МЕТОД УЧЕТА ВИРТУАЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ В КОНТИНУУМЕ В ТЕОРИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

С. А. Запрягаев, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, С. А. Свиридов
Воронежский государственный университет
E-mail: marmo@phys.vsu.ru

Эффективный способ вычисления сумм по промежуточным состояниям, которые возникают в различных формулах, выражающих параметры взаимодействия атомной системы с внешним электромагнитным полем (например, поляризуемость атома), состоит в использовании явных выражений для атомной функции Грина (точнее, её радиальной части). Для кулоновской задачи с потенциалом

$$\varphi = -Z/r,$$

где Z — заряд ядра (в работе используются атомные единицы), известны различные представления функции Грина, наиболее удобным из которых при проведения численных расчетов является штурмовское разложение [1, 2] — ряд по полиномам Лагерра, выражающий радиальную часть кулоновской функции Грина (КФГ). Достоинствами штурмовского разложения является чисто дискретный спектр, факторизованная зависимость от радиальных переменных, удобство интегрирования по ним, быстрая сходимость рядов для матричных элементов, возникающих после вычисления радиальных интегралов. Недостаток штурмовского разложения состоит в том, что оно приводит к сходящемуся ряду для матричных элементов только в том случае, когда энергетический параметр функции Грина принадлежит дискретному спектру. Если же энергия функции Грина (хотя бы одной из функций Грина в матричных элементах высших порядков) лежит в области континуума, то штурмовские ряды оказываются расходящимися. Сказанное выше в равной мере относится к нерелятивистской и релятивистской кулоновской задачам. В работах авторов [3, 4] предложены преобразования нерелятивистской КФГ, позволяющие перенести технику расчетов со штурмовскими разложениями на класс задач, требующих использования функций Грина с энергиями в непрерывном спектре. В настоящей работе проводятся аналогичные преобразования релятивистской КФГ, что позволяет развить эффективный метод квантовоэлектродинамических расчетов взаимодействия многозарядных водородоподобных ионов с электромагнитным излучением при надпороговых энергиях фотонов. Актуальность таких расчетов обусловлена созданием источников интенсивного когерентного излучения высокой частоты (лазеры на свободных электронах, высшие гармоники оптических лазеров), открывающим, в частности, возможность экспериментального наблюдения упругого и неупругого рассеяния рентгеновского излучения, включая рассеяние на внутренних оболочках тяжелых атомов или многозарядных ионов.

В разд. 1 проведен обзор результатов для обобщенных штурмовских разложений нерелятивистских КФГ со свободными параметрами. В разд. 2 получено разложение релятивистской КФГ в двойной ряд по штурмовским функциям со свободным параметром. В разд. 3 найденное представление релятивистской КФГ использовано для расчета дипольной поляризуемости водородоподобных ионов.

1. Нерелятивистские кулоновские функции Грина

Рассмотрим для примера нерелятивистский матричный элемент двухфотонного дипольного перехода между состояниями $|n_i l_i m_i\rangle$ и $|n_f l_f m_f\rangle$ дискретного спектра водородоподобного иона:

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

определяющий, в частности, при $|n_i l_i m_i\rangle = |n_f l_f m_f\rangle$ сечение рэлеевского, а при $|n_i l_i m_i\rangle \neq |n_f l_f m_f\rangle$ сечение рамановского рассеяния света атомом. Его расчет основан на использовании парциального разложения функции Грина

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

позволяющем на основе стандартных методов квантовой теории углового момента [5] провести интегрирование по угловым переменным и свести задачу к вычислению радиальной части матричного элемента

$$M = \langle n_f l_f | \, r g_l(E; r, r') r' \, | n_i l_i \rangle \, . \tag{3}$$

Интегрирование по переменным r, r' удобно провести с использованием радиальной части КФГ $g_l(E)$ в виде ряда по полиномам Лагерра L_k^{2l+1}:

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

где

$$x = \frac{2r}{\nu}, \quad x' = \frac{2r'}{\nu}, \quad \nu = \frac{1}{\sqrt{-2(E+i0)}}, \quad \eta = Z\nu\ . \tag{5}$$

Ряд (4) представляет собой разложение $g_l(E;r,r')$ по собственным функциям

$$S_{kl}(2r/\nu) = \frac{2}{\nu}\,(2r/\nu)^l\, \exp(-r/\nu)\, L_k^{2l+1}(2r/\nu) \tag{6}$$

кулоновской задачи Штурма — Лиувилля, образующим полную систему. Очевидно, что разложение $g_l(E;r,r')$ может быть проведено и по штурмовским функциям с масштабированным аргументом. Раскладывая штурмовские функции из (4) по функциям S_{kl} с масштабированным аргументом,

$$S_{kl}\left(\frac{2r}{\nu}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{nk}(\beta)\, S_{nl}\left(\frac{2r}{\beta}\right), \quad S_{kl}\left(\frac{2r'}{\nu}\right) = \sum_{n'=0}^{\infty} c_{n'k}(\beta')\, S_{n'l}\left(\frac{2r'}{\beta'}\right), \tag{7}$$

получаем для КФГ выражение в виде двойного ряда

$$g_l(E;r,r') = \sum_{n,n'=0}^{\infty} g^l_{nn'}(E;\beta,\beta')\, S_{nl}(2r/\beta)\, S_{n'l}(2r'/\beta'), \tag{8}$$

в котором коэффициенты $g^l_{nn'}(E;\beta,\beta')$ сами выражаются через бесконечный ряд. С помощью достаточно нетривиальных преобразований $g^l_{nn'}$ удается свести к замкнутому выражению, которое в случае совпадающих параметров $\beta' = \beta$ представляет собой произведение гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1$:

$$\begin{aligned} g^l_{nn'}(E;\beta,\beta) = \frac{\nu}{\Gamma(2l+2)} \left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{n_<} {}_2F_1(-n_<, l+1-\eta; 2l+2; z)\times \\ \times \left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{n_>} \frac{n_>!\, {}_2F_1(n_>+1, n_>+2l+2; n_>+l+2-\eta; z^{-1})}{(l+1-\eta)_{n_>+1}}\ , \end{aligned} \tag{9}$$

где

$$n_< = \min(n,n'), \quad n_> = \max(n,n'), \quad z = -\frac{4\beta\nu}{(\beta-\nu)^2}. \tag{10}$$

При различающихся параметрах $\beta' \neq \beta$ ядро $g^l_{nn'}$ из (9) выражается через сумму произведений гипергеометрических функций Гаусса ${}_2F_1$ и Аппеля F_1:

$$
\begin{aligned}
& g^l_{nn'}(\nu;\beta,\beta') = f(\beta,\beta') \times \\
& \times \Big[\frac{{}_2F_1(-n, l{+}1{-}\eta; 2l{+}2; z)}{l+1-\eta} F_1(l+1-\eta, -n', n'+2l+2, l+2-\eta; y, y') + \\
& + \sum_{p=1}^{n} C^p_n (-z)^p \frac{{}_2F_1(-n{+}p, l{+}1{-}\eta{+}p; 2l{+}2{+}p; z)}{(2l+2)_p} \Phi^{l,n'}_p \Big] \,. \qquad (11)
\end{aligned}
$$

Здесь

$$
f(\beta,\beta') = \frac{2^{4l+4}}{\Gamma(2l+2)} \frac{1}{\nu^{2l+1}(\beta\beta')^{l+1}} \frac{\left(\frac{1}{\nu}-\frac{1}{\beta}\right)^n}{\left(\frac{1}{\nu}+\frac{1}{\beta}\right)^{n+2l+2}} \frac{\left(\frac{1}{\nu}-\frac{1}{\beta'}\right)^{n'}}{\left(\frac{1}{\nu}+\frac{1}{\beta'}\right)^{n'+2l+2}}, \qquad (12)
$$

$$
\begin{aligned}
\Phi^{l,n'}_p \;\; = \;\; & -\frac{(l+2+\eta-p)_{p-1}(1-y)^{n'}}{(1-y')^{n'+2l+2}} \times \\
& \times F_1(-p+1, -n', n'+2l+2, l+2+\eta-p; 1/(1-y), 1/(1-y')) \,,
\end{aligned}
$$

$$
y = \frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\,\frac{\beta'+\nu}{\beta'-\nu}, \quad y' = \frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\,\frac{\beta'-\nu}{\beta'+\nu}\,,
$$

C^p_n – биномиальный коэффициент.

Хотя обобщенное штурмовское разложение КФГ (8) оказывается более сложным, чем стандартное разложение (4) (двойной ряд вместо однократного со сложными коэффициентами (9) или (11) при произведении штурмовских функций), однако наличие в нем свободных (произвольных) параметров β, β', которые можно выбирать в соответствии со спецификой задачи, и факторизация зависимости $g_l(E;r,r')$ от энергии и радиальных переменных придают ему значительную гибкость. В частности, матричный элемент (3) удается вычислить аналитически [4]. Для этого следует в (8) положить $\beta = n_f/Z$, $\beta' = n_i/Z$ и, используя рекуррентные соотношения для полиномов Лагерра, свести интегралы по радиальным переменным к интегралам, фигурирующим в условии ортогональности полиномов Лагерра

$$
\int\limits_0^\infty e^{-\rho}\rho^\alpha L^\alpha_n(\rho) L^\alpha_m(\rho)\, d\rho = \frac{\Gamma(\alpha+n+1)}{n!}\delta_{mn} \,. \qquad (13)
$$

В результате матричные элементы (3) выражаются в виде линейной комбинации не более чем четырех коэффициентов $g^l_{nn'}$ с индексами n, n', значения которых определяются квантовыми числами n_i, l_i, n_f, l_f, l (двухфотонные формулы Гордона). Составные матричные элементы, имеющие порядок выше второго, рассчитать аналитически не удается, однако представление (8) КФГ позволяет получить для них сходящиеся в надпороговой области ряды меньшей кратности, чем получающиеся при использовании стандартного разложения (4). Так, матричные элементы четвертого порядка, через которые выражается гиперполяризуемость водорода, представляется двукратным рядом, хорошо сходящимся в интервале энергий фотонов от припороговой области до десятков потенциалов ионизации [6].

Приведем здесь также еще одно обобщенное штурмовское разложение КФГ со свободным параметром [3]:

$$\begin{aligned} g_l(E; r, r') =& \nu e^{\frac{r}{\nu} - \frac{r}{\beta} - \frac{r'}{\nu} + \frac{r'}{\beta}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{(l+1-\nu)_{n+1}} \left(\frac{\beta-\nu}{\beta}\right)^n S_{nl}(2r/\beta) \times \\ & \times \sum_{n'=0}^{n} \frac{(l+1-\nu)_{n'}}{(n'+2l+1)!} \left(\frac{\beta}{\beta-\nu}\right)^{n'} S_{n'l}(2r'/\beta)\,. \end{aligned} \tag{14}$$

Поскольку внутренняя сумма в (14) конечна и зависит от индекса суммирования n только на верхнем пределе, то использование данного представления КФГ требует практически такого же объема вычислений, как и использование стандартного штурмовского разложения (4), однако наличие свободного параметра β в (14) позволяет обеспечить сходимость составных матричных элементов при энергиях функций Грина, принадлежащих континууму.

2. Релятивистская кулоновская функция Грина

Напомним, что общая схема расчетов релятивистских матричных элементов аналогична нерелятивистской и основана на мультипольном разложении функций и операторов и интегрированию по спин-угловым переменным. Однако в отличие от разложения нерелятивистской КФГ (2), парциальное разложение релятивистской функции Грина (которая представляет собой матрицу 4×4 по спинорным индексам) можно провести по-разному. Обычно [7, 8] используется разложение

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{k,m} G^{(E)}_{k,m}(\mathbf{r},\mathbf{r}') =$$
$$= \sum_{k,m} \begin{pmatrix} G^{11}_{k,m}(r,r')\chi^k_m\chi^{k\,\dagger}_m & iG^{12}_{k,m}(r,r')\chi^k_m\chi^{-k\,\dagger}_m \\ iG^{21}_{k,m}(r,r')\chi^{-k}_m\chi^{k\,\dagger}_m & -G^{22}_{k,m}(r,r')\chi^{-k}_m\chi^{-k\,\dagger}_m \end{pmatrix} \tag{15}$$

по спинорам χ^k_m, являющихся собственными функциями спин-углового оператора Дирака (ниже используются стандартные обозначения релятивистской квантовой теории) $\hat{\mathcal{K}} = -(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{l})/\hbar - 1$. Спектр оператора Дирака состоит из набора положительных и отрицательных целых чисел, не равных нулю: $k = \pm 1, \pm 2, \ldots$. В настоящей работе мы используем разложение функции Грина не по спинорам χ^k_m, как в (15), а по биспинорам $\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n})$, являющихся собственными функциями оператора Джонсона $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{K}} - i\alpha Z(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{n})$, поскольку это приводит к более компактным выражениям для радиальных частей функции Грина.

Биспиноры $\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n})$ возникают естественным образом при решении квадрированного уравнения Дирака. Так, функция Грина $\mathcal{G}(E;\mathbf{r},\mathbf{r}^{'})$ квадрированного уравнения Дирака представляется парциальным рядом

$$\mathcal{G}(E;\mathbf{r},\mathbf{r}^{'}) = \sum_k g_k(E;r,r^{'}) \sum_{m,p} p\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n})\overline{\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n}')}. \tag{16}$$

Вычисляя действие оператора квадрирования

$$\hat{\mathbf{K}} = -\frac{1}{2m_e c^2}\left[c(\boldsymbol{\gamma}\cdot\hat{\mathbf{p}}) - m_e c^2 + \gamma^0\left(-\frac{Ze^2}{r} - E\right)\right] \tag{17}$$

на $\mathcal{G}(E;\mathbf{r},\mathbf{r}^{'})$:

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \hat{\mathbf{K}}\mathcal{G}(E;\mathbf{r},\mathbf{r}^{'}), \tag{18}$$

находим функцию Грина $G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ уравнения Дирака первого порядка в виде

$$G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}') =$$
$$= \sum_{k,m}\sum_p \frac{1}{2\lambda}\left[(\lambda+\varepsilon\kappa p)g_k(E;r,r') + i\,s\,g^{(1)}_k(E;r,r')(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{n})\right] p\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n})\overline{\theta^{(p)}_{k,m}(\mathbf{n}')}. \tag{19}$$

Здесь

$$\kappa = |k|, \quad s = \mathrm{sign}(k) = \pm 1, \quad \lambda = \sqrt{\kappa^2 - (\alpha Z)^2}, \quad \varepsilon = E/m_e c^2, \tag{20}$$

k, m принимают те же значения, что и в (15), а $p = \pm 1$.

Учитывая связь биспиноров $\theta_{k,m}^{(p)}$ со спинорами χ_m^k [9]

$$\theta_{k,m}^{(p)} = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \begin{pmatrix} \sqrt{\kappa + p\lambda}\ \chi_m^{kp} \\ i\, ps\sqrt{\kappa - p\lambda}\ \chi_m^{-kp} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\kappa + p\lambda}{2\lambda}} \begin{pmatrix} \chi_m^{kp} \\ i\, s\frac{\alpha Z}{\kappa p + \lambda}\ \chi_m^{-kp} \end{pmatrix}, \tag{21}$$

можно найти явные выражения радиальных частей $G^{11}, G^{12}, G^{21}, G^{22}$ из (15) в виде линейных комбинаций g_k и $g_k^{(1)}$.

Радиальная функция g_k имеет штурмовское разложение, аналогичное (4) [9]:

$$\begin{aligned} g_k(E; r, r') = {} & \frac{4m_e}{\hbar^2 a_0 \nu} (xx')^{\lambda + \delta_s - 1} \times \\ & \times e^{-(x+x')/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n\,! L_n^{2\lambda+s}(x) L_n^{2\lambda+s}(x')}{\Gamma(n + 2\lambda + 2\delta_s)(n + d_s)}; \end{aligned} \tag{22}$$

штурмовское разложение радиальной функции $g_k^{(1)}$ дается несимметричным рядом [9]:

$$\begin{aligned} g_k^{(1)}(E; r, r') = {} & \frac{4m_e}{\hbar^2 a_0 \nu} \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}}{\sqrt{xx'}} \Bigg[\delta(x - x') + (xx')^{\lambda} \left(\frac{x'}{x} \right)^{s/2} \times \\ & \times e^{-(x+x')/2} \sum_{n=(1-s)/2}^{\infty} \frac{(n+\delta_s)!\, L_{n+s}^{2\lambda-s}(x) L_n^{2\lambda+s}(x')}{\Gamma(n + 2\lambda + \delta_s)(n + d_s)} \Bigg]. \end{aligned} \tag{23}$$

Здесь $\quad x = 2r/\nu a_0, \quad x' = 2r'/\nu a_0, \quad d_s = \lambda - \eta + \delta_s, \quad a_0 = \hbar^2/m_e e^2,$

$$\nu = \alpha/\sqrt{1-\varepsilon^2}, \quad \eta = \nu Z \varepsilon, \quad \delta_s = (s+1)/2, \tag{24}$$

$\alpha = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры.

Преобразуем ряды (22), (23) так, чтобы ввести в них свободный параметр. Рассмотрим сначала функцию g_k. Разложение полиномов Лагерра из (22), соответствующее (7), имеет вид (опущенные в промежуточных выражениях общие множители восстановим в окончательном результате)

$$\begin{aligned} & L_n^{2\lambda+s}(2r/\nu) \propto \sum_{m=0}^{\infty} (1-z)^{-\frac{n+m}{2}}\, {}_2F_1(-m, -n; 2\lambda + s + 1; z) L_k^{2\lambda+s}(2r/\beta), \\ & z = -\frac{4\beta\nu}{(\beta - \nu)^2}. \end{aligned} \tag{25}$$

Подставляя (25) (с одинаковыми параметрами β в обоих полиномах Лагерра) в (22), получим следующий промежуточный результат

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

где ядро разложения

$$g^k_{mm'}(E,\beta) = \sum_{n=0}^{\infty}(1-z)^{-n}\frac{(2\lambda+s+1)_n}{n!(n+\lambda-\eta+\delta_s)}\times$$
$$\times\, {}_2F_1(-m,-n,2\lambda+s+1;z){}_2F_1(-m',-n,2\lambda+s+1;z). \qquad (26)$$

Чтобы привести $g^k_{mm'}$ к замкнутому виду, представим одну из гипергеометрических функций в (26) в дифференциальной форме [10]:

$${}_2F_1(-m,-n,2\lambda{+}2;z){=}\frac{(1{-}z)^{m+n+2\lambda+s+1}}{(2\lambda{+}s{+}1)_m z^{2\lambda+s}}\frac{d^m}{dz^m}\left[\frac{z^{m+2\lambda+s}}{(1{-}z)^{n+2\lambda+s+1}}\right]. \quad (27)$$

Используя также элементарное тождество

$$(n+d_s+1)^{-1} = \int_0^1 dt\; t^{n+d_s}, \qquad (28)$$

получим для $g^k_{mm'}$ следующее выражение (z_0 надо положить равным z после дифференцирования)

$$g^k_{mm'}(E,\beta) \propto \frac{d^m}{dz^m}\sum_n \int_0^1 dt t^{n+d_s-1}\frac{(2\lambda+s+1)_n}{n!}\times$$
$$\times\, \frac{z^{m+2\lambda+s}}{(1-z)^{n+2\lambda+s+1}}{}_2F_1(-m',-n,2\lambda+s+1;z_0)\bigg|_{z_0=z}, \qquad (29)$$

в котором сумма по n сворачивается в производящую функцию для ${}_2F_1$ [10]. Заменяя в (29) переменную интегрирования $t \to t\frac{1-z_0}{1-z}$, приходим к выражению

$$g^k_{mm'}(E,\beta) \propto \frac{d^m}{dz^m}\left[\varphi_m I_{m'}\right]\bigg|_{z_0=z}, \qquad (30)$$

где первый множитель представляет собой произведение степеней z и $1-z$,

$$\varphi_m = z^{m+2\lambda+s}(1-z)^{d_s-2\lambda-s-1}, \qquad (31)$$

а второй — интеграл

$$I_{m'} = \int\limits_{0}^{(1-z_0)/(1-z)} dt t^{d_s-1} \frac{(1-t)^{m'}}{(1-\frac{t}{1-z_0})^{m'+2\lambda+s+1}}, \tag{32}$$

зависящий от z только на верхнем пределе. Интеграл $I_{m'}$ при $z_0 = z$ дает ${}_2F_1$

$$I_{m'}\bigg|_{z_0=z} = \frac{\Gamma(d_s)\Gamma(m'+1)}{\Gamma(d_s+m'+1)} {}_2F_1(m'+2\lambda+s+1, m'+1; d_s+m'+1; 1/(1-z)). \tag{33}$$

Из явного вида (32) следует, что

$$\frac{d^m}{dz^m} I_{m'}\bigg|_{z_0=z} = 0 \qquad \text{при} \qquad m = 1, 2, \ldots m'.$$

В силу симметрии выражения (26) в нём можно преобразовывать как первую, так и вторую гипергеометрическую функцию, поэтому всегда есть возможность избавиться от производных I_m (или $I_{m'}$) в (30). Вводя обозначения

$$m_< = \min(m, m'), \qquad m_> = \max(m, m')$$

и восстанавливая общие множители, получим окончательное выражение для g_k:

$$g_k(E; r, r') = \sum_{mm'} g^k_{mm'} S_{m,\lambda+(s-1)/2}(2r/\beta a_0) S_{m',2\lambda+(s-1)/2}(2r'/\beta a_0), \tag{34}$$

где

$$g^k_{mm'} = \frac{m_e \nu}{\hbar^2 a_0} \frac{1}{\Gamma(2\lambda+s+1)} \left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{m_<} F(-m_<, d_s; 2\lambda+s+1; z) \times$$
$$\times \frac{m_>!}{(d_s)_{m_>+1}} \left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{m_>} F(m_>+1, m_>+2\lambda+s+1; m_>+d_s+1; z^{-1}), \tag{35}$$

$$S_{m,\lambda+(s-1)/2}\left(\frac{2r}{\beta a_0}\right) = \frac{2}{\beta}\left(\frac{2r}{\beta a_0}\right)^{\lambda+\delta_s-1} e^{-r/\beta a_0} L_m^{2\lambda+s}\left(\frac{2r}{\beta a_0}\right). \tag{36}$$

Рассмотрим теперь преобразование радиальной функции $g_k^{(1)}$. Отсутствие симметрии по индексам полиномов Лагерра в штурмовском ряде (23) приводит к усложнениям по сравнению с преобразованием g_k. Так, чтобы получить замкнутое выражение для ядра в разложении

$$\sum_{m,m'=0}^{\infty} g_{mm'}^{(1),k}(E,\beta)\, L_m^{2\lambda-s}\left(\frac{2r}{\beta a_0}\right)\, L_{m'}^{2\lambda+s}\left(\frac{2r'}{\beta a_0}\right),$$

необходимо в общем члене для $g_{mm'}^{(1),k}$ записать через производную (см. (27)) вполне определенную функцию ${}_2F_1$ (а не любую из двух, как в в (26)), поэтому производную произведения, аналогичную (30), не удается выразить через один член. Опуская вычисления, в остальном вполне аналогичные проделанным выше, приведем окончательный результат для случая $s=1$:

$$\begin{aligned}
&g_k^{(1)}(E;r,r') = \frac{4m_e}{\hbar^2 a_0 \nu}\sqrt{1-\varepsilon^2}\times\\
&\times\left\{\frac{\delta(x-x')}{\sqrt{xx'}} - \frac{\nu^2}{4}\frac{1}{\Gamma(2\lambda)}\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\sum_{mm'}\left[\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^m {}_2F_1(-m,d-1;2\lambda;z)\times\right.\right.\\
&\times\frac{m'!\Gamma(d)}{\Gamma(m'+d+1)}\left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{m'} {}_2F_1(m'+2\lambda+2,m'+1;m'+d+1;z^{-1})-\\
&-\frac{4\beta\nu}{(\beta-\nu)^2}\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{m-m'}\frac{1}{(2\lambda)_m}\times\\
&\times\sum_{p=m'+1}^{m} C_m^p (p+2\lambda)_{m-p}\, {}_2F_1(-m+p,d-1+p,2\lambda+p;z)\times\\
&\left.\times C_{p-1}^{m'} m'!(-p-2\lambda)_{p-m'-1}\, {}_2F_1(-p+m'+1,-p-d+1;-p-2\lambda;z)\right]\times\\
&\left.\times S_{m,\lambda-1}\left(\frac{2r}{\beta}\right) S_{m',\lambda}\left(\frac{2r'}{\beta}\right)\right\}.
\end{aligned} \tag{37}$$

Функция $g_k^{(1)}(E;r,r')$ для $s=-1$ получается из (37) при перестановке r и r'.

Для проверки вычислений был найден предел $\beta\to\nu$ в (34) и (37). В (37) в этом случае остаются ненулевыми только члены с $m'=m-1$, и двойной ряд (37) переходит в исходный однократный ряд (23). При этом обращение в нуль членов ряда с $m'\le m-2$ происходит в результате компенсации «основного» и «довесочных» слагаемых в (37) (по отдельности остающихся конечными), в которой мы убедились, рассматривая частные случаи (для нескольких членов суммы с малыми m,m'). Вычисление предела $\beta\to\nu$ в (34) не вызывает затруднений и приводит к ряду (22).

Итак, мы нашли обобщенные штурмовские разложения радиальных частей g_k и $g_k^{(1)}$ релятивистской КФГ с одним свободным параметром, аналогичные нерелятивистскому разложению (8) (с $\beta' = \beta$). Из (37) видно, что в $g_k^{(1)}(E; r, r')$, в отличие от $g_k(E; r, r')$, наряду с членом, который выражается через полную гипергеометрическую функцию, содержит также «довесочные» слагаемые (сумму по p), выражающиеся через произведения гипергеометрических полиномов. Довесочные члены несколько загромождают вычисления и затрудняют аналитическое исследование сходимости матричных элементов, вычисленных с функцией (37). Заметим поэтому, что, возможно, к более удобному представлению (во всяком случае, не содержащему довесочных членов) релятивистской КФГ можно прийти, если подействовать оператором квадрирования в (18) на функцию $\mathcal{G}$ (16) с радиальной частью в виде обобщенного штурмовского разложения (34). Полезным в расчетах может быть также представление релятивистской КФГ, аналогичное нерелятивистскому представлению (14). Соответствующие формы релятивистской КФГ мы планируем получить в дальнейшем.

3. Расчет дипольной поляризуемости с обобщенным штурмовским разложением релятивистской КФГ

Формула для скалярной динимической поляризуемости H-подобного иона:

Полученное в предыдущем разделе представления КФГ позволяет достаточно легко рассчитать дипольную поляризуемость многозарядного иона во внешнем лазерном поле, используя релятивистские функции атомных состояний и релятивистскую КФГ. Хотя такой расчет поляризуемости не является последовательным, поскольку не учитывает релятивистские поправки, обусловленные пространственной неоднородностью электромагнитного поля, однако он служит хорошим тестом для развиваемого метода.

Релятивистская дипольная поляризуемость водородоподобного иона в состоянии $|n_0 k_0 m_0\rangle$ определяется матричными элементами второго порядка следующего вида

$$\mathcal{M} = \langle \Psi_{n_0 k_0 m_0} | \gamma^0 z G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \gamma^0 z | \Psi_{n_0 k_0 m_0} \rangle , \tag{38}$$

где волновые функции являются биспинорами

$$\Psi_{n_0k_0m_0}(r) = \begin{pmatrix} g\chi^{k_0}_{m_0} \\ if\chi^{-k_0}_{m_0} \end{pmatrix}. \tag{39}$$

В общем случае выражения для матричных элементов $\mathcal{M}$ оказываются достаточно громоздкими и поляризуемости состояний $|n_0k_0m_0\rangle$. Наиболее прост расчет поляризуемости основного состояния в линейно поляризованном поле. В этом случае декартов тензор поляризуемости имеет только скалярную часть, а большая g и малая f компоненты в (39) даются элементарными выражениями и отличаются лишь множителем, не зависящим от координаты

$$\begin{aligned} g_{1s}(r) &= \left(\frac{2Z}{a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{1+\gamma}{2\Gamma(1+2\gamma)}}\left(\frac{2Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{a_0}}, \\ f_{1s} &= -\frac{\alpha Z}{1+\gamma}g_{1s}, \qquad \gamma = \sqrt{1-(\alpha Z)^2}. \end{aligned} \tag{40}$$

Проводя стандартным образом интегрирование по угловым и суммирование по спиновым переменным, выразим поляризуемость через радиальные матричные элементы с функциями g_k и $g_k^{(1)}$:

$$\langle g_{1s}|\, r g_k r\, |g_{1s}\rangle\,, \qquad \langle g_{1s}|\, r g_k^{(1)} r\, |g_{1s}\rangle\,, \tag{41}$$

причем в соответствии с правилами отбора индекс k принимает значения

$$k = \pm 1, \pm 2.$$

Используя для радиальных КФГ представления (34) и (37) и проводя интегрирование по радиальным переменным с помощью формулы [10]

$$\int_0^\infty dt t^{a-1}e^{-\beta t}L_k^{2\lambda+1}(xt) = \frac{\Gamma(a)}{x^a}\frac{(2\lambda+2)_k}{k!}\,{}_2F_1(-k, a, 2\lambda+2; x/\beta), \tag{42}$$

приведем радиальный матричный элемент с функцией g_k к виду

$$\langle g_{1s}|\, r g_k r \,|g_{1s}\rangle \equiv \sum_{m,m'=0}^{\infty} A_{mm'} \propto$$
$$\propto \sum_{m,m'=0}^{\infty} \frac{(2\lambda+s+1)_m}{m!}\frac{(2\lambda+s+1)_{m'}}{m'!}\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{m_<} {}_2F_1(-m_<, d_s; 2\lambda+s+1; z)\times$$
$$\times \frac{m_>!}{(d_s)_{m_>+1}}\left(\frac{\beta^2-\nu^2}{4\beta\nu}\right)^{m_>} {}_2F_1(m_>+1, k_>+2\lambda+s+1; m_>+d_s+1; z^{-1})\times$$
$$\times\, {}_2F_1(-m, \gamma+\lambda+\delta_s+2; 2\lambda+s+1; \frac{2/\beta}{Z+1/\beta})\times$$
$$\times\, {}_2F_1(-m', \gamma+\lambda+\delta_s+2; 2\lambda+s+1; \frac{2/\beta}{Z+1/\beta}). \tag{43}$$

Чтобы выяснить вопрос о сходимости двойного ряда (43), необходимо исследовать поведение его далеких членов, что сводится к поиску асимптотик гипергеометрических функций ${}_2F_1$ в (43). При этом [10]

$$\begin{aligned}&{}_2F_1(m_>+1, m_>+2\lambda+s+1; m_>+d_s+1; z^{-1}) =\\ &= (1-1/z)^{-m_>-2\lambda-s-1+d_s}{}_2F_1(d_s, d_s-2\lambda-s; m_>+d_s+1; z^{-1}) \sim\\ &\sim (1-1/z)^{-m_>} \qquad \text{при} \qquad m_> \to \infty,\end{aligned}$$

а асимптотика ${}_2F_1(-m, b; c; z)$ при $m\to\infty$ найдена в [3]. В результате удается найти асимптотику $A_{mm'}$ на краях матрицы:

$$A_{mm'} \sim m_>^{\eta}\left[\frac{C_1}{m_>^{\gamma+3}} + m_>^{\gamma+1}\left(\frac{\beta-1/Z}{\beta+1/Z}\right)^{m_>}\right]\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{m_>}$$
$$\text{при} \qquad m_>\to\infty, \quad m_< \sim \text{const}; \tag{44}$$

и на диагонали матрицы:

$$A_{mm} \sim \left[\frac{C_1}{m^{\gamma+3}} + m^{\gamma+1}\left(\frac{\beta-1/Z}{\beta+1/Z}\right)^{m}\right]^2\left[k^{2\eta}\left(\frac{\beta-\nu}{\beta+\nu}\right)^{2m} + C_2\right]$$
$$\text{при} \qquad m\to\infty. \tag{45}$$

При использовании стандартного штурмовского разложения (т.е при $\beta = \nu$) ряды для матричных элементов являются однократными (чему соответствует обращение в ноль $A_{mm'}|_{\beta=\nu}$ в (44)):

$$\langle g_{1s}|\, r g_k r \,|g_{1s}\rangle = \sum_m A_{mm}. \tag{46}$$

Как видно из (45),

$$A_{mm}|_{\beta=\nu} \sim \left[\frac{C_1}{m^{\gamma+3}} + m^{\gamma+1}\left(\frac{\nu - 1/Z}{\nu + 1/Z}\right)^m\right]^2 \qquad \text{при} \qquad m \to \infty.$$

Учитывая, что при вещественных значениях ν (т.е. при энергии функции Грина из области дискретного спектра, $E < m_e c^2$)

$$\left|\frac{\nu - 1/Z}{\nu + 1/Z}\right| < 1,$$

а $\gamma < 0$ (см. (40)) видим, что ряд (46) сходится.

Если же энергия функции Грина принадлежит непрерывному спектру ($E > m_e c^2$), то $\nu = i|\nu|$. В этом случае

$$\left|\frac{\nu - 1/Z}{\nu + 1/Z}\right| = 1,$$

ряд (46) расходится как $m^{2\gamma+2}$, так что вычислить матричный элемент $\langle g_{1s}|\, r g_k r \,|g_{1s}\rangle$ используя стандартное штурмовское разложение (22) не удается.

Иная ситуация возникает при использовании обобщенного штурмовского разложения (34). В этом случае выбирая, например, свободный параметр равным

$$\beta = \frac{1}{2}\left(\nu + 1/Z\right), \tag{47}$$

мы обеспечиваем, как это видно (44), (45), убывание членов ряда как на диагонали, так и на краях матрицы и сходимость ряда. Численные расчеты показывают, что выбор свободного параметра в соответствии с (47) обеспечивает также сходимость ряда для матричного элемента $\langle g_{1s}|\, r g_k^{(1)} r \,|g_{1s}\rangle$.

Используя разложения (34), (37) мы рассчитали дипольную поляризуемость многозарядных ионов в широком интервале частот от припороговых значений до десятков потенциалов ионизации. При этом достигнуто хорошее согласие с результатами работы [11] (представленными в виде графиков) для поляризуемости водородоподобных ионов с зарядом ядра $Z = 1, 60, 100$. Полученные результаты позволяют предположить, что найденное в работе обобщенное штурмовское разложение дает основу эффективного метода учета виртуальных переходов в многозарядных ионах при надпороговых значениях энергетического параметра в функции Грина.

Список литературы

1. L. Hostler, J. Math. Phys. **11**, 2966 (1970).

2. Л.П. Рапопорт, Б.А. Зон, Н.Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах*, Атомиздат, Москва (1978).

3. Н.Л. Манаков, С.И. Мармо, А.Г. Файнштейн, ТМФ **59**, 49 (1984).

4. А.А. Крыловецкий, Н.Л. Манаков, С.И. Мармо, ЖЭТФ **119**, 45 (2001).

5. Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).

6. Н.Л. Манаков, С.И. Мармо, Е.А. Пронин, ЖЭТФ **125**, 288 (2004).

7. С.А. Запрягаев, Н.Л. Манаков, В.Г. Пальчиков, *Теория многозарядных ионов с одним и двумя электронами*, Энергоатомиздат, , Москва (1985).

8. Л.Н. Лабзовский, *Теория атома. Квантовая электродинамика электронных оболочек и процессы излучения*, Наука. Физматлит, Москва (1996).

9. N.L. Manakov, S.A. Zapriagaev, Вестник ВГУ **1**, 55 (2000).

10. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т.1, Наука, Москва (1973).

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