Журнал технической физики, т. 59, в. 6, 1989

О КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ АТОМНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ПО ИМПУЛЬСАМ

С. А. Герасимов

В настоящей работе получено выражение для квазиклассической импульсной волновой функции. В первую очередь такой расчет имеет смысл в приложении к атомам в сильно возбужденном состоянии. Аналитическое выражение для импульсной волновой функции может быть полезно также для расчетов сечений неупругого рассеяния заряженных частиц в импульсном приближении. Для атомов в основном состоянии квазиклассическое приближение ВКБ применимо на расстояниях от ядра r, удовлетворяющих условию $1/Z \leqslant me^2r/\hbar^2 \leqslant 1$ [1, 2]. Поэтому в качестве примера в настоящей работе в рамках квазиклассического приближения изучено также распределение атомных электронов по импульсам. Такой подход справедлив для атомов с большим атомным номером Z, для которых в области квазиклассичности находится бóльшая часть атомных электронов.

Квазиклассическая импульсная волновая функция $g_{nl}(\varkappa)$ атомного электрона в состоянии с главным квантовым числом n и орбитальным l может быть получена преобразованием Ханкеля

$$g_{nl}(\varkappa)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, i^{-l}\int\limits_{r_1}^{r^1} j_l(\varkappa r)\, u_{nl}(r)\, dr \tag{1}$$

квазиклассических радиальных волновых функций

$$u_{nl}(r)=a_{nl}\,[k_{nl}(r)]^{-1/2}\cos\left[\int\limits_{r_1}^{r} k_{nl}(r)\,dr-\pi/4\right]. \tag{2}$$

Здесь a_{nl} — постоянная нормировки; $p=\hbar\varkappa$ — импульс;

$$k_{nl}(r)=\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\left[E_{nl}-U(r)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(l+1/2)^2}{r^2}\right]\right\}^{1/2}; \tag{3}$$

где $U(r)$ и E_{nl} — соответственно потенциальная энергия и собственные значения энергии атомного электрона; r_1, r^1 — левая и правая точки поворота; $j_l(x)$ — сферическая функция Бесселя, для которой в квазиклассическом приближении достаточно взять ее асимптотическое значение [3]

$$j_l(\varkappa r)=\frac{\varkappa^{1/2}r^{1/2}}{[\varkappa^2r^2-(l+1/2)^2]^{1/4}}\cos\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\arccos\frac{2l+1}{2\varkappa r}+\right.$$
$$\left.+\frac{\pi}{4}-\sqrt{\varkappa^2r^2-\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}\right]. \tag{4}$$

При больших l подынтегральная функция в (1) быстро осциллирует, так что этот интеграл может быть вычислен методом стационарной фазы [3]. Действительно, основной вклад в значение интеграла (1) вносят области, близкие к точкам поворота r_1, r^1 и к точкам стационарной фазы, вблизи которых осцилляции замедляются. Оценки, однако, показывают, что при больших $\varkappa$ значениями интеграла вблизи точек поворота по сравнению с соответствующими значениями вблизи стационарных точек можно пренебречь. Поэтому, опуская все слагаемые, не имеющие стационарных точек, получаем выражение для квазиклассической импульсной волновой функции

$$g_{nl}(\varkappa)=\frac{a_{nl}\varkappa^{1/2}i^{-l}}{\left(\frac{m}{\hbar^2}\frac{dU}{dr}\Big|_{r_0}\right)^{1/2}\left[\varkappa^2-\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\Big/r_0^2\right]^{1/4}}\cos\left[S(r_0)+\pi/4\right], \tag{5}$$

где

$$S(r)=\int\limits_{r_1}^{r} k_{nl}(r)\,dr-\int\limits_{(l+1/2)/\varkappa}^{r}[\varkappa^2-(l+1/2)^2/r^2]^{1/2}\,dr, \tag{6}$$

r_0 — точка стационарной фазы первого порядка ($S_0'(r_0)=0$, $S''(r_0)\neq 0$), т. е.

$$\frac{2m}{\hbar^2}|E_{nl}-U(r_0)|=\varkappa^2. \tag{7}$$

Выражения (5)—(7) — общее решение задачи, справедливое для любого потенциала, имеющего две точки поворота.

Вычислим теперь импульсное распределение атомных электронов, которое в квазиклассическом приближении может быть записано в виде

$$\frac{1}{4\pi\varkappa^2}\frac{dN}{d\varkappa}=2\sum_{nl\mu}\frac{|g_{nl}(\varkappa)|^2}{\varkappa^2}|Y_{l\mu}|^2, \tag{8}$$

где коэффициент 2 перед суммой связан со спиновым вырождением, $Y_{l\mu}$— сферические функции.

Суммирование по всем значениям магнитного квантового числа μ с учетом квазиклассического представления сферических функций приводит к следующему выражению:

$$\frac{dN}{d\varkappa}=2\sum_{l}(2l+1)\sum_{n}|g_{nl}(\varkappa)|^2. \tag{9}$$

Подставляя (5) в (9), заменяя суммирование по n интегрированием, опуская быстро осциллирующие, не имеющие стационарных точек слагаемые и учитывая, что [2]

$$a_{nl}^2\approx\frac{2m}{\pi\hbar^2}\frac{\partial E_{nl}}{\partial n}, \tag{10}$$

получаем

$$\frac{dN}{d\varkappa}=\frac{2}{\pi}\sum_{l}(2l+1)\int\frac{\varkappa dr_0}{[\varkappa^2-(l+1/2)^2/r_0^2]^{1/2}}. \tag{11}$$

Интегрирование в (11) следует проводить только по той области стационарности фазы, для которой (рис. 1)

$$U_l^m\leqslant E_{nl}\leqslant E_m,\quad U_l(r_0)\leqslant E_{nl}, \tag{12}$$

что соответствует условию, когда точка стационарной фазы находится между точками поворота. Здесь введено обозначение

$$U_l(r)=U(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{(l+1/2)^2}{r^2}. \tag{13}$$

Отсюда

$$\frac{dN}{d\varkappa}=\frac{2}{\pi}\sum_{l}(2l+1)\left[r^2\left\{E_m-\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}\right\}-\frac{(2l+1)^2}{4\varkappa^2}\right]^{1/2}, \tag{14}$$

где E_m — максимальное значение энергии электрона для данного атома, $r\{E_m-\hbar^2\varkappa^2/2m\}$ — решение уравнения

$$E_m-\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}=U(r). \tag{15}$$

Суммирование по орбитальным квантовым числам в квазиклассическом приближении можно заменить интегрированием

$$\frac{dN}{d\varkappa}=-\frac{4\varkappa^2}{3\pi}\left[r^2\left\{E_m-\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}\right\}-\frac{(2l+1)^2}{4\varkappa^2}\right]^{3/2}\Bigg|_{l\,\min}^{l\,\max}. \tag{16}$$

Очевидно, $l_{\min}=0$, причем при $l=0$ центробежный член в (16) должен быть положен равным нулю. При $l=l_{\max}$ (рис. 1) все выражение, стоящее в квадратной скобке (16), мало по сравнению с соответствующим значением при $l=0$, отсюда

$$\frac{dN}{d\varkappa}=\frac{4\varkappa^2}{3\pi}r^3\left\{E_m-\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}\right\}. \tag{17}$$

Таким образом, использование квазиклассического приближения и Фурье-преобразования волновых функций позволило получить выражение для плотности электронов в импульсном пространстве. Это выражение также справедливо для сферически-симметричного потенциала достаточно общего вида, но имеющего максимум две точки поворота.

Полученное выражение (17) нормировано на полное число электронов в атоме и с точностью до слагаемого E_m в аргументе функции $r\ \{U\}$ совпадает с выводами статистичес-

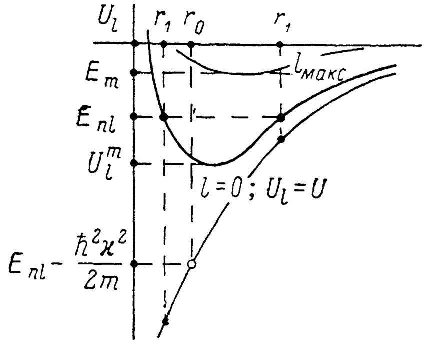

Рис. 1. К методу расчета.

кой теории атома [4]. Однако достаточно грубые представления [4] о том, что плотность электронов в фазовом пространстве равна $2/(2\pi\hbar)^3$ и координата, импульс и энергия атомного электрона связаны классическим законом сохранения энергии, в данной работе не использовались. Что касается последнего, то его аналогом в квазиклассическом приближении оказалось выражение (7), определяющее точку стационарной фазы.

Литература

[1] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.
[2] *Мигдал А. Б., Крайнов В. П.* Приближенные методы квантовой механики. М.: Наука, 1966. 152 с.
[3] *Федорюк М. В.* Метод перевала. М.: Наука, 1977. 368 с.
[4] *Гамбош П.* Статистическая теория атома и ее применения. М.: Изд-во иностр. лит., 1951. 398 с.

Ростовский-на-Дону государственный университет
Научно-исследовательский институт физики

Поступило в Редакцию
27 января 1988 г.
В окончательной редакции
27 июня 1988 г.

05; 09

Журнал технической физики, т. 59, в. 6, 1989

МАГНИТНЫЙ ШУМ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ ФЕРРИТ-ГРАНАТОВ

В. А. Григорьев, М. В. Быстров, Г. Ю. Перцович

В работе [1] был рассмотрен способ преодоления статической коэрцитивности доменных стенок в одноосных эпитаксиальных пленках феррит-гранатов при помощи возмущающего синусоидального магнитного поля, приложенного в легком направлении. В результате такого воздействия значительно снижается порог реагирования доменной структуры на измеряемое или управляющее магнитное поле в зависимости от того, используется ли пленка в качестве магнитного сенсора или модулятора. Можно предположить, что указанное возмущение доменной структуры переменным полем будет сопровождаться магнитным шумом, связанным с нерегулярным движением стенок — скачками Баркгаузена.