

ДО КВАНТОВО-ЕЛЕКТРОДИНАМІЧНОЇ ПРОБЛЕМИ ДВОХ ЕЛЕКТРОНІВ

Т.М. Гаврилець

Кафедра теоретичної фізики

Розв'язано задачу про взаємодію двох квазімолекулярних електронів, що знаходяться на довільній відстані один від одного. Отриманий вираз для узагальненого оператора міжелектронної взаємодії містить додаткові члени у порівнянні зі стандартним оператором Брейта, що враховують магнітні спіні-спінові взаємодії та ефекти запізнювання.

І. ВСТУП

Написати точне релятивістське хвильове рівняння для системи із двох взаємодіючих частинок неможливо через відсутність локального лоренц-інваріантного оператора, що враховує релятивістський характер міжелектронної взаємодії („ефекти запізнювання”). Не вдаючись до більш детального обговорення двочастинкових взаємодій, відзначимо лише, що повний релятивістський гамільтоніан двоелектронної системи $(AB)^{Z_a+Z_b-2}$ можна було б представити у вигляді розкладу в (нескінченний) ряд за степенями квадрата сталої тонкої структури α , що відповідає врахуванню ефекту динамічного запізнювання взаємодії методом послідовних наближень. Ще в 1929 р. Г. Брейт показав [15], що врахування першого члена цього розкладу є хорошим наближенням до релятивістської взаємодії між двома електронами за умови малості ефектів запізнювання в спектрі гелієподібного атома. Отриманий Брейтом оператор взаємодії двох електронів має такий вигляд [8, 9]:

$$\hat{V}_{ee}(\vec{r}_{12}) = \hat{V}_C(\vec{r}_{12}) + \hat{V}_B(\vec{r}_{12}) = \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{2r_{12}} \left[\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 + \frac{(\vec{\alpha}_1 \vec{r}_{12})(\vec{\alpha}_2 \vec{r}_{12})}{r_{12}^2} \right], \quad (1)$$

де через $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ позначено відносне положення пари електронів. Перший член \hat{V}_C в (1) описує електростатичну взаємодію електронів, а залишкова брейтівська частина \hat{V}_B враховує магнітні спін-спінові взаємодії та поправки на запізнювання, пов'язані зі скінченністю швидкості поширення взаємодії. Користуючись термінологією, прийнятою у квантовій електродинаміці (КЕД), можна сказати, що запізнююча взаємодія викликана обміном між електронами поперечними віртуальними фотонами, у той час як кулонівська взаємодія зумовлена обміном „поздовжніми” і „скалярними” фотонами [8]. Відзначимо, нарешті, що брейтівський вираз (1) є хорошим наближенням для опису запізнюючої взаємодії лише доти, поки відстань r_{12} залишається малою у порівнянні з характерними довжинами хвиль λ_0 у спектрі взаємодіючих електронів. Тому безпосереднє обчислення матричних елементів обмінної взаємодії, що відповідає за двоелектронний процес

$$A^{(Z_a-2)+}(e_1, e_2) + B^{Z_b+} \rightarrow A^{Z_a+} + B^{(Z_b-2)+}(e_1, e_2) \quad (2)$$

при повільних зіткненнях частинок, у рамках оператора Брейта (1) навряд чи завжди можливе, оскільки в цьому випадку, навпаки, суттєві великі міжелектронні відстані r_{12} . З цієї та низки інших причин на початку 70-х років ХХ століття виник інтерес до проблеми двох електронів, що перебувають на далеких відстанях один від одного. Важливий крок у розв'язанні цієї проблеми був зроблений у працях [12-26], де методами квантової електродинаміки задача про взаємодію двох електронів, що належать двом

водневоподібним атомам, розглядалася в загальній постановці, не пов'язаній з будь-якими обмеженнями на між-атомні відстані. В результаті було отримано [14-16] узагальнений брейтівський оператор для взаємодії двох атомних електронів через поле віртуальних фотонів як ефект другого порядку теорії збурень. Однак у цитованих роботах не проведено послідовне врахування ефектів запізнювання міжелектронної взаємодії. Конкретно ця обставина знаходить своє відображення у відсутності в побудованому в [14-16] операторі симетрії в описі пари взаємодіючих частинок. Тому до проблеми двох атомних електронів, що перебувають на довільній відстані один від одного, варто повернутися знову. Як ми побачимо далі, для повного врахування ефекту запізнювання у взаємодії двох електронів необхідно забезпечити ще виконання умови симетричності „фактора запізнювання” відносно взаємодіючих частинок, що приводить до виникнення додаткових (у порівнянні з [14-16]) запізнюючих членів у релятивістському операторі міжелектронної взаємодії двох.

II. МАТРИЦЯ ЕФЕКТИВНОЇ ЕНЕРГІЇ ВЗАЄМОДІЇ ДВОХ ЕЛЕКТРОНІВ НА ДОВІЛЬНІЙ ВІДСТАНІ ОДИН ВІД ОДНОГО

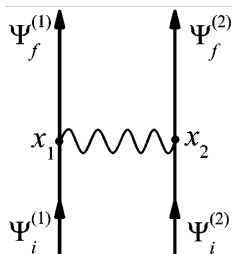


Рис. 1

Взаємодію двох електронів у зовнішньому електростатичному полі будемо розглядати як ефект другого порядку квантової електродинаміки з діаграмою Фейнмана, зображеною на рис. 1. Після інтегрування в S -матриці за часом, частотами і хвильовими векторами віртуальних фотонів одержимо відомий вираз для матричного елемента [8]

$$S_{i \rightarrow f}^{(2)} = -2\pi i U_{i \rightarrow f}^{(2)} \delta(\omega_{fi}^{(1)} + \omega_{fi}^{(2)}), \quad (3)$$

у якому через $U_{i \rightarrow f}^{(2)}$ позначено матрицю ефективної енергії взаємодії двох електронів, що визначається рівністю (див., наприклад, [17,18])

$$U_{i \rightarrow f}^2 = e^2 \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \Psi_f^{(2)+}(\vec{r}_2) \Psi_f^{(1)+}(\vec{r}_1) \frac{1 - \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \times \\ \times \cos\left(\omega_{fi}^{(2)} \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right| / c\right) \Psi_i^{(2)}(\vec{r}_2) \Psi_i^{(1)}(\vec{r}_1). \quad (4)$$

Тут $\Psi_i^{(n)}$ і $\Psi_f^{(n)}$ – хвильові функції початкового й кінцевого станів n -го електрона ($n = 1, 2$), а $\omega_{fi}^{(n)} = E_f^{(n)} - E_i^{(n)}$ – частота переходу. Величини $E_i^{(1)}$ ($E_f^{(n)}$) і $E_i^{(2)}$ ($E_f^{(2)}$) є початковими (кінцевими) енергіями 1-го і 2-го електронів, відповідно. Індeksi i та f в (3), (4) характеризують початковий і кінцевий стани пари електронів. Виділення в (3) у вигляді множника одномірної δ -функції від різниці між сумарними енергіями двох електронів у початковому й кінцевому станах ураховує закон збереження енергії:

$$E_f^{(1)} + E_f^{(2)} = E_i^{(1)} + E_i^{(2)}, \quad (5)$$

який являє собою прояв симетрії відносно неперервної операції зсуву часу. Відповідно до цього закону збереження домовимось записувати надалі $|\omega_{fi}^{(1)}|$ і $|\omega_{fi}^{(2)}|$ у спрощеному вигляді $|\omega_{fi}|$ (що припускає виконання рівностей $|\omega_{fi}| = |\omega_{fi}^{(1)}| = |\omega_{fi}^{(2)}|$).

Всі наведені в цьому розділі формули дані стосовно матричного елемента (3). Щоб одержати повний вираз для

$S_{i \rightarrow f}^{(2)}$ достатньо до матричного елемента (4) додати ще відповідний обмінний матричний елемент, що відображає нерозрізнюваність двох електронів.

Вираз (4) явно залежить від початкової й кінцевої енергій системи, тому тут не можна (у загальному випадку) виділити гамільтоніан взаємодії двох електронів, тобто оператор \hat{V} , для якого виконувалося б співвідношення

$$U_{i \rightarrow f}^{(2)} = \langle f | V | i \rangle = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \Psi_f^{(2)+}(\vec{r}_2) \Psi_f^{(1)+}(\vec{r}_1) \hat{V} \Psi_i^{(2)}(\vec{r}_2) \Psi_i^{(1)}(\vec{r}_1) \quad (6)$$

Однак, при малих швидкостях ($v_e/c \ll 1$, де v_e – швидкість електронів в атомі) такий оператор можна побудувати. З цією метою розглянемо ситуацію, коли один із електронів атома $A^{(Z_a-2)+}$, скажімо електрон 1, віддаляється в безпосередній окіл чужого ядра B^{Z_b+} , а інший залишається біля свого ядра A^{Z_a+} . Якщо області просторової локалізації електронів на різних ядрах (1-го – поблизу B^{Z_b+} , а 2-го – поблизу A^{Z_a+}) досить малі (не перевищують атомних розмірів) і досить віддалені одна від одної, то при виконанні умови $\Delta r < R < \infty$ відносна відстань r_{12} пари розведених по різних ядрах електронів може бути розкладена в ряд за степенями відношення $\Delta r/R$:

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = R \left(1 + \frac{\vec{R} \Delta \vec{r}}{R^2} + \frac{M_1}{R} \right). \quad (7)$$

Тут $\Delta \vec{r} = \vec{r}_{1b} - \vec{r}_{2a}$, $\Delta r = |\Delta \vec{r}|$, \vec{r}_{1b} і \vec{r}_{2a} – радіус-вектори 1-го і 2-го електронів відносно відповідних ядер, а $M_1 = M_1(\Delta \vec{r}, \vec{R})$ – малі поправки, що включають в себе вищі степені відношення $\Delta r/R$. Відповідну (описаній картині локалізації електронів) область двочастинкового конфігу-

раційного простору ми будемо позначати через $\Omega_{\text{в}}$ і називати областю далеких електронних кореляцій.

III. ЕНЕРГІЯ ВЗАЄМОДІЇ ДВОХ КВАЗІМОЛЕКУЛЯРНИХ ЕЛЕКТРОНІВ З ТОЧНІСТЮ ДО v^2/c^2

Виділимо в матриці ефективної енергії взаємодії (4) множник

$$K(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega_{fi}) = \frac{\cos(|\omega_{fi}| \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|/c)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (8)$$

який відповідає за обмін віртуальними фотонами між двома електронами. У попередніх роботах [9, 10] при побудові розкладу фактора запізнювання (8) вважалося, що єдиним малим параметром є величина $\omega_0 r_{12}/c \ll 1$ (або, що те саме, $1/c$; ω_0 – характерна частота в спектрі взаємодіючих електронів). Нижче розклад K -фактора (8) будується для випадку, коли малими параметрами є одночасно $1/c$ і $\Delta r/R$. Таке виділення малих параметрів відповідає області далеких електронних кореляцій і в рамках використовуваної двоцентрової моделі $A^{(Z_a-2)^+} + B^{Z_b+}$ реалізується, наприклад, коли електрони перебувають далеко один від одного – біля різних атомів (ядер).

За допомогою елементарних перетворень K -фактор (8) приводиться до вигляду

$$K(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega_{fi}) = \{ \cos[|\omega_{fi}|(r_{12} - R)/c] \cos(|\omega_{fi}|R/c) - \sin[|\omega_{fi}|(r_{12} - R)/c] \sin(|\omega_{fi}|R/c) \} / r_{12}. \quad (9)$$

Для електронів, що перебувають на довільній відстані один

від одного, проведене перетворення (9) зручне тим, що виділяє додаткове запізнювання, яке визначається дійсною $\cos(|\omega_{fi}|R/c)$ і уявною $\sin(|\omega_{fi}|R/c)$ частинами фактора запізнювання $\exp\{^3|\omega_{fi}|R/c\}$. Наявність різниці $r_{12} - R$ відносних відстаней електронів r_{12} і ядер R в аргументах тригонометричних функцій, які входять в (9), вказує на те, що розклад K -фактора повинен вестися тепер не тільки за степенями $1/c$, але також і за степенями малого параметра $\Delta r/R$.

Відповідно до цього надалі ми будемо вважати, що величина

$$\frac{|\omega_{fi}| \Delta r}{c R} \ll 1. \quad (10)$$

При виконанні умови (10) аргумент $|\omega_{fi}|(r_{12} - R)/c$ тригонометричних функцій у правій частині (9) – мала величина, так що можна розкласти K -фактора в ряд за малим параметром (10) і обмежитися, як зазвичай, тільки нижчими членами в розкладі косинуса та синуса:

$$K(r_1, r_2; \omega_{fi}) = \left\{ f_0(r_{12}) - \frac{\omega_{fi}^2}{2c^2} f_2(r_{12}) \right\} \cos \frac{|\omega_{fi}| R}{c} - \frac{|\omega_{fi}|}{c} f_1(r_{12}) \sin \frac{|\omega_{fi}| R}{c}. \quad (11)$$

Коефіцієнти

$$f_0(r_{12}) = \frac{1}{g_0(r_{12})} = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad f_1(r_{12}) = \frac{g_1(r_{12})}{g_0(r_{12})} = \frac{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| - R}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|},$$

$$f_2(r_{12}) = \frac{g_2(r_{12})}{g_0(r_{12})} = \frac{(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| - R)^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (12)$$

розкладу (11), у свою чергу, є степеневими рядами за

$\Delta r/R$, які виписуються за допомогою асимптотичних представлень функцій g_0, g_1, g_2 при малих значеннях параметра $\Delta r/R$:

$$g_0(\Delta\vec{r}, \vec{R}) = R \left[1 + (\vec{R}\Delta r)/R^2 + M_1/R \right],$$

$$g_1(\Delta\vec{r}, \vec{R}) = \left[(\vec{R}\Delta r)/R + M_1 \right], \quad g_2(\Delta\vec{r}, \vec{R}) = \left[(\vec{R}\Delta r)/R + M_1 \right]^2.$$

Отриманий розклад (11) є справедливим у широкій області зміни параметра R : $\Delta r < R < \infty$.

Виключимо у виразі для матричного елемента частоти, використовуючи рівняння Дірака

$$\hat{H}_n^{(0)}(\vec{r}_n)\Psi_i^{(n)}(n) = E_i^{(n)}\Psi_i^{(n)}(\vec{r}_n), \quad \hat{H}_n^{(0)}(\vec{r}_n)\Psi_f^{(n)}(\vec{r}_n) = E_f^{(n)}\Psi_f^{(n)}(\vec{r}_n). \quad (13)$$

Тут індекс n вказує на те, що одноелектронний релятивістський гамільтоніан $\hat{H}_n^{(0)}(\vec{r}_n)$ діє в просторі діраківських хвильових функцій електрона $\Psi_{i,f}^{(n)}(\vec{r}_n)$ з номером n .

У наведеній формі (11) розклад K -фактора ніяк не виявляє симетрію відносно взаємодіючих частинок. Для надання цьому розкладу необхідної симетричності ми скористаємося співвідношенням $\omega_{fi}^{(1)} = -\omega_{fi}^{(2)}$, що виражає закон збереження енергії (5). При цьому відповідно до двох можливостей $E_f^{(1)} > E_i^{(1)}$ і $E_f^{(1)} < E_i^{(1)}$ доводиться розглядати окремо два випадки $\omega_{fi}^{(1)} > 0$ і $\omega_{fi}^{(1)} < 0$. Нехай для визначеності $E_f^{(1)} > E_i^{(1)}$ ($E_f^{(1)} < E_i^{(1)}$), тоді $\omega_{fi}^{(1)} = -\omega_{fi}^{(2)} > 0$ ($\omega_{fi}^{(1)} = -\omega_{fi}^{(2)} < 0$) і $|\omega_{fi}^{(1)}| = \omega_{fi}^{(1)}$ ($|\omega_{fi}^{(1)}| = -\omega_{fi}^{(1)}$). Використовуючи ці співвідношення, перетворимо останній доданок у правій частині (11) до симетричного вигляду:

$$|\omega_{\vec{r}_1} | f_1(r_{12}) = |\omega_{\vec{r}_1}^{(1)} | f_1(r_{12}) = \pm \omega_{\vec{r}_1}^{(1)} f_1(r_{12}) = \pm \frac{1}{2} [E_f^{(1)} - E_i^{(1)} + E_i^{(2)} - E_f^{(2)}] f_1(r_{12}). \quad (14)$$

Знак + в (14) відповідає випадку $E_f^{(1)} > E_i^{(1)}$ ($\omega_{\vec{r}_1}^{(1)} > 0$), а знак – випадку $E_f^{(1)} < E_i^{(1)}$ ($\omega_{\vec{r}_1}^{(1)} < 0$). Маючи на увазі, що вираз (11) множиться справа на $\Psi_i^{(2)}(\vec{r}_2)\Psi_i^{(1)}(\vec{r}_1)$, а зліва на $\Psi_f^{(2)+}(\vec{r}_2)\Psi_f^{(1)+}(\vec{r}_1)$ і інтегрується за \vec{r}_1 і \vec{r}_2 , ми можемо замінити в (14) енергії $E_i^{(1)}$ та $E_i^{(2)}$ операторами $\hat{H}_1^{(0)}$ і $\hat{H}_2^{(0)}$, розташованими праворуч від множника $f_1(r_{12})$, а енергії $E_f^{(1)}$ і $E_f^{(2)}$ – операторами $\hat{H}_1^{(0)}$ і $\hat{H}_2^{(0)}$, розташованими ліворуч від $f_1(r_{12})$:

$$\begin{aligned} |\omega_{\vec{r}_1} | f_1(r_{12}) &\rightarrow \pm \frac{1}{2} \{ \hat{H}_1^{(0)} f_1(r_{12}) - f_1(r_{12}) \hat{H}_1^{(0)} + f_1(r_{12}) \hat{H}_2^{(0)} - \hat{H}_2^{(0)} f_1(r_{12}) \} = \\ &= \pm \frac{1}{2} \{ [\hat{H}_1^{(0)}, f_1(r_{12})] + [f_1(r_{12}), \hat{H}_2^{(0)}] \}. \end{aligned} \quad (15)$$

Тут і надалі квадратні дужки позначають комутатори відповідних величин.

Подібним же чином (скориставшись знову рівняннями (13) і співвідношеннями $\omega_{\vec{r}_1}^{(1)} = -\omega_{\vec{r}_1}^{(2)}$) виключимо частоти із другого доданка в (11), пропорційного c^{-2} :

$$\begin{aligned} -\omega_{\vec{r}_1}^2 f_2(r_{12}) &= (E_f^{(1)} - E_i^{(1)})(E_f^{(2)} - E_i^{(2)}) f_2(r_{12}) \rightarrow \\ f_2(r_{12}) \hat{H}_1^{(0)} \hat{H}_2^{(0)} - \hat{H}_1^{(0)} f_2(r_{12}) \hat{H}_2^{(0)} - \hat{H}_2^{(0)} f_2(r_{12}) \hat{H}_1^{(0)} + \\ + \hat{H}_1^{(0)} \hat{H}_2^{(0)} f_2(r_{12}) &= [\hat{H}_1^{(0)}, [\hat{H}_2^{(0)}, f_2(r_{12})]] \end{aligned} \quad (16)$$

Вносячи операторні вирази (15) і (16) у праву частину (11), приходимо до наступного перетворення K -фактора:

$$K(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \omega_{fi}) \rightarrow \cos\left(\frac{\omega_{fi} R}{c}\right) \left\{ f_0(r_{12}) + \frac{1}{2c^2} [\hat{H}_1^{(0)}, [\hat{H}_2^{(0)}, f_2(r_{12})]] \right\} - \frac{1}{2c} \sin\left(\frac{\omega_{fi} R}{c}\right) \left([\hat{H}_1^{(0)}, f_1(r_{12})] + [f_1(r_{12}), \hat{H}_2^{(0)}] \right) \quad (17)$$

Для того, щоб подальші формули були симетричними відносно обох електронів, ми замінимо тут обмінну енергію електронів $\omega_{fi} = E_f^{(1)} - E_i^{(1)} = E_i^{(2)} - E_f^{(2)}$ на середню різницю енергій одночасткових станів $\bar{\omega}_{fs} = (E_f^{(1)} - E_i^{(1)} + E_f^{(2)} - E_i^{(2)})/2$. Очевидно, що величина $\bar{\omega}_{fs}$ відмінна від нуля лише для обмінних переходів.

Таким чином, K -фактор (8) представлений подвійним розкладом (11) за степенями $1/c$ і $\Delta r/R$. При цьому в розкладі за степенями $1/c$ ми обмежилися квадратичними за $1/c$ членами, а в розкладі за малим параметром $\Delta r/R$ жодних обмежень немає, тому що функція M_1 містить всі вищі поправкові члени. Із цієї причини весь наступний розгляд враховує взаємодію двох квазімолекулярних електронів довільної мультипольності.

У наближенні невзаємодіючих електронів рух окремих електронів у двоцентровій системі $A^{(Z_a-2)+} + B^{Z_b+}$ описується діраківським одноелектронним гамільтоніаном

$$\hat{H}_n(\vec{r}_n) = c\bar{\alpha}_n \hat{p}_n + \beta_n mc^2 - \frac{Z_a e^2}{r_{na}} - \frac{Z_b e^2}{r_{nb}} \quad (18)$$

задачі двох кулонівських центрів (Z_a, e, Z_b) . Для більшої точності варто було б ввести в гамільтоніан (18) і інші члени, що враховують, наприклад, неточковість і спін ядра, екранування поля ядра електронною оболонкою атомного

остову і т.д., але в рамках даного розгляду ними можна знехтувати. За винятком граничних випадків (великих ($R \gg 1$) і малих ($R \ll 1$) між'ядерних відстаней) задача на власні значення для такого гамільтоніану не може бути розв'язана в явному вигляді.

Використовуючи формули (18), обчислимо попередньо комутатори в правій частині (17). Незавжди бачити, що не комутуючим з $f_1(r_{12})$ і $f_2(r_{12})$ є тільки один член в $\hat{H}_n^{(0)}$, а саме $c\bar{\alpha}_n\vec{p}_n$. Із цієї причини у виразах (18) для операторів $\hat{H}_1^{(0)}$, $\hat{H}_2^{(0)}$ при підстановці їх під знак комутаторів в (17) можна відразу відкидати доданки, які не містять $\bar{\alpha}_n$ -матриць:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_1^{(0)}, f_1] &= c[\bar{\alpha}_1\hat{p}_1, f_1], \quad [f_1, \hat{H}_2^{(0)}] = c[f_1, \bar{\alpha}_2\hat{p}_2], \\ [\hat{H}_1^{(0)}, [\hat{H}_2^{(0)}, f_2]] &= c^2[\bar{\alpha}_1\hat{p}_1, [\bar{\alpha}_2\hat{p}_2, f_2]]. \end{aligned} \quad (19)$$

За допомогою (19), а також очевидної допоміжної формули $[\bar{\alpha}_n\hat{p}_n, f_{1,2}] = -\hbar(\bar{\alpha}_n\bar{\nabla}_n)f_{1,2}$, легко переконатися у тому, що вклади лінійного й квадратичного за $1/c$ членів у розкладі (17) визначаються наступними операторними виразами:

$$-\frac{1}{2c}([\hat{H}_1^{(0)}, f_1(r_{12})] + [f_1(r_{12}), \hat{H}_2^{(0)}]) = i\hbar R \frac{\bar{\alpha}_1\vec{n} + \bar{\alpha}_2\vec{n}}{2|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2c^2}[\hat{H}_1^{(0)}, [\hat{H}_2^{(0)}, f_2(r_{12})]] &= -\frac{\hbar^2}{2}(\bar{\alpha}_1\bar{\nabla}_1)(\bar{\alpha}_2\bar{\nabla}_2)\vec{r}_1 - \vec{r}_2| - \\ &-\frac{\hbar^2 R^2}{2}(\bar{\alpha}_1\bar{\nabla}_1)(\bar{\alpha}_2\bar{\nabla}_2)\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \end{aligned} \quad (21)$$

де $\vec{n} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. Таким чином, величина $\langle f | V | i \rangle$

дійсно може бути представлена у вигляді (6), де оператор \hat{V} , що описує обмін віртуальними фотонами в матриці (4), визначається формулою ($\hbar = 1$)

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R) = e^2 \cos\left(\frac{\bar{\omega}_f R}{c}\right) \left\{ \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 + (\vec{\alpha}_1 \vec{n})(\vec{\alpha}_2 \vec{n})}{2|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \right. \\ \left. - R^2 \frac{\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 - 3(\vec{\alpha}_1 \vec{n})(\vec{\alpha}_2 \vec{n})}{2|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} \right\} + ie^2 R \sin\left(\frac{\bar{\omega}_f R}{c}\right) \frac{\vec{\alpha}_1 \vec{n} + \vec{\alpha}_2 \vec{n}}{2|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2}. \quad (22)$$

Перший член $e^2 \cos(\bar{\omega}_f R/c) r_{12}^{-1}$ в (22) являє собою релятивістське узагальнення кулонівської взаємодії електронів, що перебувають на довільній відстані один від одного. Інші члени в (22) враховують поправки, зумовлені запізнюванням релятивістської взаємодії та наявністю електронних спінів.

Отримана формула (22) для оператора міжелектронної взаємодії відповідає фейнманівській калібровці електромагнітних потенціалів [10]. Змінивши калібровку, можна одержати різні альтернативні форми представлення для цього оператора. У ряді випадків вибір того чи іншого представлення для оператора електрон-електронної взаємодії набуває істотного значення. Вираз (22) зручно використати при аналізі ефектів запізнювання міжелектронної взаємодії, оскільки дозволяє безпосередньо здійснити граничний перехід $c \rightarrow \infty$ (що відповідає "виключенню" ефектів запізнювання).

У границі об'єданого атома ($R \rightarrow 0$) оператор (22) переходить в релятивістський оператор Брейта (1) для взаємодії двох атомних електронів у гелієподібних атомах. Тим самим оператор (22) можна розглядати як безпосереднє узагальнення брейтівського оператора (1) на область довільних міжелектронних відстаней, де релятивістський характер взаємодії рухомих зарядів проявляється найбільш

яскраво. Нетривіальним моментом такого узагальнення є наявність у виразі (22) додаткових (у порівнянні з (1)) запізнюючих членів, пропорційних першій і другій степеням R . Цей додатковий вклад в (22) носить принципово релятивістський характер і з'являється за рахунок додаткового запізнювання релятивістської взаємодії електронів, що перебувають на як завгодно великих відстанях один від одного в порівнянні з $\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$.

Відповідно до уточнення брейтівського оператора, зробленого у даній роботі, вираз (22) доречно назвати узагальненим брейтівським оператором далекодіяного типу (щоб підкреслити можливість його використання при розв'язанні багатоелектронних задач фізики повільних атомних зіткнень [1-7, 19, 20], теорії квазімолекулярної оже-спектроскопії [19, 20], а також низки важливих проблем нелінійної й квантової оптики [12-16]).

IV. ВИСНОВКИ

Нами розв'язано задачу про взаємодію двох квазімолекулярних електронів, що знаходяться на довільній відстані один від одного. Побудований при цьому узагальнений вираз для оператора міжелектронної взаємодії містить додаткові члени у порівнянні зі стандартним оператором Брейта. Такий оператор Брейта (22) відкриває можливість для математично коректних розрахунків параметрів взаємодії атомних частинок на далеких відстанях, які відповідальні за переходи між розглянутими двоелектронними станами при повільних зіткненнях (2). Відмітимо в зв'язку з цим, що формула (22) не тільки істотно збільшує межі застосовності наближення Брейта в порівнянні з (1), але й дає можливість простежити структуру та вклад у матричні елементи оператора (22) різноманітних релятивістських ефектів з точністю до членів $\sim \alpha^2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Комаров И.В., Янев Р.К. Расщепление молекулярных термов при двухэлектронном обмене // ЖЭТФ. – 1966. – Т. 51, вып. 6. – С. 1712-1721.
2. Чибисов М.И. Резонансная двухэлектронная перезарядка // ЖЭТФ. – 1976. – Т. 70, вып. 5. – С. 1687-1696.
3. Grozdanov T.P., Janev R.K. Two-electron capture in slow ion-atom collisions // J. Phys. B. – 1980. – V. 13, No 11. – P. 3431-3442.
4. Карбованец М.И., Лазур В.Ю., Чибисов М.И. Нерезонансный обмен двумя электронами // ЖЭТФ. – 1984. – Т. 86, вып. 1. – С. 84-93.
5. Grozdanov T.P., Janev R.K., Lazur V.Yu. Two-electron exchange in slow ion-atom collisions // Phys. Scripta. – 1985. – V. 32, No 1. – P. 64-68.
6. Chibisov M.I., Janev R.K. Asymptotic exchange interaction in ion-atom systems // Phys. Rep. – 1988. – V. 166, No 1. – P. 1-87.
7. Никитин Е.Е., Уманский С.Я.. Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях. – М.: Атомиздат, 1979. – 296 с.
8. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. Квантовая электродинамика. – М.: Наука, 1981. – 432 с.
9. Breit G. The Effect of retardation on the interaction of two electrons // Phys. Rev. – 1929. – Vol. 34, No 4. – P. 553-573; Breit G. Dirac's equation and the spin-spin interactions of two electrons // Phys. Rev. – 1932. – Vol. 39, No 4. – P. 616-624.
10. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. – М.: Наука, 1989. – 728 с.
11. Никитин А.А., Рудзикас З.Б. Основы теории спектров атомов и ионов. – М.: Наука, 1983. – 320 с.

12. Chang C.S., Stehle P. Resonant interaction between two neutral atoms // *Phys. Rev. A.* – 1971. – Vol. 4, No 2. – P. 630-640.
13. Гадомский О.Н., Нагибаров В.Р., Соловаров Н.К. К теории излучения системы слабовзаимодействующих частиц // *ЖЭТФ.* – 1972. – Т. 63, № 3. – С. 813-819.
14. Гадомский О.Н., Нагибаров В.Р., Соловаров Н.К. Релятивистские эффекты в процессах сверхизлучения // *ЖЭТФ.* – 1976. – Т. 70, № 2. – С. 437-444.
15. Гадомский О.Н., Алтунин К.К. Проблема двух электронов во внешнем поле и метод интегральных уравнений в оптике // *ЖЭТФ.* – 1988. – Т. 114, № 5. – С. 1555-1577.
16. Гадомский О.Н. Проблема двух электронов и нелокальные уравнения электродинамики // *УФН.* – 2000. – Т. 170, № 11. – С. 1146-1179.
17. Sucher J. On the choice of the electron-electron potential in relativistic atomic physics // *J. Phys. B.* – 1988. – Vol. 21, No 19. P. L585-L591.
18. Лабзовский Л.Н. Теория атома. Квантовая электродинамика электронных оболочек и процессы излучения. – М.: Физматгиз, 1996. – 304 с.
19. Смирнов Б.М. Строение атома и процесс резонансной перезарядки // *УФН.* – 2001. – Т. 171, № 3. – С. 233-266.
20. Никитин Е.Е., Смирнов Б.М. Медленные атомные столкновения. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 256 с.
21. Парилис Э.С., Кишиневский Л.М., Матвеев В.И., Краков Б.Г. Оже-процессы при атомных столкновениях. – Ташкент: Фан, 1989. – 240 с.