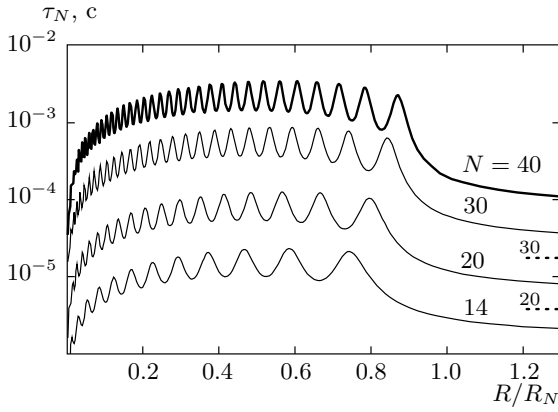


Рис. 7. Радиационные времена жизни активных состояний Ψ_N с квантовыми числами $N = 40, 30, 20, 14$ как функции относительных расстояний R/R_N . Для состояний $N = 20, 30$ точками указаны асимптотические пределы при $R \rightarrow \infty$ радиационных времен состояний $N = 20, 30$, равных радиационным временам параболических состояний с максимальным квантовым числом $n_1 = N - 1$

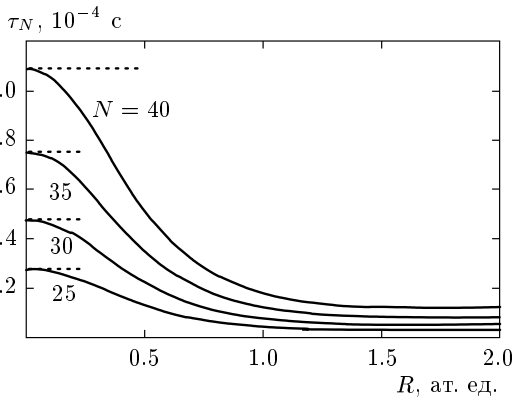


Рис. 8. Пределы при $R \rightarrow 0$ зависимостей от R радиационных времен жизни τ активных состояний с главными квантовыми числами $N = 40, 35, 30, 25$. Точками указаны радиационные времена жизни кулоновских сферических S -состояний ($L = 0$) с переходами во все нижележащие кулоновские сферические P -состояния

$E_n(R) - E_n$ может быть вычислено по методу Ферми [13, 22]:

$$E_n(R) - E_n = 2\pi L_B |\Psi_n(\mathbf{r} = \mathbf{R})|^2 = 2\pi L_B Q_n(R), \quad (46)$$

где L_B — длина рассеяния электрона на возмущающем атоме В, а величина $Q_N(R)$ определена формулами (8), (9), (12). В случае возмущения атома

ми благородных газов длины рассеяния составляют $L_{He} = 1.180, L_{Ne} = 0.210, L_{Ar} = -1.60, L_{Kr} = -3.50, L_{Xe} = -6.50$.

При расстояниях R , превышающих размер орбиты, разность энергий (46) экспоненциально уменьшается. При расстояниях, меньших размера орбиты, абсолютная величина разности энергий (46) возрастает и при $R = 0$ достигает своего максимального значения. Используя предел (13) для функции $Q_N(R)$ при $R \rightarrow 0$, находим, что предел смещения энергии активного состояния (46) при $R = 0$ равен

$$E_N(R) - E_N \approx 2Z^3 L_B / N^3.$$

Разности ближайших кулоновских уровней энергии при больших числах N равны

$$|E_N - E_{N\pm 1}| \approx Z^2 / N^3.$$

Следовательно, при $|2ZL_B| > 1$ уровень энергии активного состояния достигает соседнего кулоновского уровня. Однако при $N \gg 1$ это происходит при расстояниях R , много меньших размера орбиты.

Необходимо вычислить интенсивность излучения при переходах из активного состояния во все другие состояния с тем же числом N . Матричные элементы перехода для компоненты дипольного момента $r \cos \theta$ для переходов между активным состоянием Ψ_N и ортогонализированными параболическими состояниями Ψ_{Nn_10} равны

$$\langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{Nn_10} \rangle = I_{Nn_10}(R) \times \left[d_{Nn_10}^{(z)} - \sum_{n'_1=0}^{N-1} d_{Nn'_10}^{(z)} |I_{Nn'_10}(R)|^2 \right], \quad (47)$$

где матричный элемент $d_{Nn_1m}^{(z)}$ определен после формулы (26), а в формуле (47) он присутствует при $m = 0$.

Вероятность излучения фотонов, поляризованных перпендикулярно оси z системы координат, определяется матричным элементом для $r \sin \theta$. В Приложении приводится расчет этого матричного элемента без изменения главного квантового числа N и получено выражение

$$X_{N,n_1,m}^{N,n'_1,m'} = \langle F_{N,n_1,m} | r \sin \theta | F_{N,n'_1,m'} \rangle = -\frac{3N}{2Z} \times \begin{cases} \sqrt{(n_1+|m|)(n_2+1)}, & n_1 = n'_1, n_2 = n'_2 - 1, \\ \sqrt{(n_2+|m|)(n_1+1)}, & n_2 = n'_2, n_1 = n'_1 - 1. \end{cases} \quad (48)$$

Матричные элементы для чисел $n_1 \neq n'_1$ и $n_1 \neq n'_1 - 1$ равны нулю.

Излучение фотонов, поляризованных перпендикулярно оси z системы координат, определяется матричными элементами двух дипольных переходов: $x = r \sin \theta \cos \phi$ и $y = r \sin \theta \sin \phi$. Как и в случае формул (34), (35), сумма квадратов модулей четырех матричных элементов, определяемых интегрированием только по углу ϕ , равна единице. Поэтому квадрат модуля выражения (48) численно является полной суммой квадратов матричных элементов для переходов $m \rightarrow m \pm 1$.

Проекция момента электрона m' в активном состоянии Ψ_N и в ортогонализированных состояниях $\Psi_{Nn_1,0}$ равна нулю, и поэтому переход при излучении фотона, поляризованного перпендикулярно оси z , возможен лишь в состоянии с $|m| = 1$.

Два выражения в (48) различаются взаимной перестановкой чисел $n_1 \leftrightarrow n_2$. При $m = 1$ эта перестановка не меняет величины матричного элемента и он оказывается одинаковым при $n_1 = n'_1$ и $n_1 = n'_1 - 1$. Если для переходов с изменением главного квантового числа нет правил отбора для этого матричного элемента [16, 20], то для переходов без изменения N это правило отбора существует: при всех квантовых числах n_1 , не совпадающих ни с n'_1 , ни с $n'_1 - 1$, матричный элемент $X_{n_1, n_2, m}^{n'_1, n'_2, m'}$ равен нулю.

Полная вероятность перехода из активного состояния Ψ_N во все параболические состояния $F_{N, n_1, m=1}$ ($n_1 + n_2 = N - 2$) с излучением фотона, поляризованного перпендикулярно оси z , зависит от суммы квадратов модулей матричных элементов (48) с $m = 1$:

$$\sum_{n_1=0}^{N-2} \left| \langle \Psi_N | r \sin \theta | F_{N, n_1, m=1} \rangle \right|^2 = \frac{9N^2}{4Z^2} \times \sum_{n_1=0}^{N-2} (n_1 + 1)(n_2 + 1) [I_{Nn_1,0}^2(R) + I_{Nn_2,0}^2(R)]. \quad (49)$$

Полная вероятность перехода из активного состояния Ψ_N во все ортогонализированные состояния $\Psi_{N, n-1, 0}$ с излучением фотонов, поляризованных параллельно оси z , зависит от суммы квадратов матричных элементов (47):

$$\sum_{n_1=0}^{N-1} \left| \langle \Psi_N | r \cos \theta | \Psi_{Nn_1,0} \rangle \right|^2 = \sum_{n_1=0}^{N-1} I_{Nn_1,0}^2(R) \times \left[d_{Nn_1,0}^{(z)} - \sum_{n'_1=0}^{N-1} d_{Nn'_1,0}^{(z)} |I_{Nn'_1,0}(R)|^2 \right]^2. \quad (50)$$

На рис. 9 показаны суммы (49) и (50) как функции межъядерного расстояния R при $N = 30$. Вид-

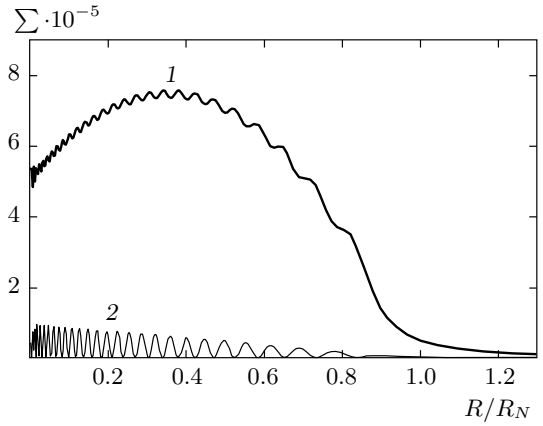


Рис. 9. Суммы Σ квадратов матричных элементов дипольных переходов из активного состояния во все состояния с тем же числом $N = 30$: кривая 1 — выражение (49); 2 — (50)

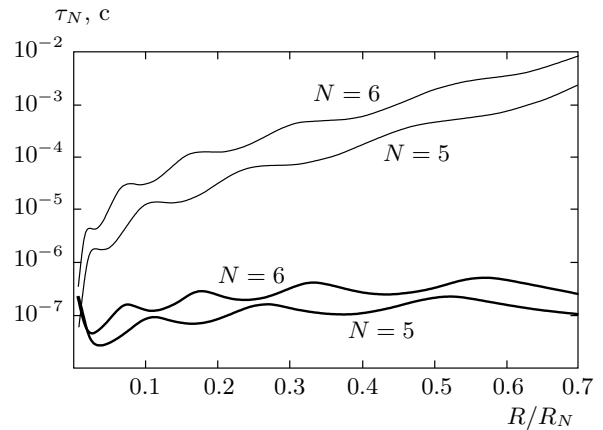


Рис. 10. Радиационные времена жизни активных состояний Ψ_N при $N = 5, 6$: толстые линии — времена жизни при учете всех возможных излучательных переходов; тонкие линии — времена жизни только для переходов без изменения главного квантового числа

но, что сумма (49) примерно на порядок больше суммы (50). На рис. 10 показаны радиационные времена жизни активных состояний Ψ_N при $N = 5, 6$. Представленные данные относятся к столкновению возбужденных частиц с атомом He, длина рассеяния электрона на котором положительна, $L_{He} = 1.180$. Уровень энергии активного состояния Ψ_N в этом случае поднимается вверх, см. формулу Ферми (46), и излучательный переход из этого состояния в ортогонализированные состояния с тем же числом N оказывается возможным. При столкновении с атомом В,

длина рассеяния электрона на котором отрицательна, уровень энергии активного состояния опускается и возможными излучательными переходами оказываются обратные переходы из ортогонализированных состояний в активное состояние Ψ_N .

4. ТУШЕНИЕ ВОЗБУЖДЕННОГО КУЛОНОВСКОГО СОСТОЯНИЯ НЕЙТРАЛЬНЫМ АТОМОМ

В этом разделе вычисляются изменения орбитального момента электрона в возбужденном атоме водорода или водородоподобном ионе при их столкновениях с нейтральным атомом В, у которого нет отрицательного иона. Рассматриваются переходы в пределах одного главного квантового числа N , когда уровни энергии всех состояний одинаковы. Изменение момента происходит в результате перемешивания временных фаз адиабатических волновых функций, т. е. в результате квантовой интерференции, как и в случае процесса перезарядки [10]. Проведены также подробные численные расчеты системы адиабатических уравнений, описывающих перемешивание кулоновских возбужденных состояний в столкновении с нейтральным атомом, и показано, что учет неадиабатических переходов не приводит к существенным изменениям результатов, найденных методом квантовой интерференции.

Исследованный ранее процесс образования отрицательного иона кальция Ca^- при столкновении нейтрального атома Ca с возбужденными атомами [23] в этом плане существенно отличается от рассматриваемого здесь процесса. Уровень энергии отрицательного иона в системе $\text{Ca}^- + \text{A}^+ \rightarrow \text{Ca} + \text{A}^*(N)$ смещается при изменении расстояния R гораздо резче, чем это происходит для уровня энергии активного состояния Ψ_N . Поэтому в этом случае характерная частота изменения взаимодействия существенно больше.

Пусть до столкновения с нейтральным атомом В состояние возбужденного одноэлектронного атома или иона $\text{A}^*(NL_0m)$ определяется сферической $\psi_{NL_0m}(\mathbf{r})$ или параболической $F_{Nn_1m}(\mathbf{r})$ волновой функцией. Разложение сферической и параболической функций по собственным функциям ортогонализированных сферического или параболического базисов обратно разложениям (23) и (24):

$$\psi_{NL_0}(\mathbf{r}) = J_{NL_0}(R)\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \sum_{L'=0}^{N-1} C_{NLL'}^{m=0}\Psi_{NL'_0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (51)$$

$$F_{Nn_10}(\mathbf{r}) = I_{Nn_10}(R)\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \sum_{n'_1=0}^{N-1} C_{Nn_1n'_1}^{m=0}\Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (52)$$

где коэффициенты равны коэффициентам в формулах (23), (24):

$$C_{NLL'}^{m=0}(R) = \delta_{L,L'} - J_{NL_0}(R)J_{NL'_0}^*(R), \quad (53)$$

$$C_{Nn_1n'_1}^{m=0}(R) = \delta_{n_1,n'_1} - I_{Nn_10}(R)I_{Nn'_10}^*(R). \quad (54)$$

Рассмотрим сначала сферический базис. Если нет неадиабатических переходов, то разложение (51) определяет адиабатическую волновую функцию $\Phi(t, \mathbf{r})$ системы $\text{A}^*(NL_00) + \text{B}$ в произвольный момент времени:

$$\Phi(t, \mathbf{r}) = \left\{ \sum_{L'=0}^{N-1} C_{N L_0 L'}^{m=0}(R)\Psi_{NL'_0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right\} \times \exp\left(-i \int_{t_0}^t E_N dt'\right) + J_{NL_00}(\mathbf{R})\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \times \exp\left(-i \int_{t_0}^t E_N(R(t')) dt'\right), \quad (55)$$

где $E_N = -Z^2/2N^2$, а $E_N(R(t))$ — энергия активного состояния с волновой функцией $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$. Относительное движение двух атомных частиц описывается прямолинейной классической траекторией $R(t)$ с прицельным параметром ϱ .

После столкновения, когда $t \rightarrow \infty$, волновая функция (55) равна

$$\Phi(t \rightarrow \infty, \mathbf{r}) = \alpha_0(t) \left\{ \sum_{L'=0}^{N-1} C_{N L_0 L'}^{m=0}(R)\Psi_{NL'_0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \alpha_N(\varrho)J_{NL_00}(R)\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right\} \Bigg|_{R \rightarrow \infty}, \quad (56)$$

где

$$\alpha_0(t) = \exp\left(-i \int_{t_0}^t E_N dt'\right),$$

$$\alpha_N(\varrho) = \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} [E_N(R(t')) - E_N] dt'\right). \quad (57)$$

Функция (56) равна линейной комбинации функций $\psi_{NL0}(\mathbf{r})$ с моментами $0 \leq L \leq N - 1$. Если до столкновения начальным было состояние $\psi_{NL_0 0}(\mathbf{r})$ с моментом L_0 , то после столкновения заселенными оказываются состояния $\psi_{NL0}(\mathbf{r})$ со всеми моментами L и с равной нулю проекцией момента $m = 0$. Изменение величины момента обусловлено интерференцией волновых функций адиабатических состояний, оказывающихся заселенными в начале столкновения. Этот эффект впервые был обнаружен Фирсовым при исследовании резонансной перезарядки электрона в столкновении атома водорода с протоном [10].

Вероятность $P_{NL0}(\varrho)$ заселения после столкнове-

ния состояния $\psi_{NL0}(\mathbf{r})$, если до столкновения было заселено состояние $\psi_{NL_0 0}(\mathbf{r})$, равна

$$P_{NL0}(\varrho) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{NL0}^*(\mathbf{r}) \Phi(t \rightarrow \infty, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 = \left| \sum_{L'=0}^{N-1} C_{NL_0 L'}^{m=0}(R) [\delta_{L,L'} - J_{NL_0}(R) J_{NL'0}(R)] + [\alpha_N(\varrho) - 1] J_{NL_0}(\infty) J_{NL_0 0}^*(\infty) \right|^2. \quad (58)$$

Это выражение приводится к виду

$$P_{NL0}(\varrho) = \begin{cases} 1 - 4J_{NL_0 0}^2(\infty) [1 - J_{NL_0 0}^2(\infty)] \sin^2(\Delta_N(\varrho)), & L = L_0, \\ 4|J_{NL_0 0}(\infty)|^2 |J_{NL0}(\infty)|^2 \sin^2(\Delta_N(\varrho)), & L \neq L_0, \end{cases} \quad (59)$$

где

$$\Delta_N(\varrho) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [E_N(R(t')) - E_N] dt'. \quad (60)$$

Ортогонализованная система волновых функций построена нами в системе координат, ось z которой направлена по вектору \mathbf{R} . В этом случае в соотношении нормировки (1а) присутствуют функции $J_{NL0}(R)$ только с нулевым числом $m = 0$ и имеет место равенство

$$\sum_{L=0}^{N-1} J_{NLm}^2(\mathbf{R}) = 1,$$

которое справедливо при любом значении вектора \mathbf{R} . Асимптотический предел функции $J_{NL0}(R)$ при $R \rightarrow \infty$ определяется формулой (76), так как сферическая радиальная функция $f_{NL}(R)$ не зависит от числа m . Используя это находим, что полная вероятность $P_{NL_0 0}^{tot}(\varrho)$ изменения орбитального момента, т. е. вероятность перехода из состояния с моментом L_0 во все другие состояния с $L \neq L_0$,

$$P_{NL_0 0}^{tot}(\varrho) = \sum_{L \neq L_0}^{N-1} P_{NL0}(\varrho) = 4J_{NL_0 0}^2(\infty) \sin^2(\Delta_N(\varrho)) \sum_{L \neq L_0}^{N-1} |J_{NL0}(\infty)|^2, \quad (61)$$

с помощью простого преобразования

$$\sum_{L \neq L_0}^{N-1} |J_{NL0}(\infty)|^2 = \sum_{L=0}^{N-1} |J_{NL0}(\infty)|^2 - |J_{NL_0 0}(\infty)|^2 = 1 - |J_{NL_0 0}(\infty)|^2 \quad (62)$$

может быть записана в виде

$$P_{NL_0 0}^{tot}(\varrho) = \sum_{L \neq L_0}^{N-1} P_{NL0}(\varrho) = 4|J_{NL_0 0}(\infty)|^2 \times \times (1 - |J_{NL_0 0}(\infty)|^2) \sin^2(\Delta_N(\varrho)). \quad (63)$$

При этом, как и должно быть, полная вероятность равна единице:

$$P_{NL_0 0}^{tot}(\varrho) + P_{NL_0 0}(\varrho) = \sum_{L=0}^{N-1} P_{NL0}(\varrho) = 1.$$

Если все возможные начальные ориентации момента L в рассматриваемом газе равновероятны, то статистическая вероятность проекции момента $m = 0$ перед столкновением равна $(2L_0 + 1)^{-1}$ и эффективное сечение заселения состояния ψ_{NL0} равно

$$\begin{aligned} \sigma_N^{L_0 \rightarrow L}(v) &= \frac{2\pi}{2L_0 + 1} \int_0^\infty P_{NL_0}(\varrho) \varrho d\varrho = \\ &= \frac{8\pi |J_{NL_0 0}(\infty)|^2}{2L_0 + 1} |J_{NL_0}(\infty)|^2 \times \\ &\quad \times \int_0^\infty \sin^2(\Delta_N(\varrho)) \varrho d\varrho, \end{aligned} \quad (64)$$

а полному сечению при изменении орбитального момента L_0 соответствует выражение

$$\begin{aligned} \sigma_{NL_0 0}^{tot}(v) &= \frac{8\pi |J_{NL_0 0}(\infty)|^2}{2L_0 + 1} \times \\ &\quad \times \left(1 - |J_{NL_0 0}(\infty)|^2\right) \int_0^\infty \sin^2(\Delta_N(\varrho)) \varrho d\varrho. \end{aligned} \quad (65)$$

Для отношения этих сечений получаем

$$f_{L_0}(L) \equiv \frac{\sigma_N^{L_0 \rightarrow L}(v)}{\sigma_{NL_0 0}^{tot}(v)} = \frac{|J_{NL_0}(\infty)|^2}{\left(1 - |J_{NL_0 0}(\infty)|^2\right)}. \quad (66)$$

Это отношение показано на рис. 11 для начального момента $L_0 = 3$. Видно, что вероятность образования состояний с большими моментами $L \gg L_0$ на несколько порядков меньше вероятности образования состояний с моментами $L \sim L_0$.

Численный расчет в адиабатическом приближении. Разности энергий кулоновских состояний с большими квантовыми числами N весьма малы, и поэтому на первый взгляд кажется, что

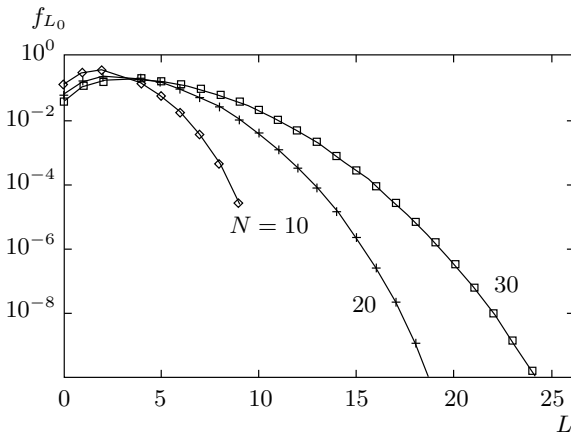


Рис. 11. Относительные вероятности заселения сферических состояний с моментами L в столкновениях нейтрального атома с возбужденными атомами для $N = 10, 20, 30$ и начального момента $L_0 = 3$, формула (66)

неадиабатические переходы между этими состояниями должны быть интенсивны при столкновении с атомами. Однако на самом деле вероятности этих переходов очень малы, так как они зависят от характерной частоты изменения взаимодействия атома с возбужденным атомом. Если атом В не имеет отрицательного иона, то время его взаимодействия с возбужденным атомом зависит от времени пролета через орбиту возбужденного атома, а характерная частота изменения такого взаимодействия обратно пропорциональна этому времени и равна v/ϱ . Если главное квантовое число $N = 30$, то размер орбиты равен $2N^2 = 1800$ ат. ед. Поэтому даже при большой величине скорости v частота v/ϱ оказывается очень малой и вероятность адиабатических переходов также очень мала.

Используем адиабатический метод [24] вычисления вероятности перемешивания орбитального момента электрона в возбужденном кулоновском состоянии при столкновении с нейтральным атомом. Используем для этого систему ортогонализированных сферических и параболических волновых функций, см. формулы (51)–(54). Без учета переходов между адиабатическими состояниями волновые функции рассматриваемой системы определяются формулой (51), (52). Для учета этих переходов зависящие от времени t волновые функции адиабатических состояний сферического базиса можно записать в виде

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) &= a_N(t) \Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \exp\left(-i \int^t E_N(R) dt\right) + \\ &+ \sum_{L=0}^{N-1} a_L(t) \Psi_{NL_0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \times \\ &\quad \times \exp\left(-i \int^t E_N dt\right). \end{aligned} \quad (67)$$

Если в начале столкновения, при $t \rightarrow -\infty$, возбужденный атом находится в состоянии $\psi_{NLm}(\mathbf{r})$, то согласно формуле (51) начальные значения коэффициентов a_N и a_L равны,

$$\begin{aligned} a_N(-\infty) &= J_{NL_0}(\infty), \\ a_L(-\infty) &= \delta_{L,L'} - J_{NL_0}(\infty) J_{NL'_0}^*(\infty), \end{aligned} \quad (68)$$

и число адиабатических состояний в системе координат, ось z которой направлена по вектору \mathbf{R} , равно главному квантовому числу N , так как число m должно в этом случае равняться нулю, $m = 0$, а число L меняется в интервале $0 \leq L \leq N - 1$.

Для коэффициентов $a_N(t)$ и $a_L(t)$ имеем систему уравнений

$$-\left(\frac{da_N(t)}{dt}\right) = \exp\left(i \int_{-\infty}^t \Delta E_N(R) dt\right) \times \sum_{L=0}^{N-1} a_L(t) \frac{dJ_{NL0}(R)}{dt}, \quad (69)$$

$$-\left(\frac{da_L(t)}{dt}\right) = a_N(t) \exp\left(-i \int_{-\infty}^t \Delta E_N(R) dt\right) \times \left(-\frac{dJ_{NL0}(R)}{dt}\right) + \sum_{L'=0}^{N-1} a_{L'}(t) \times \left[J_{NL0}(R) \frac{dJ_{NL'0}^*(R)}{dt} - J_{NL'0}^*(R) \frac{dJ_{NL0}(R)}{dt}\right], \quad (70)$$

где величина $\Delta E_N(R) = E_N(R) - E_N$ является сдвигом энергии активного состояния $\Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, а матричные элементы переходов между адиабатическими состояниями равны

$$\left\langle \Psi_{NL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \left| \frac{d}{dt} \right| \Psi_N^*(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right\rangle = \frac{dJ_{NL0}(\mathbf{R})}{dt}, \quad (71)$$

$$\left\langle \Psi_{NL0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \left| \frac{d}{dt} \right| \Psi_{NL'0}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right\rangle = J_{NL0}(\mathbf{R}) \frac{dJ_{NL'0}^*(\mathbf{R})}{dt} - J_{NL'0}^*(\mathbf{R}) \frac{dJ_{NL0}(\mathbf{R})}{dt}. \quad (72)$$

Траекторию возмущающего атома \mathbf{B} можно считать прямолинейной; при этом $R = \sqrt{x^2 + \varrho^2}$, а состояние вдоль траектории $x = vt$. Производная по времени $d/dt = v(x/R)(d/dR)$, и если от времени t перейти к новой переменной $x = vt$, то система уравнений (69), (70) примет вид

$$\frac{da_N(x)}{dx} = \exp\left(i \int_{-\infty}^x \frac{\Delta E_N(R)}{v} dx\right) \sum_{L=0}^{N-1} a_L(x) \times \left(-\frac{x}{R} \frac{dJ_{NL0}(R)}{dR}\right), \quad (73)$$

$$\frac{da_L(x)}{dx} = a_N(x) \exp\left(-i \int_{-\infty}^x \frac{\Delta E_N(R)}{v} dx\right) \times \left(\frac{x}{R} \frac{dJ_{NL0}(R)}{dR}\right) + \sum_{L'=0}^{N-1} a_{L'}(x) \frac{x}{R} \times \left[J_{NL'0}(R) \frac{dJ_{NL0}^*(R)}{dR} - J_{NL0}^*(R) \frac{dJ_{NL'0}(R)}{dR}\right]. \quad (74)$$

Отметим, что система уравнений (74) состоит из N уравнений для коэффициентов разложения $a_L(x)$ с орбитальными моментами $0 \leq L \leq N - 1$, причем выражение в квадратных скобках равно нулю при $L' = L$.

Функция $J_{NL0}(R)$ вычислялась по формуле (7), а ее производная равна

$$\frac{dJ_{NL0}(R)}{dR} = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi Q_N(R)}} \times \left[\frac{df_{N,L}(R)}{dR} + Z \frac{f_{N,L}(R) \psi_{N,L=m=0}^2(R)}{Q_N(R)}\right]. \quad (75)$$

Решения адиабатических систем уравнений для сферического и параболического базисов проводились одновременно, т.е. с помощью одной и той же компьютерной программы, так как в этих базисах системы адиабатических уравнений формально идентичны. Например, для матричных элементов в параболическом базисе получаем

$$\left\langle \Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \left| \frac{d}{dt} \right| \Psi_N(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right\rangle = \frac{dI_{Nn_10}(R)}{dt}, \quad (76)$$

$$\left\langle \Psi_{Nn_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \left| \frac{d}{dt} \right| \Psi_{Nn'_10}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right\rangle = I_{Nn_10}(R) \frac{dI_{Nn'_10}^*(R)}{dt} - I_{Nn'_10}^*(R) \frac{dI_{Nn_10}(R)}{dt}. \quad (77)$$

Эти выражения аналогичны формулам (71), (72) в сферическом базисе, но их численные величины существенно различны. Поэтому численные решения системы уравнений (73), (74) для сферического и параболического базисов существенно различались, см. ниже.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Система уравнений (73), (74) решалась численно с помощью «разностных» методов [25–27], что позволило справиться с основной проблемой, состоящей

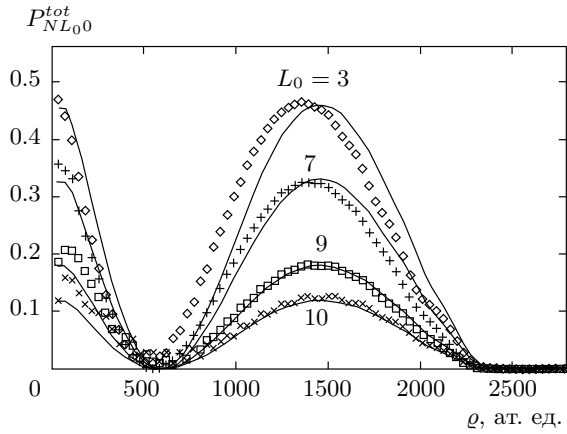


Рис. 12. Зависимости от прицельного параметра ρ полных вероятностей тушения ридберговских состояний с главным квантовым числом $N = 35$ и различными начальными моментами L_0 при столкновениях с атомом Хе со скоростью $v_{\text{Хе}} = 0.001$ ат. ед.: кривые — данные, полученные методом квантовой интерференции; символы — результаты численного решения адиабатической системы уравнений (73), (74)

в следующем. Из-за большого размера кулоновских орбит оказывается необходимым проводить расчет с использованием траекторий атома В очень больших размеров. Поэтому использовался пятишаговый разностный метод [25–27]:

$$a_N(x_{i+1}) = a_N(x_i) + dx \left\{ q51 \cdot S_N(x_i) + q52 \cdot S_N(x_{i-1}) + q53 \cdot S_N(x_{i-2}) + q54 \cdot S_N(x_{i-3}) + q55 \cdot S_N(x_{i-4}) \right\}, \quad (78)$$

$$a_L(x_{i+1}) = a_L(x_i) + dx \left\{ q51 \cdot S_L(x_i) + q52 \cdot S_L(x_{i-1}) + q53 \cdot S_L(x_{i-2}) + q54 \cdot S_L(x_{i-3}) + q55 \cdot S_L(x_{i-4}) \right\}, \quad (79)$$

где $S_N(x)$, $S_L(x)$ — правые части уравнений (73), (74), $q51 = 103/60$, $q52 = -119/120$, $q53 = 41/120$, $q54 = -3/40$, $q55 = 1/120$, а их сумма равна единице.

Результаты представлены на рис. 12–14. На рис. 12 показаны зависимости вероятностей $P_{NL_0}^{tot}$ от прицельного параметра ρ для состояний с главным квантовым числом $N = 35$. Пределы всех вероятностей при $\rho \rightarrow \infty$ равны нулю благодаря множителю $\sin^2(\Delta_N(\rho))$, который зависит от $|\Psi_N(\mathbf{r} = \mathbf{R})|^2$

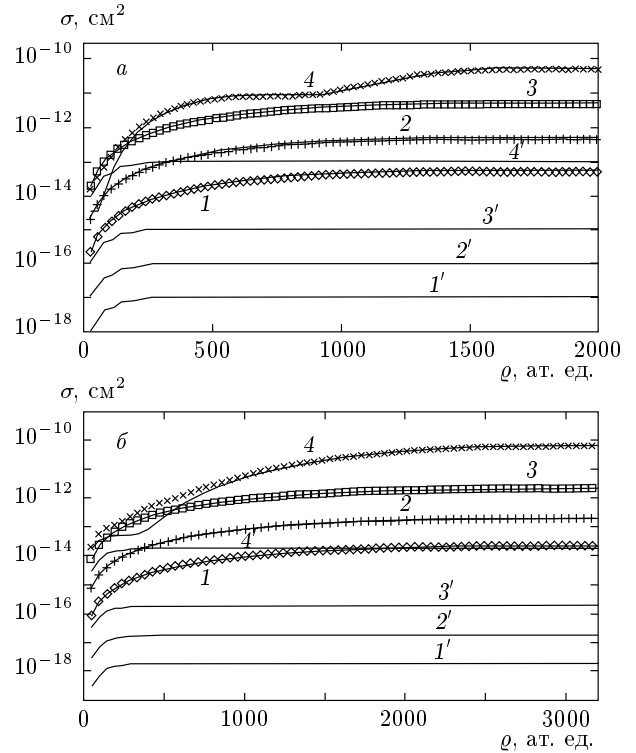


Рис. 13. Зависимости от прицельного параметра ρ интеграла от полной вероятности тушения сферических (кривые 1–4) и параболических (кривые 1'–4') состояний с главным квантовым числом $N = 30$ (а), 40 (б) и начальными моментами $L_0 = (n_1)_0 = 6$ (а), 10 (б) при столкновениях с атомом Хе со скоростями $v_{\text{Хе}}$ [ат. ед.] = 0.1 (1, 1'), 0.033 (2, 2'), 0.01 (3, 3'), 0.001 (4, 4'), см. формулу (64), в которой верхний предел интегрирования ∞ заменен на ρ

и экспоненциально уменьшается в подбарьерной области. Из рис. 12 следует, что для сферического базиса результаты численного расчета близки к результатам, полученным методом квантовой интерференции.

На рис. 13 показаны зависимости от прицельного параметра ρ интегралов от полных вероятностей изменения начального момента L_0 для сферических состояний и числа $(n_1)_0$ для параболических состояний. Кривые 1–4 получены методом квантовой интерференции; символы — результаты решения адиабатической системы уравнений при различных скоростях столкновения с атомом Хе. Кривые 1'–4' — аналогичные результаты для параболических состояний: полные вероятности переходов из начальных состояний с квантовыми числами $(n_1)_0$ во все параболические состояния с другими значе-

ниями квантового числа n_1 , найденные численным решением адиабатической системы уравнений, аналогичной сферической системе уравнений (73), (74). Главные квантовые числа не менялись и были равны $N = 30$ (рис. 13а) и $N = 40$ (рис. 13б). Из рис. 13 следует, что изменение момента L_0 для сферических состояний происходит при столкновениях с прицельными параметрами, примерно равными размеру орбиты. Изменение числа $(n_1)_0$ для параболических состояний происходит при столкновениях с прицельными параметрами, существенно меньшими размера возбужденной орбиты.

В случае параболического базиса перемешивание состояний с разными числами n_1 в результате квантовой интерференции не происходит, так как асимптотические пределы функций $I_{Nn_10}(R)$ с квантовыми числами $n_1 < N - 1$ равны нулю и только у одной функции с максимальным числом $n_1 = N - 1$ абсолютная величина этого предела равна единице. Перемешивание состояний с разными числами n_1 происходит только при расстоянии R возмущающего атома В меньшем размера орбиты R_N , а при отлете атома В на большое расстояние перемешивание исчезает и вероятность начального состояния становится равной единице. Поэтому изменение числа n_1 у состояний параболического базиса происходит только за счет адиабатических переходов; на рис. 13 показаны вероятности только этих переходов. Параболические состояния очень эффективно перемешиваются также в электрических полях, присутствующих в экспериментальных установках, а также под действием полей атомных ионов [6].

На рис. 14 показаны полные сечения тушения сферических состояний с моментами $L_0 = 1, 3, 8$ в зависимости от главного квантового числа $N = 10-40$. При $25 \leq N \leq 45$ полученные в данной работе сечения на четыре–пять порядков и более превышают сечения, найденные в приближении однократного столкновения возбужденного электрона с атомом В [28]. При $N < 25$ это превышение уменьшается до трех–четырех порядков.

Из рис. 14 следует, что для малых моментов $L_0 = 1, 3$ сечения, найденные методом квантовой интерференции и при численном решении адиабатической системы уравнений практически совпадают при всех квантовых числах $10 \leq N \leq 40$. Сечение тушения состояния с $L_0 = 8$ при $N \leq 25$, найденное численным решением адиабатической системы уравнений, на порядок больше сечения, полученного методом квантовой интерференции. Это превышение объясняется вырождением ортогонализированных состояний, следствием которого является их более ин-

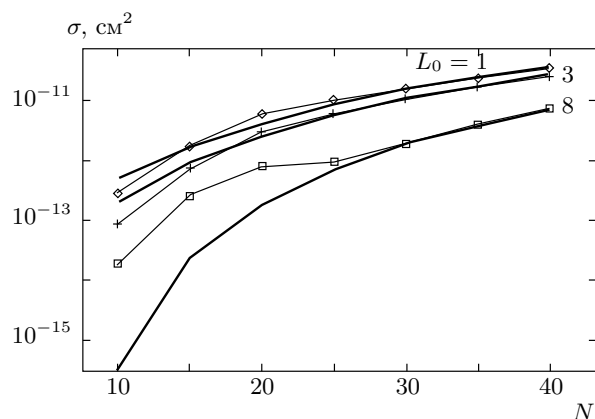


Рис. 14. Полные сечения тушения сферических состояний с моментами $L_0 = 1, 3, 8$ в зависимости от главного квантового числа $N = 10-40$. Толстые линии — результат метода квантовой интерференции, тонкие линии и символы — результаты решения системы адиабатических уравнений (73), (74); $v_{\text{Xe}} = 0.001$ ат.ед.

тенсивное заселение. Если учесть сдвиги этих уровней, то различие метода квантовой интерференции и адиабатического приближения существенно уменьшается, что было подтверждено пробным расчетом.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Размер нейтрального атома В, возмущающего одноэлектронный возбужденный атом, существенно меньше размера его орбиты. Однако свойства возбужденного атома, возмущенного атомом В, существенно отличаются от свойств невозмущенного атома, что обусловлено вырождением кулоновских уровней энергии. Например, абсолютная величина волновой функции активного состояния вблизи атома В существенно больше величин невозмущенных кулоновских функций, когда возмущающий атом В находится в классически разрешенной области. В данной статье этот эффект объясняется многократностью столкновений с атомом В электрона, рассматриваемого как классическая частица. Волновые функции ортогонализированных состояний также существенно отличны от невозмущенных волновых функций.

Найдено также, что интенсивности излучения фотонов из активных состояний существенно отличаются от интенсивностей излучения невозмущенных кулоновских состояний. Если возмущающий атом В находится в области классически разрешен-

ного движения электрона, то радиационные времена жизни более чем на порядок превосходят радиационные времена жизни невозмущенных возбужденных атомов. Если радиационные времена увеличиваются, то интенсивности излучения уменьшаются. При асимптотически больших удалениях атома В от кулоновского центра эти времена равны временам излучения параболических состояний с максимальным дипольным моментом.

Интенсивности излучения с переходами из отдельного сферического и отдельного параболического ортогонализированных состояний также существенно отличаются от интенсивностей излучения при переходах из невозмущенных кулоновских состояний.

Обнаружено также, что из-за вырождения кулоновских уровней энергии перемешивание орбитального момента L электрона в сферических состояниях происходит в результате квантовой интерференции адиабатических состояний и эффективные сечения этого перемешивания оказываются очень большими.

Энергии ортогонализированных состояний принимались равными энергии невозмущенных состояний, так как их волновые функции равны нулю при $\mathbf{r} = \mathbf{R}$. Однако факт наличия таких нулей у волновых функций приводит лишь к уменьшению абсолютной величины смещения энергии.

Работа проведена при финансовой поддержке Федерального агентства по науке и инновациям РФ в рамках Программы «Научные и педагогические кадры инновационной России» на 2009–2012 гг., а также гранта НШ-2457.2008.2 Президента РФ в рамках Программы поддержки ведущих научных школ.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для переходов без изменения главного квантового числа искомым матричный элемент можно записать в виде

$$X_{n_1, n_2, m}^{n'_1, n'_2, m-1} = \text{Nr} [J_1 J_3 + J_2 J_4], \quad (\text{A.1})$$

где

$$\text{Nr} = \frac{1}{2Z(m!)^2(m')^2} \times \sqrt{\frac{(n_1+m)!(n_2+m)!}{n_1!n_2!} \frac{(n'_1+m')!(n'_2+m')!}{n'_1!n'_2!}}. \quad (\text{A.2})$$

Матричные элементы величин $X = y \pm ix = r \sin \theta \exp(\pm i\varphi)$ одинаковы и отличны от нуля, если квантовое число m меняется на единицу,

$m \rightarrow m \pm 1$; поэтому изменение степеней множителей $(Z\mu/N)^{m/2}$ или $(Z\nu/N)^{m/2}$ у параболических волновых функций начального и конечного состояний равно $\pm 1/2$. Поскольку $r \sin \theta = \sqrt{\mu\nu}$, полные величины этих степеней равны целым числам, и интегралы в выражении (A.1) можно, используя элемент объема $d\mathbf{r} = [(\mu + \nu)/4]d\mu d\nu d\varphi$, записать в виде

$$J_1 = \int_0^\infty e^{-y} y^m {}_1F_1(-n_2; m+1; y) \times {}_1F_1(-n'_2; m; y) dy, \quad (\text{A.3})$$

$$J_2 = \int_0^\infty e^{-x} x^m {}_1F_1(-n_1; m+1; x) \times {}_1F_1(-n'_1; m; x) dx, \quad (\text{A.4})$$

$$J_3 = \int_0^\infty e^{-x} x^{m+1} {}_1F_1(-n_1; m+1; x) \times {}_1F_1(-n'_1; m; x) dx, \quad (\text{A.5})$$

$$J_4 = \int_0^\infty e^{-y} y^{m+1} {}_1F_1(-n_2; m+1; y) \times {}_1F_1(-n'_2; m; y) dy, \quad (\text{A.6})$$

где $x = Z\mu/N$, $y = Z\nu/N$. Параболические квантовые числа удовлетворяют соотношениям

$$n_1 + n_2 + m + 1 = N, \quad n'_1 + n'_2 + m' + 1 = N, \quad m' = m - 1.$$

Интегралы J_1, J_2 более простые. Вычислим J_1 , используя соотношение между вырожденными гипергеометрическими функциями 9.212.3 в справочнике [14]:

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; z) = \left(\frac{\alpha}{\gamma}\right) {}_1F_1(\alpha+1; \gamma+1; z) + \left(\frac{\gamma-\alpha}{\gamma}\right) {}_1F_1(\alpha; \gamma+1; z). \quad (\text{A.7})$$

Функция ${}_1F_1(-n'_2; m; y)$ в (A.3) преобразуется с помощью (A.7) к выражению

$${}_1F_1(-n'_2; m; y) = -\left(\frac{n'_2}{m}\right) {}_1F_1(-n'_2+1; m+1; y) + \left(\frac{n'_2+m}{m}\right) {}_1F_1(-n'_2; m+1; y). \quad (\text{A.8})$$

Подставляя это соотношение в формулу (A.3) и вводя в показатель экспоненты параметр λ ($\exp(-x) \rightarrow \exp(-\lambda x)$), который после вычисления интеграла будет устремлен к единице, $\lambda \rightarrow 1$, получаем для J_1 выражение

$$J_1(\lambda) = -\frac{n'_2}{m} \int_0^\infty e^{-\lambda y} y^m {}_1F_1(-n_2; m+1; y) \times \\ \times {}_1F_1(-n'_2+1; m+1; y) dy + \\ + \frac{n'_2+m}{m} \int_0^\infty e^{-\lambda y} y^m {}_1F_1(-n_2; m+1; y) \times \\ \times {}_1F_1(-n'_2; m+1; y) dy. \quad (A.9)$$

Оба эти интеграла совпадают с интегралом (f.9) в математических дополнениях книги [1]. Они легко вычисляются в случае, когда параметры γ двух вырожденных гипергеометрических функций одинаковы и на единицу больше величины степени m множителя y^m . Для получения именно таких подынтегральных выражений использовалось соотношение (A.7) для функций ${}_1F_1(\dots)$. Результат вычисления этих интегралов дается формулой (f.10) в математическом дополнении книги [1]. Например, второй интеграл в формуле (A.9) равен

$$J_{12}(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda y} y^m {}_1F_1(-n_2; m+1; y) \times \\ \times {}_1F_1(-n'_2; m+1; y) dy = m! \lambda^{-(n_2+n'_2+m+1)} \times \\ \times (\lambda-1)^{n_2+n'_2} \times \\ \times {}_2F_1(-n_2, -n'_2; m+1; (\lambda-1)^{-2}). \quad (A.10)$$

Поскольку все три параметра, α , β и γ , полной гипергеометрической функции ${}_2F_1(\dots)$ являются целыми числами (и это выполняется для всех квантовых состояний в кулоновском поле!), соответствующий этой функции многочлен можно записать в виде конечной суммы, все члены которой определяются факториалами целых чисел. Для интеграла (A.10) получаем выражение

$$J_{12}(\lambda) = m! \lambda^{-(n_2+n'_2+m+1)} \sum_{k=0}^{\min(n_2, n'_2)} \frac{n_2!}{(n_2-k)!} \times \\ \times \frac{n'_2!}{(n'_2-k)!} \frac{m!}{(m+k)!} \frac{(\lambda-1)^{n'_2+n_2-2k}}{k!}, \quad (A.11)$$

в котором каждый член суммы умножен на присутствующий в (A.10) перед функцией ${}_2F_1(\dots)$ множитель $(\lambda-1)^{n_2+n'_2}$.

Предел выражения (A.11) при $\lambda \rightarrow 1$ отличен от нуля только в случае равенства абсолютных величин двух первых параметров функции ${}_2F_1(\dots)$, т.е. чисел $n_2 = n'_2$ в формуле (A.11). При этом величина выражения (A.11) зависит только от последнего члена суммы, в котором степень множителя $\lambda-1$ равна в этом случае нулю: $n'_2+n_2-2k=0$.

Первый интеграл в формуле (A.9) вычисляется аналогично, и интеграл J_1 оказывается равным

$$J_1 = \frac{m!m'n_2!}{(n_2+m)!} \times \\ \times \begin{cases} (n_2+m), & n_2 = n'_2, \quad n_1 = n'_1 - 1, \\ -(n_2+1), & n_1 = n'_1, \quad n_2 = n'_2 - 1. \end{cases} \quad (A.12)$$

Аналогично вычисляется интеграл J_2 :

$$J_2 = \frac{m!m'n_1!}{(n_1+m-1)!} \times \\ \times \begin{cases} -\frac{n_1+1}{n_1+m}, & n_1 = n'_1 - 1, \\ 1, & n_1 = n'_1. \end{cases} \quad (A.13)$$

При других соотношениях между числами n_1, n'_1 интегралы J_1 и J_2 равны нулю. Так как интегралы J_1, J_2 присутствуют в разных слагаемых в формуле (A.1), выражение (A.1) отлично от нуля только при $n_1 = n'_1$ (когда $n_2 = n'_2 - 1$) и $n_1 = n'_1 - 1$ (когда $n_2 = n'_2$).

Интегралы J_3 и J_4 сложнее интегралов J_1 и J_2 . Они также могут быть вычислены с помощью интеграла (f.9) в математических дополнениях книги [1], но с помощью соотношения (A.7) каждый из них приводится к шести интегралам типа интеграла (A.10). Шесть этих интегралов отличны от нуля при четырех значениях числа n_1 :

$$n_1 = n'_1 - 2, \quad n_1 = n'_1 - 1, \quad n_1 = n'_1, \quad n_1 = n'_1 + 1,$$

но учитывать надо только те интегралы, которые, как и интегралы J_1 и J_2 , отличны от нуля при $n_1 = n'_1 - 1$ и $n_1 = n'_1$.

С помощью аналогичных вычислений произведения интегралов J_1J_3 и J_2J_4 оказались равными:

$$J_1 J_3 = -(m!)^2 (m'!)^2 \begin{cases} \frac{(3n_1 + 2m + 2)n_2!(n_1 + 1)!}{(n_2 + m - 1)!(n_1 + m)!}, & n_1 = n'_1 - 1, \\ \frac{(3n_1 + m + 1)n_1!(n_2 + 1)!}{(n_1 + m - 1)!(n_2 + m)!}, & n_1 = n'_1, \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

$$J_2 J_4 = -(m!)^2 (m'!)^2 \begin{cases} \frac{(3n_2 + m + 1)n_2!(n_1 + 1)!}{(n_2 + m - 1)!(n_1 + m)!}, & n_1 = n'_1 - 1, \\ \frac{(3n_2 + 2m + 2)n_1!(n_2 + 1)!}{(n_1 + m - 1)!(n_2 + m)!}, & n_1 = n'_1. \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Верхние строки этих выражений различаются лишь множителями $3n_1 + 2m + 2$ и $3n_2 + m + 1$, сумма которых равна $3N$. Нижние строки различаются также лишь аналогичными множителями, сумма которых также равна $3N$. Поэтому для искомой суммы произведений четырех интегралов получаем

$$J_1 J_3 + J_2 J_4 = -3N(m!)^2 (m'!)^2 \begin{cases} \frac{n_2!(n_1 + 1)!}{(n_2 + m - 1)!(n_1 + m)!}, & n_1 = n'_1 - 1, \\ \frac{n_1!(n_2 + 1)!}{(n_1 + m - 1)!(n_2 + m)!}, & n_1 = n'_1. \end{cases} \quad (\text{A.16})$$

Нормировочный множитель (A.2) при $m' = m - 1$ и значениях $n_1 = n'_1$ и $n_1 = n'_1 - 1$ преобразуется:

$$\text{Nr} = \frac{1}{2Z(m!)^2 (m'!)^2} \begin{cases} \frac{(n_1 + m)!(n_2 + m - 1)!}{n_2!(n_1 + 1)!} \sqrt{(n_1 + 1)(n_2 + m)}, & n_1 = n'_1 - 1, \\ \frac{(n_2 + m)!(n_1 + m - 1)!}{n_1!(n_2 + 1)!} \sqrt{(n_1 + m)(n_2 + 1)}, & n_1 = n'_1. \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

Произведение выражений (A.16) и (A.17) равно выражению (48) в основном тексте.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
2. М. И. Чибисов, А. М. Ермолаев, М. Шеркани, Ф. Бруйар, *ЖЭТФ* **117**, 313 (2000). M. I. Chibisov, Phys. Rev. Lett. **84**, 451 (2000); J. Phys. B **34**, 49 (2001).
3. М. И. Чибисов, *ЖЭТФ* **120**, 291 (2001); *УФН* **172**, 3 (2002).
4. M. I. Chibisov, A. A. Khuskivadze, and I. I. Fabrikant, J. Phys. B **35**, L193 (2002).
5. A. A. Khuskivadze, M. I. Chibisov, and I. I. Fabrikant, Phys. Rev. A **66**, 042709 (2002).
6. М. И. Чибисов, *ЖЭТФ* **132**, 1064 (2007).
7. И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов, *Сферодальные и кулоновские сферодальные функции*, Наука, Москва (1976).
8. Ю. Н. Демков, В. Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, изд-во ЛГУ, Ленинград (1975).
9. Т. М. Кереселидзе, М. И. Чибисов, *ЖЭТФ* **68**, 12 (1975); M. I. Chibisov and T. M. Kereselidze, Preprint IAE-5410/6, Moscow (1991); T. M. Kereselidze, I. L. Noselidze, and M. I. Chibisov, J. Phys. B **36**, 853 (2003).
10. О. Б. Фирсов, *ЖЭТФ* **21**, 1001 (1951).
11. V. S. Lebedev and I. L. Beigman, *Physics of Highly Excited Atoms and Ions*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1998).
12. V. S. Lebedev and I. I. Fabrikant, J. Phys. B **30**, 2649 (1997); **33**, 1521 (2000).
13. А. Омонт, J. Phys. **38**, 1343 (1977).
14. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматлит, Москва (1962).

15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Физматлит, Москва (1958).
16. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, Москва (1960).
17. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Физматгиз, Москва (1963).
18. L. Hostler and R. H. Pratt, *Phys. Rev. Lett.* **10**, № 11 (1963).
19. L. Hostler, *J. Math. Phys.* **5**, № 5 (1964).
20. W. Gordon, *Ann. Phys.* **2**, 1031 (1929).
21. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Релятивистская квантовая теория*, Наука, Москва (1968).
22. E. Fermi, *Nuovo Cim.* **11**, 157 (1934).
23. I. I. Fabrikant and M. I. Chibisov, *Phys. Rev. A* **61**, 022718 (2000).
24. Е. Е. Никитин, С. Я. Уманский, *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях*, Атомиздат, Москва (1979).
25. Р. В. Хемминг, *Численные методы*, Наука, Москва (1972).
26. С. К. Годунов, В. С. Рябенький, *Разностные схемы. Введение в теорию*, Наука, Москва (1973).
27. Б. Олдер, С. Фернбах, М. Ротенберг, *Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений*, Мир, Москва (1974).
28. В. С. Марченко, В. С. Лебедев, *ЖЭТФ* **84**, 1623 (1983).