

РЕЛЯТИВІСТСЬКИЙ ОПЕРАТОР ВЗАЄМОДІЇ ДВОХ КВАЗІМОЛЕКУЛЯРНИХ ЕЛЕКТРОНІВ В РАМКАХ ЕФЕКТІВ ТРЕТЬОГО ПОРЯДКУ КВАНТОВОЇ ЕЛЕКТРОДИНАМІКИ

О.Ф. Павлик

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54

В рамках ефектів третього порядку квантової електродинаміки розв'язано задачу про взаємодію двох квазімолекулярних електронів, що знаходяться на довільній відстані один від одного – біля різних атомів (ядер). Одержано загальний вираз для матричних елементів оператора ефективної енергії взаємодії двох квазімолекулярних електронів із зовнішнім полем випромінювання. Показано, що послідовне виконання процедури симетризації фактора запізнювання по відношенню до обох електронів призводить до виникнення додаткових членів у релятивістському операторі взаємодії двох квазімолекулярних електронів.

Ключові слова: міжелектронна взаємодія, ефекти запізнювання, оператор Брейта, квантова електродинаміка, квазімолекулярні електрони.

Вступ

Закон Кулона e^2/r визначає енергію взаємодії двох електронів, що знаходяться на відстані R один від одного, котра повинна бути меншою деякого характерного просторового масштабу, коли швидкості руху v значно менші порівняно зі швидкістю світла c : $v/c \rightarrow 0$. Це має місце, наприклад, для системи нейтральних атомів (взаємодія Ван-дер-Ваальса), які знаходяться на відстані, меншій характерних довжин хвиль λ_0 у спектрі взаємодіючих атомів ($R \ll \lambda_0$). Описуючи взаємодію атомів, що знаходяться на відстанях $R > \lambda_0$, застосування закону Кулона виявляється замало. Розглянемо перебіг квантових процесів, які відповідають фейнманівським діаграмам, зображеним на рис. 1. Зауважимо, що для всіх двоелектронних процесів з перерозподілом характерним є обмінний механізм: один з активних електронів атома (іона) $A^{(Z_a-2)^+}$ тунелює до «чужого» іона $B^{Z_b^+}$ з подальшим диполь-мультипольним одночасним переходом двох розведених на різні ядра електронів. Обмінний матричний елемент, який відповідає за перебіг двоелектронних процесів з перерозподілом, визначається такою конфігурацією, коли активні елект-

рони знаходяться далеко один від одного – біля різних атомів (ядер). Одержаний Брейтом релятивістський оператор взаємодії двох електронів має вигляд [1]:

$$V(\vec{r}_{12}) = V_c(|\vec{r}'' - \vec{r}'''|) + V_B(\vec{r}_{12}) = \frac{e^2}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} - \frac{e^2}{2|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} \left[\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 + \frac{(\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_{12})(\vec{\alpha}_2 \vec{\alpha}_{12})}{r_{12}^2} \right], \quad (1)$$

де $\vec{\alpha}_1$ і $\vec{\alpha}_2$ – два комутуючих набори матриць Дірака, $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, а нижні індекси 1 і 2 розрізняють величини, що відносяться до першого і другого електрона відповідно.

Застосовність оператора Брейта (1), однак, обмежується умовою малості часу передачі взаємодії $T_B = r_{12}/c$ порівняно із середнім часом електронних переходів $T_0 = 2\pi/\omega_0$, де ω_0 – характерна частота у спектрі взаємодіючих електронів. Ця умова завідомо виконується для не надто великих відстаней між електронами, наприклад, внутрішньоатомних відстаней в гелієподібних атомах.

В праці [2] наведено аргументи, які ставлять під сумнів можливість використання оператора Брейта (1) для знаходження асимптотики обмінної взаємодії,

відповідальної за одночасне захоплення двох електронів при повільних зіткненнях багатозарядних іонів з атомами. Заслуги втілення і розвитку нових ідей у цьому напрямку належать авторам праць [3-6], в котрих методами квантової електродинаміки задача про взаємодію двох зв'язаних електронів, що належать двом воднево-подібним атомам, розглядалась у загальній постановці, не пов'язаній з жодними обмеженнями на міжатомні відстані. Проте, побудований в цитованих працях [3-6] узагальнений оператор Брейта не володіє властивістю симетричності по відношенню до взаємодіючих частинок і тому не може застосовуватися в послідовній релятивістській квантовій теорії.

Матриця ефективної енергії взаємодії двох електронів, що знаходяться на довільній відстані один від одного.

Діаграми Фейнмана для взаємодії двох електронів у зовнішньому полі представлені на рис. 1.

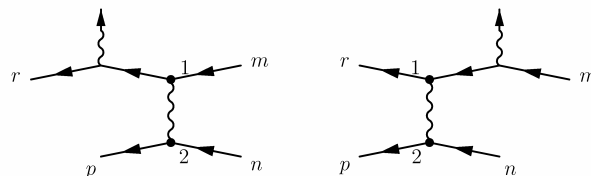


Рис. 1. Фейнманівські діаграми ефектів третього порядку КЕД.

Після інтегрування в S -матриці за часами, частотами і хвильовими векторами, отримуємо наступну матрицю ефективної енергії взаємодії ($\hbar = c = 1$):

$$U_{mn,pr}^{(3)} = e^{(3)} \int \Psi_r^+(\vec{r}') \Psi_p^+(\vec{r}'') \sum_{l_{\pm}} \left\{ \gamma_4' \gamma_{\delta}' A_{\delta}' \frac{\Psi_l(\vec{r}') \Psi_l^+(\vec{r}'')}{\omega_l(1-i0) - \omega - \omega_r} \frac{1 - \vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'''}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''} \right\} \times \\ \times \exp\{i[\omega_p - \omega_n \|\vec{r}'' - \vec{r}'''\}] + \frac{1 - \vec{\alpha}' \vec{\alpha}'''}{|\vec{r}' - \vec{r}'''} \exp\{i[\omega_p - \omega_n \|\vec{r}' - \vec{r}''']\} \times \\ \times \frac{\Psi_l(\vec{r}') \Psi_l^+(\vec{r}'')}{\omega_l(1-i0) + \omega - \omega_m} \gamma_4'' \gamma_{\delta}'' A_{\delta}'' \} \Psi_m(\vec{r}'') \Psi_n(\vec{r}''') d\vec{r}' d\vec{r}'' d\vec{r}''', \quad (2)$$

де $\Psi_{m(n)}$, $\Psi_{r(p)}$ та Ψ_l – координатні хвильові функції електронів (без часових множників), а \vec{r}' , \vec{r}'' та \vec{r}''' – радіус-вектори першого і другого електронів відповідно. Тут $\vec{\alpha}', \vec{\alpha}'', \vec{\alpha}'''$ – матриці Дірака, причому оператор $\vec{\alpha}'(\vec{\alpha}'')$ діє на функцію $\Psi_m(\vec{r}'')(\Psi_l(\vec{r}'))$, а оператор $\vec{\alpha}'''$ – на функцію $\Psi_n(\vec{r}''')$; A_{δ} – компоненти векторного потенціалу без часових множників, індекс δ пробігає значення 1, 2, 3, і за індексом δ , який двічі повторюється, ведеться підсумовування від $\delta = 1$ до $\delta = 3$.

Матриця (2) відповідає одному з восьми процесів, які відбуваються за рахунок взаємодії активних електронів через поле віртуальних фотонів і супроводжуються випромінюванням (поглинанням) реального фотона. Інші процеси можуть бути враховані шляхом відповідного перепозначення хвильових функцій.

Перехід від матриці $S_{mn,pr}^{(3)}$ до матриці ефективної енергії взаємодії системи двох зв'язаних електронів $U_{mn,pr}^{(3)}$, здійснюється за допомогою співвідношення:

$$S_{mn,pr}^{(3)} = -2\pi i U_{mn,pr}^{(3)} \delta(\omega + \omega_p - \omega_m + \omega_r - \omega_n). \quad (3)$$

Тут ω_m, ω_n – частоти початкових станів електронів, а ω_r, ω_p – частоти їх кінцевих станів. Виділення у вигляді множника одновимірної δ – функції виражає закон збереження енергії:

$$E_p - E_m + E_r - E_n + \hbar\omega = 0. \quad (4)$$

Тут у явному вигляді відновлено залежність від сталої Планка \hbar ; для поглинання реального фотона знак перед частотою в ω в (3), (4) слід замінити на протилежний.

Виділимо в (2) множник

$$K(\vec{r}''; \vec{r}'''; \omega_{pn}) = \frac{1 - \vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'''}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} \exp\left\{ \frac{1}{c} |\omega_{pn}| |\vec{r}'' - \vec{r}'''| \right\}, \quad (5)$$

який відповідає за обмін віртуальними фотонами між двома електронами. Тут $\omega_{pn} = \omega_p - \omega_n$ і використовується система одиниць, в якій $c \neq 1$. Наявність у цьому виразі «фактора запізнювання» $\exp\{1/c |\omega_{pn}| |\vec{r}'' - \vec{r}'''|\}$, залежного явно від початкової і кінцевої енергій системи, не дозволяє у загальному випадку ввести оператор взаємодії двох електронів $B_{II}^{(\pm)}(\vec{r}'', \vec{r}''')$, матричним елементом котрого був би $U_{mn,pr}^{(3)}$. Проте у наближенні малих швидкостей ($v/c \ll 1$, v – швидкість електронів в атомі, c – швидкість світла у вакуумі) такий оператор можна побудувати.

Представимо відстань між електронами наступним чином:

$$|\vec{r}'' - \vec{r}'''| = R \left(1 + \frac{\vec{R} \Delta \vec{r}}{R^2} + \frac{M}{R} \right). \quad (6)$$

Тут $\Delta \vec{r} = \vec{r}_{1b} - \vec{r}_{2a}$, $\Delta r = |\Delta \vec{r}|$, $\vec{r}_{1b}(\vec{r}_{2a})$ – радіус-вектор 1-го (2-го) електрона відносно ядра $B^{Z_b+}(A^{Z_a+})$, а $M = M(\Delta \vec{r}, \vec{R})$ – малі поправки, які включають в себе більш високі степені відношення $\Delta r/R$. При цьому малий параметр $\Delta r/R$ виділяє конфігурацію, котра фізично відповідає знаходженню електронів біля різних ядер.

У попередніх працях [1, 7, 8] при побудові розкладу фактора запізнювання припускалося, що єдиним малим параметром є величина $\omega_0 r/c \ll 1$ (або ж формально $1/c$), де r – відстань між електронами. Очевидно, що ця умова виконується для не надто великих відстаней між електронами, наприклад, внутрішньоатомних відстаней в гелієподібних атомах. Нижче асимптотичний розклад K -фактора (5) будується для випадку, коли природними малими параметрами є одночасно $1/c$ і $\Delta r/R$. Таке виділення малих параметрів відрізняється від граничного випадку одного (об'єд-

наного) гелієподібного атома ($R = 0$), дослідженого Дрейком [8], і в рамках даної квазімолекулярної моделі реалізується, наприклад, коли електрони знаходяться далеко один від одного – біля різних атомів.

Щоб надати точного змісту K -фактору (5), перетворимо його наступним чином:

$$K(\vec{r}'', \vec{r}'''; \omega_{pn}) = \frac{1 - \vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'''}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} e^{i|\omega_{pn}|R} e^{i|\omega_{pn}|(|\vec{r}'' - \vec{r}'''| - R)}. \quad (7)$$

Проведене перетворення зручне тим, що відокремлює у вигляді множника релятивістський фактор $\exp(i|\omega_{pn}|R/c)$ підсилення ефектів динамічного запізнювання взаємодії, які кодуються залежністю цього фактора від початкової і кінцевої енергій системи: $\omega_{pn} = E_p - E_n$. Проте основний аргумент на користь доцільності такого перетворення полягає у тому, що з його допомогою задача розкладу фактора запізнювання зводиться до розкладу експоненціального множника

$$\exp\left\{ i|\omega_{pn}| \left(|\vec{r}'' - \vec{r}'''| - R \right) / c \right\}.$$

Наявність різниці $|\vec{r}'' - \vec{r}'''| - R$ в показнику останньої експоненти вказує на те, що такий розклад повинен вестися не тільки за степенями $1/c$, але й за степенями малого параметра $\Delta r/R$.

Надалі вважатимемо, що виконується умова

$$\frac{1}{c} |\omega_{pn}| \frac{\vec{R} \Delta \vec{r}}{R} \ll 1. \quad (8)$$

При цьому відстань R між ядрами може змінюватися в межах $\Delta r \leq R < \infty$.

При виконанні умови (8) показник експоненти $\exp\left\{ i|\omega_{pn}| \left(|\vec{r}'' - \vec{r}'''| - R \right) / c \right\}$, який фігурує у правій частині (7), малий порівняно з одиницею. Цей факт дозволяє здійснити формальний розклад K -фактора (7) у ряд за степенями $1/c$. З точністю до членів порядку c^{-2} включно маємо розклад

$$K(\vec{r}'' , \vec{r}''' ; \omega_{pn}) = (1 - \bar{\alpha}'' \bar{\alpha}''') \exp \left\{ \frac{i}{c} |\omega_{pn}| R \right\} \left\{ f_0(\vec{r}'' , \vec{r}''') + \frac{i}{c} |\omega_{pn}| f_1(\vec{r}'' - \vec{r}''') - \frac{1}{2c^2} \omega_{pn}^2 f_2(\vec{r}'' - \vec{r}''') \right\}. \quad (9)$$

Коефіцієнти

$$f_0(\vec{r}'' , \vec{r}''') = \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|}, \quad f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') = \frac{|\vec{r}'' - \vec{r}'''| - R}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|},$$

$$f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') = \frac{(|\vec{r}'' - \vec{r}'''| - R)^2}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|}. \quad (10)$$

розкладу (9), в свою чергу, є степеневими рядами по $\Delta r / R$. Фактично, це означає, що у випадку, коли області просторової локалізації електронів біля різних центрів достатньо віддалені, можна перерозкласти функції f_0 , f_1 і f_2 , які входять в (9), в степеневі ряди за $\Delta r / R$. Якщо не робити такого розкладу, то в замкнутому вигляді можна врахувати (в розглядуваному c^{-2} -наближенні) взаємодію квазімолекулярних електронів всіх мультипольностей.

Виключимо у виразі (9) частоти, використовуючи рівняння Дірка

$$\hat{H}'' \Psi_m(\vec{r}'') = \omega_m \Psi_m(\vec{r}''),$$

$$\hat{H}''' \Psi_n(\vec{r}''') = \omega_n \Psi_n(\vec{r}'''). \quad (11)$$

$$|\omega_{pn}| f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') \rightarrow \pm \frac{1}{2} \left\{ R_{ll} [\hat{H}'' f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') - f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') \hat{H}''] + f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') \hat{H}''' - \hat{H}''' f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') \right\} =$$

$$= \pm \frac{1}{2} \left\{ R_{ll} [\hat{H}'' , f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''')] + [f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') , \hat{H}'''] \right\}. \quad (13)$$

Тут і надалі квадратні дужки позначають комутатори відповідних величин.

Перетворимо до симетричного вигляду третій член в розкладі (9):

$$-\omega_{pn}^2 f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') = R_{ll} (\omega_l - \omega_m) (\omega_p - \omega_n) f_2(\vec{r}'' , \vec{r}'''). \quad (14)$$

$$-\omega_{pn}^2 f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') \rightarrow R_{ll} \left\{ f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') \hat{H}'' \hat{H}''' - \hat{H}'' f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') \hat{H}''' - \hat{H}''' f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') \hat{H}'' + \hat{H}'' \hat{H}''' f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') \right\} =$$

$$= R_{ll} \left[\hat{H}'' , \left[\hat{H}''' , f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''') \right] \right]. \quad (15)$$

Для переходу від частот до операторів у (9) за допомогою співвідношення $\omega_n - \omega_p = R_{ll} (\omega_l - \omega_m)$ розіб'ємо його другий член на дві групи доданків:

$$|\omega_{pn}| f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') \equiv$$

$$\equiv \pm \frac{1}{2} \left[R_{ll} (\omega_l - \omega_m) + (\omega_n - \omega_p) \right] f_1(\vec{r}'' , \vec{r}'''). \quad (12)$$

Тут $R_{ll} = (\omega_n - \omega_p) / (\omega_l - \omega_m)$, знак «+» у (12) відповідає випадку $\omega_p < \omega_n$, а знак «-» – випадку $\omega_p > \omega_n$. Замінімо в останньому виразі ω_m та ω_n операторами \hat{H}'' та \hat{H}''' розташованими праворуч від множника $f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''')$, а частоти ω_l і ω_p – операторами \hat{H}'' та \hat{H}''' , розташованими ліворуч від $f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''')$. Після цих перетворень вираз у правій частині (12) набуває вигляду:

Замінімо частоти в (14) операторами аналогічно до того, як це було зроблено в (13). Тоді одержимо наступне перетворення:

Вносячи операторні вирази (13) і (15) у праву частину (9), приходимо до такого перетворення K -фактора:

$$K(\vec{r}'' , \vec{r}''' ; \omega_{pn}) \rightarrow (1 - \vec{\alpha}'' \vec{\alpha}''') e^{i|\omega_{pn}|R} \{ f_0(\vec{r}'' , \vec{r}''') \pm \frac{i}{2c} (R_{1l} [\hat{H}'' , f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''')] + [f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''') , \hat{H}''] + \frac{R_{1l}}{2c^2} [\hat{H}'' , [\hat{H}''' , f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''')]]) \}. \quad (16)$$

Зазначимо, що знайдене зображення (16) для K -фактора забезпечує рівноправність опису пари взаємодіючих частинок.

Таким чином, в нашому розгляді K -фактор (5) представлений подвійним розкладом (9) за степенями $1/c$ і $\Delta r / R$. При цьому в розкладі за $1/c$ ми обмежились першими трьома членами, а в розкладі за малим параметром $\Delta r / R$ жодних обмежень немає, оскільки функція M містить всі вищі поправкові члени. З цієї причини весь подальший розгляд враховує взаємодію двох квазімолекулярних електронів довільної мультипольності.

Рух окремих електронів у двоцентровій системі $A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+}$ описується діраківським одноелектронним гамільтоніаном для задачі двох фіксованих кулонівських центрів, розташованих на відстані R один від одного:

$$\hat{H}'' = c \vec{\alpha}'' \vec{p}'' + \beta'' m c^2 - \frac{Z_a e^2}{|\vec{r}'' - \vec{R}_a|} - \frac{Z_b e^2}{|\vec{r}'' - \vec{R}_b|},$$

$$\hat{H}''' = c \vec{\alpha}''' \vec{p}''' + \beta''' m c^2 - \frac{Z_a e^2}{|\vec{r}''' - \vec{R}_a|} - \frac{Z_b e^2}{|\vec{r}''' - \vec{R}_b|}. \quad (17)$$

Ми ввели сюди явно $\hbar \neq 1$, $Z_a e$ і $Z_b e$ – заряди точкових ядер, а через $\vec{p}'' = -i\hbar \vec{\nabla}''$ і $\vec{p}''' = -i\hbar \vec{\nabla}'''$ позначено оператори імпульсу електронів. Усі радіус-вектори в (17) відраховуються від початку лабораторної системи координат, причім \vec{R}_a і \vec{R}_b – радіус-вектори ядер A^{Z_a+} і B^{Z_b+} відповідно, а між'ядерна відстань $R = |\vec{R}_b - \vec{R}_a|$.

Обчислимо тепер комутатори, що входять у праву частину (16). Зазначимо, перш за все, що не комутуючим з $f_1(\vec{r}'' , \vec{r}''')$ і $f_2(\vec{r}'' , \vec{r}''')$ є тільки один член в \hat{H}'' (\hat{H}'''), а саме $c \vec{\alpha}'' \vec{p}''$ ($c \vec{\alpha}''' \vec{p}'''$). З цієї причини у виразах (17) для операторів \hat{H}'' , \hat{H}''' при підстановці їх під знак комутаторів в (16) можна відразу відкинути доданки, що не містять матриць $\vec{\alpha}''$, $\vec{\alpha}'''$:

$$[\hat{H}'' , f_1] = c [\vec{\alpha}'' \vec{p}'' , f_1], \quad [f_1 , \hat{H}'''] = c [f_1 , \vec{\alpha}''' \vec{p}'''],$$

$$[\hat{H}'' , [\hat{H}''' , f_2]] = c^2 [\vec{\alpha}'' \vec{p}'' , [\vec{\alpha}''' \vec{p}''', f_2]]. \quad (18)$$

Обчислюючи комутатори (18), знайдемо, що вклади другого і третього доданків в розкладі (16) визначаються такими операторними виразами:

$$\pm \frac{i}{2c} (R_{1l} [\hat{H}'' , f_1] + [f_1 , \hat{H}''']) = \pm \hbar R \frac{R_{1l} \vec{\alpha}'' \vec{n} + \vec{\alpha}''' \vec{n}}{2|\vec{r}'' - \vec{r}'''|^2}, \quad (19)$$

$$\frac{1}{2c^2} R_{1l} [\hat{H}'' , [\hat{H}''' , f_2]] = -\frac{\hbar^2}{2} R_{1l} [(\vec{\alpha}'' \vec{\nabla}'') (\vec{\alpha}''' \vec{\nabla}''') |\vec{r}'' - \vec{r}'''| + R^2 (\vec{\alpha}'' \vec{\nabla}'') (\vec{\alpha}''' \vec{\nabla}''') \frac{1}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|}], \quad (20)$$

де $n = (\vec{r}'' - \vec{r}''') / |\vec{r}'' - \vec{r}'''|$.

Таким чином, оператор, що описує (в $U_{m,pr}^{(3)}$ -матриці (2)) взаємодію двох електронів через поле віртуальних фотонів, матиме наступний вигляд

$$B_{1l}^{(\pm)}(\vec{r}'' , \vec{r}''') = e^2 \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_{pn}|R\right\} \left\{ \frac{1 - \vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'''}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} \pm \right. \\ \left. \pm R \frac{R_{1l} \vec{\alpha}'' \vec{n} + \vec{\alpha}'' \vec{n}}{2|\vec{r}'' - \vec{r}'''|^2} + \frac{R_{1l}}{2} \left(\frac{\vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'' - (\vec{\alpha}'' \vec{n})(\vec{\alpha}'' \vec{n})}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} - R^2 \frac{\vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'' - 3(\vec{\alpha}'' \vec{n})(\vec{\alpha}'' \vec{n})}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|^3} \right) \right\}. \quad (21)$$

Перший доданок в (21) являє собою енергію миттєвої (кулонівської) взаємодії електронів, а інші враховують поправки, зумовлені запізнюванням релятивістської взаємодії і наявністю електронних спінів.

Аналогічним чином розглянемо обмін віртуальними фотонами у другому доданку матриці (2) (друга діаграма рис. 1). Після необхідних перетворень відповідного фактора запізнювання отримаємо оператор $B_{2l}(\vec{r}'' , \vec{r}''')$, що має вигляд, аналогічний (21), але із заміною коефіцієнта R_{1l} на $R_{2l} = (\omega_n - \omega_p) / (\omega_l - \omega_m)$.

У частинному випадку резонансного обміну фотонами маємо $R_{1l} = 1$ і оператор (21) переходить в узагальнений брейтівський оператор [2] для взаємодії двох квазімолекулярних електронів без випромінювання або поглинання реальних фотонів. Умова $R_{1l} = 1$ означає, що перехід системи двох частинок в проміжний стан повинен здійснюватися відповідно до закону збереження енергії: $E_n - E_p = E_l - E_m$. При $R_{1l} = 1$ і $R \rightarrow 0$ (границя об'єднаного атома) оператор (21), як і належить, переходить у відомий оператор Брейта (1) для взаємодії двох атомних електронів в гелієподібних атомах. Тим самим оператор (31) можна розглядати як природне узагальнення брейтівського оператора [1, 7, 11] на область як завгодно великих міжелектронних відстаней, де вплив ефекту динамічного запізнювання на спінові взаємодії електронів підсилюється.

Нетривіальним моментом такого узагальнення є наявність у виразі (21) для $B_{1l}^{(\pm)}(\vec{r}'' , \vec{r}''')$ додаткових (у порівнянні з брейтівським виразом (1)) запізнюючих членів, залежних від розмірного параметра R , а також від спінових операторів електронів. Зазначимо також, що цей додатковий вклад у $B_{1l}^{(\pm)}(\vec{r}'' , \vec{r}''')$ носить принципово релятивістський характер і з'являється за рахунок додаткового запізнювання релятивістської взаємодії двох квазімолекулярних електронів, що знаходяться на далеких відстанях один від одного в порівнянні з $\lambda_0 = 2\pi c / \omega_0$.

Отриманий вираз (21) для оператора $B_{1l}^{(\pm)}(\vec{r}'' , \vec{r}''')$ виявляється симетричним відносно обох електронів. Це є результатом належної симетризації всіх утриманих членів в розкладі (9) по відношенню до обох електронів. Зазначимо, що симетричне зображення для релятивістського оператора взаємодії двох квазімолекулярних електронів було спочатку отримано в праці [2] на основі послідовного розгляду ефектів 2-го порядку квантової електродинаміки, що включають в себе віртуальний обмін фотонами всіх поляризацій.

В циклі праць [3-6], що фактично започаткували сучасний етап дослідження проблеми двох електронів, у рамках ефектів третього порядку квантової електродинаміки було отримано наступний результат для релятивістського оператора взаємодії двох атомних електронів на довільній відстані один від одного:

$$\tilde{B}_{1l}^{(\pm)}(\vec{r}'' , \vec{r}''') = e^2 \exp\left\{\frac{i}{c}|\omega_{pn}|R\right\} \times \\ \times \left\{ \frac{1 - \vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'''}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} \pm R \frac{\vec{\alpha}'' \vec{n}}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|^2} + \frac{R_{1l}}{2} \left(\frac{\vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'' - (\vec{\alpha}'' \vec{n})(\vec{\alpha}'' \vec{n})}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|} - R^2 \frac{\vec{\alpha}'' \vec{\alpha}'' - 3(\vec{\alpha}'' \vec{n})(\vec{\alpha}'' \vec{n})}{|\vec{r}'' - \vec{r}'''|^3} \right) \right\}. \quad (22)$$

Принциповим недоліком цього оператора є відсутність симетрії в описі пари взаємодіючих частинок. Це автоматично слідує із структури другого доданку в (22), пропорційного R .

Важливе зауваження, яке випливає із порівняння формул (21) і (22), полягає в тому, що послідовне проведення процедури симетризації двох останніх членів в розкладі фактора запізнювання (9) приводить до того, що в кінцевому виразі (21) для оператора $B_{II}^{(\pm)}(\vec{r}''', \vec{r}''')$ поряд із членами, наявними в (22), з'являється також новий доданок $\pm R_{II} R(\vec{\alpha}'' \vec{n}) / 2 |\vec{r}'' - \vec{r}'''|^2$, зобов'язаний своїм походженням додатковому запізнюванню у взаємодії електронів, які знаходяться на довільних відстанях один від одного. Тому при проведенні розрахунків, що ґрунтуються на використанні оператора (22) з [3-6], можна очікувати появи хибних результатів.

Висновки

У даній статті розв'язано задачу про взаємодію двох квазімолекулярних електронів через поле віртуальних фотонів, яка супроводжується випромінюванням або поглинанням реального фотона. Така взаємодія розглядається як ефект третього порядку квантової електродинаміки з діаграмами Фейнмана рис. 1. Виокремимо основні властивості цієї взаємодії.

Є дві області конфігураційного простору, де узагальнений брейтівський оператор далекодійного типу (21) по-різному поводить в залежності від зміни відносної відстані між електронами $r_{12} = |\vec{r}'' - \vec{r}'''|$.

Так, наприклад, в границі об'єднаного атома ($R \rightarrow 0$) формула (21) для оператора $B_{II}(\vec{r}'', \vec{r}''')$ переходить в граничний (брейтівський) вираз (1), який правильно описує ефекти запізнювання релятивістської взаємодії лише при зближенні частинок на порівняно малі відстані r_{12} . Відповідну область конфігураційного простору ми будемо позначати через Ω_a і називати областю близьких електронних кореляцій. Навпаки, в області Ω_a , де електрони розведені на різні ядра і для всіх $\Delta r \leq R < \infty$ виконується нерівність (8), брейтівський оператор (1) перестає давати адекватний опис релятивістської взаємодії між двома електронами навіть на якісному рівні. В той же час побудований в даній праці релятивістський оператор B_{II} (21) єдиним і рівноправним чином описує запізнюючу взаємодію двох електронів як в області Ω_a близьких, так і в області Ω_a далеких електронних кореляцій, і тим самим може бути застосований при розв'язанні багатьох двоелектронних задач атомної і молекулярної спектроскопії, астрофізики, теорії повільних атомних зіткнень і т. д. Крім того, релятивістський оператор взаємодії двох електронів (21) слід застосовувати при математичному моделюванні атомних кластерів [3], дослідженні оптичних властивостей різних наноструктурних систем в інтенсивних оптичних полях [9, 10, 12], а також при розв'язанні низки важливих задач із запису, зчитування і передачі квантової інформації від одного дворівневого атома (кубіта) до іншого [13, 14].

Література

1. Breit G. The effect of retardation on the interaction of two electrons // *Phys. Rev.* – 1929. – V. 34. – №4. – P. 553-573.
2. Лазур В.Ю., Мигалина С.И., Рейтий А.К. К квантово-электродинамической проблеме двух электронов // *Теор. Мат. Физ.* – 2009. – Т. 158. – С. 391-404.
3. Гадамский О.Н., Нагибаров В.Р., Соловаров Н.К. К теории излучения систем слабозаимодействующих частиц // *Журн. Эксп. Теор. Физ.*, 1972. – Т. 63. – С.813–819.
4. Гадамский О.Н., Нагибаров В.Р., Соловаров Н.К. Релятивистские эффекты в процессах сверхизлучения //

- Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1976. – Т. 70. – С. 435-444.
5. Гадомский О.Н., Алтунин К.К.. Проблема двух электронов во внешнем поле и метод интегральных уравнений в оптике // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1998. – Т. 144. – С.1555-1577.
 6. Гадомский О.Н. Проблема двух электронов и нелокальные уравнения электродинамики // Усп. Физ. Наук – 2000. – Т. 170. – №11. – С.1554-1579.
 7. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. – Москва: Наука, 1969.
 8. Drake G.W.F. Relativistic correction to radiative transition probabilities. // Phys. Rev. A. – 1972. – V. 5. – P. 1979.
 9. Malyshev V., Moreno P. // Phys. Rev. A. – 1966. – Т. 53. – P. 416.
 10. Гадомский О.Н., Глухов А.Г. Нелинейные резонансы в ближнепольном взаимодействии атомов // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 2006. – Т.130. – №1(7) – С. 31–42.
 11. Карбованець М.И., Лазур В.Ю., Чибисов М.И. Нерезонансный обмен двумя электронами // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1984. – Т. 86. – С. 84-93.
 12. Grozdanov T.P., Janev R.K., Lazur V.Yu. Two-electron exchange in slow ion-atom collisions // Phys. Scr. – 1985. – Т. 32. – С. 64-68.
 13. Гадомский О.Н., Воронов Ю.Ю. О физической реализации логических операторов NOT и CNOT в двухкубитовом квантовом компьютере под действием сверхкоротких оптических импульсов // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 2002. – Т.121. – С. 1028-1039.
 14. Гадомский О.Н., Харитонов Ю.Я. Квантовый компьютер на основе активированных диэлектрических наночастиц, селективно взаимодействующих с короткими оптическими импульсами // Квантовая электродинамика. – 2004. – Т. 34. – №3 – С. 249-254.

THE RELATIVISTIC INTERACTION OPERATOR OF TWO QUASIMOLECULAR ELECTRONS WITHIN THE THIRD-ORDER EFFECT OF QUANTUM ELECTRODYNAMICS

O.F. Pavlyk

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshyna Str., 54

The problem of the interaction of two quasimolecular electrons located at an arbitrary distance from each other near different atoms (nuclei) is solved. The general expression for the matrix elements of the operator of the effective interaction energy of two quasimolecular electrons with the external radiation field is obtained. The successive carrying out the procedure of symmetrization of the retardation factor with respect to both electrons is shown to lead to appearing the additional terms in the relativistic operator of the interaction of two quasimolecular electrons.

Key words: interelectron interaction, retardation effects, Breit operator, quantum electrodynamics, quasimolecular electron.

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ ОПЕРАТОР ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ КВАЗИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В РАМКАХ ЭФФЕКТОВ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

О.Ф. Павлик

Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

В рамках эффектов третьего порядка квантовой электродинамики решена задача о взаимодействии двух квазимолекулярных электронов, которые находятся на любом расстоянии друг от друга – возле разных атомов (ядер). Получено общее выражение для матричных элементов оператора эффективной энергии взаимодействия двух квазимолекулярных электронов с внешним полем излучения. Показано, что последовательное выполнение процедуры симметризации фактора запаздывания по отношению к обоим электронам приводит к возникновению дополнительных членов в релятивистском операторе взаимодействия двух квазимолекулярных электронов.

Ключевые слова: межэлектронное взаимодействие, эффекты запаздывания, оператор Брейта, квантовая электродинамика, квазимолекулярные электроны.