

МЕТОД УЧЕТА ВИРТУАЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В КОНТИНУУМЕ В ТЕОРИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

С.А. Запрягаев^a, Н.Л. Манаков^b, С.И. Мармо^b, С.А. Свиридов^b

^a *Факультет компьютерных наук
Воронежского государственного университета*

^b *Физический факультет
Воронежского государственного университета*

СОДЕРЖАНИЕ

1. Нерелятивистские кулоновские функции Грина
2. Релятивистские кулоновские функции Грина
3. Расчет (дипольной) поляризуемости с обобщенным штурмовским разложением релятивистской кулоновской функции Грина
4. Возможные применения и трудности при использовании обобщенных штурмовских разложений

1. Нерелятивистские кулоновские функции Грина

- Матричные элементы

$$\mathcal{M} = \langle n_f l_f m_f | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) G_{E_n + \hbar\omega}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (\mathbf{e}' \cdot \mathbf{r}') | n_i l_i m_i \rangle . \quad (1)$$

- Парциальное разложение функции Грина:

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{LM} g_L(r, r'; E) Y_{LM}(\mathbf{r}/r) Y_{LM}^*(\mathbf{r}'/r') . \quad (2)$$

- Штурмовское разложение радиальной КФГ (а.е.):

$$g_l(E; r, r') = \frac{4}{\nu} (xx')^l e^{-\frac{x+x'}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k! L_k^{2l+1}(x) L_k^{2l+1}(x')}{\Gamma(k+2l+2)(k+l+1-\eta)}, \quad (3)$$

$$x = \frac{2r}{\nu}, \quad x' = \frac{2r'}{\nu}, \quad \nu = \frac{1}{\sqrt{-2(E+i0)}}, \quad \eta = Z\nu . \quad (4)$$

- Штурмовские функции

$$S_{kl}(2r/\nu) = \frac{2}{\nu} (2r/\nu)^l \exp(-r/\nu) L_k^{2l+1}(2r/\nu); \quad (5)$$

их разложение по функциям с масштабированным аргументом

$$S_{kl} \left(\frac{2r}{\nu} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{nk}(\beta) S_{nl} \left(\frac{2r}{\beta} \right). \quad (6)$$

- Обобщенное штурмовское разложение КФГ (симметричный ряд):
[Манаков и др. ЖЭТФ **119** (2001) 45].

$$\begin{aligned} g_l(E; r, r') &= \\ &= \frac{4\nu}{\beta^2} \left(\frac{2r}{\beta} \cdot \frac{2r'}{\beta'} \right)^l e^{-\frac{r}{\beta} - \frac{r'}{\beta'}} \sum_{k, k'=0}^{\infty} g_{kk'}^l(\nu; \beta, \beta') L_k^{2l+1} \left(\frac{2r}{\beta} \right) L_{k'}^{2l+1} \left(\frac{2r'}{\beta'} \right). \end{aligned} \quad (7)$$

- Ядро разложения $g_{kk'}^l$ при $\beta' = \beta$:

$$g_{kk'}^l(\nu; \beta, \beta) = \frac{\nu}{\Gamma(2l+2)} \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{k_{<}} {}_2F_1(-k_{<}, l+1-\eta; 2l+2; z) \times$$

$$\times \left(\frac{\beta^2 - \nu^2}{4\beta\nu} \right)^{k_{>}} \frac{k_{>}! {}_2F_1(k_{>}+1, k_{>}+2l+2; k_{>}+l+2-\eta; z^{-1})}{(l+1-\eta)_{k_{>}+1}},$$

$$k_{<} = \min(k, k'), \quad k_{>} = \max(k, k'), \quad z = -\frac{4\beta\nu}{(\beta - \nu)^2}. \quad (8)$$

Здесь β — свободный (произвольный) параметр!

- Ядро разложения $g_{kk'}^l$ при $\beta' \neq \beta$:

$$g_{kk'}^l(\nu; \beta, \beta') = f(\beta, \beta') \left[{}_2F_1(-k, l+1-\nu; 2l+2; z) \times \right. \\ \times F_1(l+1-\nu; -k', k'+2l+2; l+2-\nu; y, y') + \\ \left. + \sum_{p=1}^k C_p {}_2F_1(-k+p, l+1-\nu+p; 2l+2+p; z) \Phi_p^{l,k'} \right], \quad (9)$$

$$\Phi_p^{l,k'} \propto F_1(-p+1; -k', k'+2l+2; l+2+\nu-p; 1/(1-y), 1/(1-y')), \\ z = -\frac{4\beta\nu}{(\beta-\nu)^2}, \quad y = \frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} \frac{\beta'+\nu}{\beta'-\nu}, \quad y' = \frac{\beta-\nu}{\beta+\nu} \frac{\beta'-\nu}{\beta'+\nu}. \quad (10)$$

- Вычисление матричных элементов \mathcal{M} из (1):

выбор свободных параметров $\beta = n_f/Z$, $\beta' = n_i/Z$ и сведение L_k^c по рекурсии к ортонормированным $\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^c L_k^c(\rho) L_m^c(\rho) d\rho \sim \delta_{km}$.

- Обобщенное штурмовское разложение КФГ (несимметричный ряд) [Манаков и др. ТМФ 59 (1984) 49].

$$g_l(E; r, r') = \frac{4\nu}{\beta^2} e^{\frac{r-r'}{\nu} - \frac{2r}{\beta}} \left(\frac{2r}{\beta} \cdot \frac{2r'}{\beta}\right)^l \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{k'=0}^n \frac{k!}{(l+1-\eta)_{k+1}} \times$$

$$\times \frac{(l+1-\eta)_{k'}}{\Gamma(k'+2l+2)} \left(\frac{\beta-\nu}{\beta}\right)^{k-k'} L_k^{2l+1}(2r/\beta) L_{k'}^{2l+1}(2r'/\beta). \quad (11)$$

ОШР1 (7) при $\beta = \beta' = \nu$ и ОШР2 (11) при $\beta = \nu$ переходят в стандартное штурмовское разложение КФГ (3).

- ОШР функции Грина для модельного потенциала Фьюса следуют из ОШР КФГ при замене [Манаков и др, ЖЭТФ 132 (2007) 796]

$$l \rightarrow \lambda_l.$$

2. Релятивистские кулоновские функции Грина

- Парциальное разложение:

$$\begin{aligned}
 G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \sum_{k,m} G_{k,m}^{(E)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \\
 &= \sum_{k,m} \begin{pmatrix} G_{k,m}^{11}(r, r') \chi_m^k \chi_m^{k\dagger} & iG_{k,m}^{12}(r, r') \chi_m^k \chi_m^{-k\dagger} \\ iG_{k,m}^{21}(r, r') \chi_m^{-k} \chi_m^{k\dagger} & -G_{k,m}^{22}(r, r') \chi_m^{-k} \chi_m^{-k\dagger} \end{pmatrix} \quad (12)
 \end{aligned}$$

или [Манакон *et al*, Вестник ВГУ 1 (2000) 55.]

$$\begin{aligned}
 G_{k,m}^{(E)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \\
 &= \sum_{p=\pm 1} \frac{1}{2\lambda} \left[(\lambda + \varepsilon \kappa p) g_k(E; r, r') + i s g_k^{(1)}(E; r, r') (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n}) \right] p \theta_{k,m}^{(p)}(\mathbf{n}) \overline{\theta_{k,m}^{(p)}(\mathbf{n}')}, \quad (13)
 \end{aligned}$$

$$\kappa = |k|, \quad s = \text{sign}(k) = \pm 1, \quad \lambda = \sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}, \quad \varepsilon = E/m_e c^2.$$

- Штурмовские разложения радиальных кулоновских ф.Г.

Симметричная часть:

$$g_k(E; r, r') = \frac{4m_e}{\hbar^2 a_0 \nu} (xx')^{\lambda + \delta_s - 1} \times$$

$$\times e^{-(x+x')/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! L_n^{2\lambda+s}(x) L_n^{2\lambda+s}(x')}{\Gamma(n + 2\lambda + 2\delta_s)(n + d_s)}. \quad (14)$$

Несимметричная часть:

$$g_k^{(1)} = \frac{4m_e}{\hbar^2 a_0 \nu} \frac{\sqrt{1 - \varepsilon^2}}{\sqrt{xx'}} \left[\delta(x - x') + (xx')^\lambda \left(\frac{x}{x'}\right)^{s/2} \times \right.$$

$$\left. \times e^{-(x+x')/2} \sum_{n=(1-s)/2}^{\infty} \frac{(n + \delta_s)! L_{n+s}^{2\lambda-s}(x) L_n^{2\lambda+s}(x')}{\Gamma(n + 2\lambda + \delta_s)(n + d_s)} \right]. \quad (15)$$

Здесь

$$x = 2r/\nu a_0, \quad x' = 2r'/\nu a_0, \quad d_s = \lambda - \eta + \delta_s,$$

$$\nu = \alpha/\sqrt{1 - \varepsilon^2}, \quad \eta = \nu Z\varepsilon, \quad \delta_s = (s + 1)/2. \quad (16)$$

- Преобразование штурмовского ряда в $g_k(E; r, r')$.

1. Разложение полиномов Лагерра:

$$L_n^{2\lambda+s}(2r/\nu) \propto \sum_{m=0}^{\infty} (1-z)^{-\frac{n+m}{2}} {}_2F_1(-m, -n; 2\lambda+s+1; z) L_k^{2\lambda+s}(2r/\beta),$$

$$z = -\frac{4\beta\nu}{(\beta-\nu)^2}.$$
(17)

Промежуточный результат:

$$g_k(E; r, r') \propto \sum_{m, m'=0}^{\infty} g_{mm'}^k(E, \beta) L_m^{2\lambda+s}\left(\frac{2r}{\beta}\right) L_{m'}^{2\lambda+s}\left(\frac{2r'}{\beta}\right),$$

$$g_{mm'}^k(E, \beta) = \sum_n (1-z)^{-n} \frac{(2\lambda+s+1)_n}{n!(n+\lambda-\eta+\delta_s)} \times$$

$$\times {}_2F_1(-m, -n, 2\lambda+s+1; z) {}_2F_1(-m', -n, 2\lambda+s+1; z).$$
(18)

2. Дифференциальное представление одной из ${}_2F_1$ (ВТФ I):

$${}_2F_1(-m, -n, 2\lambda+2; z) = \frac{(1-z)^{m+n+2\lambda+s+1}}{(2\lambda+s+1)_m z^{2\lambda+s}} \frac{d^m}{dz^m} \left[\frac{z^{m+2\lambda+s}}{(1-z)^{n+2\lambda+s+1}} \right] \quad (19)$$

и элементарное тождество

$$(n + d_s + 1)^{-1} = \int_0^1 dt t^{n+d_s}. \quad (20)$$

Промежуточный результат:

$$g_{mm'}^k(E, \beta) \propto \frac{d^m}{dz^m} \sum_n \int_0^1 dt t^{n+d_s-1} \frac{(2\lambda+s+1)_n}{n!} \times$$

$$\times \frac{z^{m+2\lambda+s}}{(1-z)^{n+2\lambda+s+1}} {}_2F_1(-m', -n, 2\lambda+s+1; z_0) \Big|_{z_0=z}. \quad (21)$$

4. Сумма по n - это ряд для производящей функции ${}_2F_1$ (ВТФ I):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(c)_n}{n!} s^n {}_2F_1(-n, -m, c, z) = \frac{[1 - s(1 - z)]^m}{(1 - s)^{m+c}}, \quad (22)$$

так что (с заменой $t \rightarrow t \frac{1 - z_0}{1 - z}$ в интеграле):

$$g_{mm'}^k(E, \beta) \propto \left. \frac{d^m}{dz^m} [\varphi_m I_{m'}] \right|_{z_0=z}, \quad (23)$$

$$\varphi_m = z^{m+2\lambda+s} (1 - z)^{d_s - 2\lambda - s - 1}, \quad (24)$$

$$I_{m'} = \int_0^{(1-z_0)/(1-z)} dt t^{d_s-1} \frac{(1-t)^{m'}}{\left(1 - \frac{t}{1-z_0}\right)^{m'+2\lambda+s+1}}. \quad (25)$$

5. Дифференцирование произведения (23) с учетом исчезновения производных

$$\left. \frac{d^p}{dz^p} I_{m'} \right|_{z_0=z} = 0 \quad \text{при} \quad p \leq m' \quad (26)$$

и свойства симметрии

$$g_{mm'}^k(E, \beta) = g_{m'm}^k(E, \beta). \quad (27)$$

Окончательный результат:

$$\begin{aligned} g_{mm'}^k(E, \beta) &\propto \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^m {}_2F_1(-m, d_s; 2\lambda + s + 1; z) \times \\ &\times \frac{m'!}{(d_s)_{m'+1}} \left(\frac{\beta^2 - \nu^2}{4\beta\nu} \right)^{m'} {}_2F_1(m' + 1, m' + 2\lambda + s + 1; m' + d_s + 1; z^{-1}). \end{aligned} \quad (28)$$

- Обобщенное штурмовское разложение для $g_k^{(1)}(E; r, r')$.

$$g_k^{(1)}|_{s=1} \propto \left[\delta(x - x') + \sum_{m, m'=0}^{\infty} g_{mm'}^{(1), k>0} L_m^{2\lambda-1}(2r/\beta) L_{m'}^{2\lambda+1}(2r'/\beta) \right],$$

где $g_{mm'}^{(1), k>0}(E, \beta) \propto \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{m-1} F(-m, d-1; 2\lambda; z) \times$

$$\times \frac{m'!}{(d)_{m'+1}} \left(\frac{\beta^2 - \nu^2}{4\beta\nu} \right)^{m'} F(m'+1, m'+2\lambda+2; m'+d+1; z^{-1}) +$$

появился «довесок»!

$$+ z \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{m-m'} \sum_{p=m'+1}^m B_{p; m, m'}(\lambda) \times$$

$$\times F(-m+p, d-1+p; 2\lambda+p; z) F(-p+m'+1, -p-d+1; -p-2\lambda; z).$$

(29)

- Альтернативный способ (через квадрированное уравнение Дирака)

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \hat{\mathbf{K}} \mathcal{G}(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (30)$$

$$\hat{\mathbf{K}} = -\frac{1}{2m_e c^2} \left[c(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}) - m_e c^2 + \gamma^0 \left(-\frac{Z e^2}{r} - E \right) \right]. \quad (31)$$

— оператор квадрирования,

$$\mathcal{G}(E; \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_k g_k(E; r, r') \sum_{m,p} p \theta_{k,m}^{(p)}(\mathbf{n}) \overline{\theta_{k,m}^{(p)}(\mathbf{n}')}, \quad (32)$$

— функция Грина квадрированного уравнения.

«Довесков» не будет.

3. Расчет (дипольной) поляризуемости с ОШР рел. КФГ

[V. Yakhontov, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 093001.]

$$M = \langle \Psi_{n_0 k_0 m_0} | \gamma_0 z G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \gamma_0 z' | \Psi_{n_0 k_0 m_0} \rangle \quad (33)$$

$$\Psi_{n_0 k_0 m_0} = \begin{pmatrix} g \chi_{m_0}^{k_0} \\ i f \chi_{m_0}^{-k_0} \end{pmatrix} \quad (34)$$

$$g_{1s}(r) = C_\gamma r^{\gamma-1} e^{-Zr}, \quad f_{1s} = -\frac{\alpha Z}{1+\gamma} g_{1s},$$

$$\gamma = \sqrt{1 - (\alpha Z)^2}. \quad (35)$$

$$\langle g_{1s} | r g_k r | g_{1s} \rangle, \quad \langle g_{1s} | r g_k^{(1)} r | g_{1s} \rangle, \quad k = \pm 1, \pm 2. \quad (36)$$

$$\int_0^\infty dt t^{a-1} e^{-\beta t} L_m^{2\lambda+1}(xt) \propto F(-m, a, 2\lambda+2; x/\beta). \quad (37)$$

- Радиальный матричный элемент

$$\begin{aligned}
\langle g_{1s} | r g_k r | g_{1s} \rangle &\equiv \sum_{m, m'=0}^{\infty} A_{mm'} \propto \\
&\propto \sum_{m, m'=0}^{\infty} \frac{(2\lambda + s + 1)_m (2\lambda + s + 1)_{m'}}{m! m'} \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{m_{<}} F(-m_{<}, d_s; 2\lambda + s + 1; z) \times \\
&\times \frac{m_{>}!}{(d_s)_{m_{>}+1}} \left(\frac{\beta^2 - \nu^2}{4\beta\nu} \right)^{m_{>}} F(m_{>} + 1, m_{>} + 2\lambda + s + 1; m_{>} + d_s + 1; z^{-1}) \times \\
&\times F(-m, \gamma + \lambda + \delta_s + 2; 2\lambda + s + 1; \frac{2/\beta}{Z + 1/\beta}) \times \\
&\times F(-m', \gamma + \lambda + \delta_s + 2; 2\lambda + s + 1; \frac{2/\beta}{Z + 1/\beta}). \quad (38)
\end{aligned}$$

- Сходимость ряда $\sum_{m,m'=0}^{\infty} A_{mm'}$

Края матрицы ($m_{<} = \text{const}$, $m_{>} \rightarrow \infty$):

$$A_{mm'} \sim m_{>}^{\eta} \left[\frac{C_1}{m_{>}^{\gamma+3}} + m_{>}^{\gamma+1} \left(\frac{\beta - 1/Z}{\beta + 1/Z} \right)^{m_{>}} \right] \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{m_{>}}. \quad (39)$$

Диагональ матрицы ($m = m' \rightarrow \infty$):

$$A_{mm} \sim \left[\frac{C_1}{m^{\gamma+3}} + m^{\gamma+1} \left(\frac{\beta - 1/Z}{\beta + 1/Z} \right)^m \right]^2 \left[m^{2\eta} \left(\frac{\beta - \nu}{\beta + \nu} \right)^{2m} + C_2 \right]. \quad (40)$$

Выбор свободного параметра

$$\beta = \frac{1}{2} (\nu + 1/Z) \quad (41)$$

приводит к сходящемуся ряду при мнимых ν (т.е. при $E > m_e c^2$).

4. Другие варианты использования штурмовских разложений
КФГ уравнения Дирака.
Возможные применения и трудности.

Our publications

1. С.А.Запрягаев, Н.Л.Манаков, В.Г.Пальчиков. *Теория многозарядных ионов с одним и двумя электронами* // Энергоатомиздат, 1985.
2. С.А.Запрягаев. *Релятивистская теория многозарядных ионов* (докторская дисс.), 1997.
3. N.L.Manakov, S.A.Zapriagaev. *Dirac-Coulomb problem in the second-order Dirac equation approach* // Вестник ВГУ **1** (2000) 55.
4. Н.Л.Манаков, С.И.Мармо, А.Г.Файнштейн. *Аналитическое продолжение кулоновских функций Грина в область непрерывного спектра* // ТМФ **59** (1984) 49.
5. А.А.Крыловецкий, Н.Л.Манаков, С.И.Мармо. *Обобщенные штурмовские разложения кулоновской функции Грина* // ЖЭТФ **119** (2001) 45.