Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Рейтій Олександр Костянтинович

УДК 539.186

КВАЗІКЛАСИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ ДЛЯ РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ ОДНО- ТА ДВОЦЕНТРОВИХ КВАНТОВО-МЕХАНІЧНИХ ЗАДАЧ

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат

дисертації на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2002

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики Ужгородського національного університету

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор

Лазур Володимир Юрійович,

Ужгородський національний університет,

завідувач кафедри теоретичної фізики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор

Нікітін Анатолій Глібович,

Інститут математики НАН України,

завідувач відділу прикладних досліджень

доктор фізико-математичних наук, професор

Мальнєв Вадим Миколайович,

Київський національний університет

імені Тараса Шевченка, професор кафедри квантової теорії поля

Провідна установа: Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, м. Київ

Захист відбудеться 28 січня 2003 р. о 12.00 год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д26.001.08 Київського національного університету імені Тараса Шевченка (03022, м. Київ, проспект Академіка Глушкова, 2, корп.1, фізичний факультет).

З дисертацією можна ознайомитися у науковій бібліотеці Київського національного університету імені Тараса Шевченка (м. Київ, вул. Володимирська, 66).

Автореферат розісланий "___" грудня 2002 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради
кандидат фізико-математичних наук О.С. Свечнікова

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Поява в багатьох лабораторіях світу сучасних потужних іонних прискорювачів дозволила отримати унікальний експериментальний матеріал, особливо по багатозарядним іонам і елементарним іон-іонним та іон-атомним процесам, і одночасно стимулююче вплинула на теорію атомних зіткнень. Однак, як правило, головна увага при цьому приділялась нерелятивістським аспектам теорії. Релятивістські системи – важкі та надважкі квазіатоми і квазімолекули, що утворюються в процесі зіткнення повільних багатозарядних іонів із сумарним зарядом ядер $Z_1 + Z_2 > 137$, вивчені значно менше. Послідовна теорія таких систем повинна ґрунтуватися на релятивістських хвильових рівняннях в зовнішньому полі з урахуванням того, що релятивістські ефекти складають вже не малі поправки, а суттєво визначають порядки спектральних характеристик. Можна очікувати, що подібна ситуація матиме місце і при розрахунках зміни спектра релятивістського атома в зовнішніх електромагнітних полях.

Останнім часом значний інтерес викликають (2+1)-вимірні версії релятивістської квантової механіки та квантової електродинаміки. Такі теорії є не тільки спрощеними версіями (3+1)-вимірних: за рахунок непарної кількості вимірів в них з'являється ряд нових, нетривіальних властивостей таких, як дробовий заряд, аномальна статистика, тощо. В зв'язку з цим серйозну увагу привертають дослідження фізичних ефектів, які відбуваються в (2+1)-вимірних системах заряджених частинок та античастинок при наявності сильних зовнішніх полів в області релятивістських енергій зв'язку в просторах зниженої розмірності.

Втім, точне розв'язання рівняння Дірака з реалістичними атомними і міжатомними потенціалами наштовхується на суттєві математичні труднощі. Для відшукання розв'язків найчастіше застосовуються або числові, або асимптотичні методи. В багатьох теоретичних і прикладних питаннях саме можливість отримати асимптотичний розв'язок дозволяє провести найбільш повний аналіз задачі. Тому навряд чи є необхідність більш детально пояснювати важливість створення і дослідження асимптотичних методів розв'язання рівняння Дірака.

Квазікласичне наближення Венцеля-Крамерса-Бріллюена (або метод ВКБ) є одним із основних і найбільш універсальних асимптотичних методів розв'язування задач квантової механіки та теоретичної і математичної фізики, для яких або невідомі, або надто громіздкі точні розв'язки. Розробці нових і розвиненню запропонованих раніше версій цього методу для рівняння Дірака в сильних зовнішніх полях та їх застосуванню до вивчення особливостей в енергетичних спектрах релятивістських одно- та двоцентрових квантово-механічних задач і присвячена дана дисертаційна робота.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дослідження, результати яких включені в дисертаційну роботу, виконані згідно з такими науково-дослідними темами Ужгород-

ського національного університету:

1. ДБ-325 “Фундаментальні проблеми фізики іон-атомних та іон-іонних взаємодій: одно- та двоелектронні процеси з перерозподілом у непружних зіткненнях”, ДР-0198U003118.

2. ДБ-422 “Одно- та двоелектронні процеси з перерозподілом в теорії іон-атомних та іон-іонних зіткнень”, ДР-0100U005351.

Робота також виконувалася в рамках трьох міжнародних дослідницьких проектів:

1. “Дослідження елементарних процесів в плазмі ядерного походження”, Міжнародне агентство з атомної енергії (Відень, Австрія), Contr. No 8843/RB.

2. “Фундаментальні проблеми іон-іонної взаємодії: електронний перерозподіл в непружних зіткненнях”, Міжнародна асоціація із сприяння співпраці з вченими з незалежних держав колишнього Радянського Союзу INTAS (Брюссель, Бельгія), Ref. No 94-4698.

3. “Фемтосекундні процеси зіткнення та радіаційні явища в атомних системах, що взаємодіють з іонними пучками та інтенсивними лазерними імпульсами”, Міжнародна асоціація із сприяння співпраці з вченими з незалежних держав колишнього Радянського Союзу INTAS (Брюссель, Бельгія), Ref. No 99-01326.

Мета і задачі дослідження. *Об’єкт дослідження:* релятивістські одно- та двоцентрові квантово-механічні системи – важкі і надважкі квазіатоми та квазімолекули, а також системи, що утворюються при їх взаємодії з іншими атомними частинками або з зовнішніми електромагнітними полями. *Предметом дослідження* є релятивістські спектри одно- та двоцентрових квантово-механічних задач та вивчення впливу на їх характеристики різних фізичних ефектів – кулонівських, бар’єрних, обмінних, просторової розмірності, тощо. *Метою* роботи є розробка нових і розвинення запропонованих раніше версій квазікласичного наближення (*методу дослідження*) для рівняння Дірака в сильних зовнішніх полях та їх застосування до вивчення особливостей в енергетичних спектрах трьох релятивістських квантово-механічних систем, що мають для атомної фізики характер фундаментальних еталонних *задач*: квантово-механічної задачі двох центрів для рівняння Дірака; сферичної моделі ефекту Штарка в релятивістському водневоподібному атомі (іоні) в двох і трьох просторових вимірах; релятивістської кулонівської задачі протяжного ядра в просторах зниженої розмірності.

Наукова новизна одержаних результатів. В дисертаційній роботі вперше:

1. Розвинуто послідовну схему отримання ВКБ-розкладів для рівняння Дірака з довільним аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає відокремлення змінних. В параксіальному наближенні Фока-Леонтовича побудовано квазікласичні зосереджені розв’язки стаціонарного рівняння Дірака в класично забороненій (підбар’єрній) області.

2. За допомогою розвинутого квазікласичного методу докладно проаналізовано дискретний спектр релятивістської задачі двох кулонівських центрів $Z_1 e Z_2$ в границі роз’єднаних атомів.

Обчислено перші два члени асимптотичного розкладу величини обмінного розщеплення адіабатичних термів даної задачі при великих міжцентрових відстанях.

3. Отримано асимптотичні формули для енергії системи $Z_1 e Z_2$ при великих міжцентрових відстанях ($R >> 1$) з точністю до членів $O(R^{-3})$ та в границі об'єднаного атома ($R << 1$) з точністю до $O(R^3)$ для випадків однакових і різних зарядів Z_1, Z_2.

4. За допомогою техніки лівих та правих власних векторів відповідної однорідної системи розроблено рекурентну схему отримання ВКБ-розкладів для рівняння Дірака з довільним центральносиметричним потенціалом бар'єрного типу в двох та трьох просторових вимірах. На прикладі сферичної моделі ефекту Штарка розраховано квазістаціонарний спектр (положення та ширину рівнів) релятивістського двовимірного та тривимірного водневоподібного атома (іона).

5. Знайдено точні розв'язки (2+1)-вимірного рівняння Дірака для електрона в кулонівському полі ядра при $Z > 137/2$, коли в наближенні точкового заряду Z відбувається "падіння на центр". Для однієї простої моделі протяжного джерела отримано трансцендентне рівняння, яке визначає рівні електронних станів в області $137 < 2Z < 2Z_{cr}$. Виведено рівняння для визначення критичного заряду Z_{cr}, обчислено середній радіус двовимірної водневоподібної системи.

6. За допомогою методу ВКБ для рівняння Дірака в сильному зовнішньому полі вивчено питання про квазістаціонарні рівні, що лежать в нижньому континуумі в 2+1 вимірах. Обчислено енергію і ширину квазістаціонарних станів, що є продовженням рівнів дискретного спектра при $Z > Z_{cr}$. Проведено порівняльне вивчення спектрів (2+1)- і (3+1)-вимірного рівняння Дірака в кулонівському полі протяжного джерела в докритичній $Z < Z_{cr}$ і закритичній $Z > Z_{cr}$ областях.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані результати мають загальнотеоретичний характер, а частина з них має практичне значення для дослідження електронної структури важких і надважких квазімолекул та квазіатомів, при розрахунках термів багатозарядних легких квазімолекул, для вивчення одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом (перезарядки, іонізації) у повільних зіткненнях важких багатозарядних іонів з іншими частинками (іонами, атомами, молекулами та ін.), для описання ефектів спонтанного народження позитронів у надкритичному полі важких ядер, при розгляді вакуумної оболонки надкритичного атома, а також з точки зору дослідження штарківської іонізації рівнів тонкої структури (з енергією зв'язку порядку mc^2) релятивістських атомів під дією зовнішніх полів. Зазначимо, що експерименти з важкими іонами, сумарний заряд яких перевищує критичний, вже ведуться з метою виявлення ефекту спонтанного народження позитронів кулонівським полем.

Одержана в дисертації квазікласична формула для величини обмінного розщеплення квазімолекулярних термів ΔE в релятивістській задачі $Z_1 e Z_2$ уже використовувалася нашими

партнерами по спільному проекті від міжнародної асоціації INTAS (Ref. No. 99-01326) при побудові асимптотичної теорії процесів одноелектронної перезарядки. Знайдені асимптотичні розклади для енергії системи $Z_1 e Z_2$ при великих та малих міжцентрових відстанях є основним технічним засобом при побудові релятивістських одноелектронних кореляційних діаграм важких квазімолекул в області між границями об'єднаного та роз'єднаного атомів.

Особистий внесок здобувача. В працях, що виконані зі співавторами, особистий внесок здобувача полягав в постановці задач, виконанні числових та аналітичних розрахунків, аналізі отриманих результатів та формулюванні висновків. Ці роботи виконані на рівних засадах, а результати, включені до дисертації на основі таких публікацій, одержані автором самостійно. Зокрема, у колективних працях, присвячених релятивістській задачі двох кулонівських центрів [1-5, 10-13], автором розроблено нову тривимірну версію методу ВКБ для рівняння Дірака з аксіально-симетричними потенціалами і отримано степеневі та обмінні поправки до енергетичних термів релятивістської задачі $Z_1 e Z_2$. В працях [7, 14], присвячених ефекту Штарка, дисертанту належить розвинення рекурентної схеми отримання ВКБ-розкладів для рівняння Дірака з довільним центральносиметричним потенціалом бар'єрного типу в двох і трьох просторових вимірах, а також розрахунок квазістаціонарного спектра (положення та ширини рівнів) релятивістського водневоподібного атома (іона) у зовнішньому сферично-симетричному полі. В працях [8,9,15,16] автором отримано точні розв'язки релятивістської кулонівської задачі протяжного джерела в 2+1 вимірах в докритичній області, а також узагальнено метод ВКБ для сферично-симетричних потенціалів на двовимірний випадок. В рамках квазікласичного підходу дисертант одержав трансцендентне рівняння для положення квазістаціонарних рівнів та докладно проаналізував його розв'язки асимптотичними і числовими методами. Автору належить також виведення аналітичного виразу для ширини рівнів в закритичній області.

Апробація результатів дисертації. Результати, викладені в дисертації, доповідалися і обговорювалися на Підсумкових наукових конференціях викладачів та наукових співробітників фізичного факультету УжНУ (Ужгород, 1998-2002 рр.), на Міжрегіональній науково-практичній конференції "Фізика конденсованих систем" (Ужгород, 23 січня 1998 р.), на Міжнародній конференції з актуальних проблем сучасної теоретичної фізики, присвяченій пам'яті проф. Ю.М. Ломсадзе (Ужгород, 20-23 жовтня 1999 р.), на міжнародних конференціях з теоретичної фізики "Small Triangle Meeting" – "Зустрічах малого трикутника" – (Кошіце, Словаччина, 25-26 жовтня 1999 р. та 2000 р., Сніна, Словаччина, 25-26 вересня 2001 р.), на Міжнародній конференції з елементарних процесів в атомних системах CEPAS-2000 (Ужгород, 25-28 липня 2000 р.), на IV Міжнародній конференції Балканського Фізичного Товариства BPU-4 (Веліко-Тирново, Болгарія, 22-25 серпня 2000 р.), на Науковій конференції східного відділення Угорської академії наук (Ніредьгаза, Угорщина, 22-24 вересня 2000 р.), на XIII Міжнародній школі з математичної та

теоретичної фізики (Ужгород–Київ–Івано-Франківськ, 11-24 вересня 2000 р.), на Міжнародному семінарі учасників проекту INTAS (Москва, Росія, 23-24 жовтня 2000 р.), на IV Міжнародній конференції “Симетрія в нелінійній математичній фізиці” (Київ, 9-15 липня 2001 р.), на Українському математичному конгресі (Київ, 21-23 серпня 2001 р.), на Всеукраїнській конференції молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРІКА-2002 (Львів, 22-24 травня, 2002), а також на наукових семінарах УжНУ, Інституту електронної фізики НАН України, Інституту математики НАН України.

Публікації. Результати виконаних в дисертації досліджень опубліковано в 18 роботах, 9 з яких вийшли у вигляді статей у вітчизняних та зарубіжних наукових журналах, і 9 видані як тези конференцій. Працю, опубліковану в міжнародному журналі Journal of Physics B, включено до всесвітньої бази даних RTAM (Relativistic Theory of Atoms and Molecules) з релятивістської теорії атомів та молекул.

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається з Вступу, чотирьох оригінальних розділів, які містять 27 підрозділів, Висновків, Списку використаних джерел та Додатку. Робота викладена на 159 сторінках та проілюстрована в тексті 12 рисунками; обсяг Списку використаних джерел (168 найменувань) – 16 сторінок, Додатку – 3 сторінки.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі окреслено проблематику і обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету і задачі дослідження. Визначено наукову новизну, наукове та практичне значення одержаних результатів, наведено інформацію про апробацію результатів роботи, публікації та особистий внесок автора в праці, виконані в співавторстві.

Проведений в першому розділі огляд розвитку уявлень про важкі та надважкі квазімолекули і квазімолекулярні процеси показує, що цей новий напрямок атомної фізики вельми плідний в швидко прогресуючій галузі дослідження взаємодії багатозарядних іонів з речовиною. Квазімолекулярний розгляд конче необхідний в радіаційній фізиці, при розгляді вакуумної оболонки надкритичних атомів, в теорії одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом в повільних зіткненнях багатозарядних іонів з іншими атомними частинками, при вивченні властивостей трансуранових елементів шляхом утворення надважких квазімолекул та процесів в електронних оболонках під час поділу ядер. Теоретичний опис перерахованих квазімолекулярних ефектів зводиться, перш за все, до розвитку релятивістської теорії спектрів трьох досліджених в дисертаційній роботі квантово-механічних задач – задачі двох центрів $Z_1 e Z_2$ для рівняння Дірака, сферичної моделі ефекту Штарка в релятивістському атомі (іоні) в двох і трьох просторових вимірах, релятивістської кулонівської задачі протяжного ядра в 2+1 вимірах.

Другий розділ дисертації присвячено аналізу асимптотичними методами дискретного спектра релятивістської задачі двох кулонівських центрів $Z_1 e Z_2$. Трудність розгляду задачі пов'язана з тим, що рівняння Дірака не відокремлюється для потенціалу двох кулонівських центрів в жодній ортогональній системі координат і доводиться мати справу з системою рівнянь в частинних похідних першого порядку, що істотно ускладнює всю конкретну проблему знаходження термів і хвильових функцій електрона. Для обчислення степеневих поправок до енергії $E(R)$ системи $Z_1 e Z_2$ використовується метод теорії збурень, який не вимагає відокремлення змінних. Окремо розглянуто два граничні випадки: малих (підрозділ 2.2) і великих (підрозділ 2.3) між'ядерних відстаней R. В якості нульового наближення використовуються енергії та хвильові функції релятивістського об'єднаного і роз'єднаного атомів із зарядом ядер $Z = Z_1 + Z_2$ і $Z = Z_1$ (або $Z = Z_2$), відповідно. В результаті проведених обчислень одержано асимптотичний розклад для енергії системи $Z_1 e Z_2$ при малих міжцентрових відстанях:

$$E_{njlm}(R) = \varepsilon c^2 + \frac{Z_1 Z_2}{2N^3} \cdot \frac{3m^2 - j(j+1)}{j(j+1)} \cdot \frac{3\varepsilon\varkappa(\varepsilon\varkappa - 1) - \gamma^2 + 1}{\gamma(\gamma^2 - 1)(4\gamma^2 - 1)} (ZR)^2 + O(R^3), \qquad (1)$$

де $\varepsilon = \left[1 + Z^2\alpha^2 / (n_r + \gamma)^2\right]^{-1/2}$, $\gamma = \sqrt{k^2 - (Z\alpha)^2}$, $N = Z/\lambda$, $\lambda = c\sqrt{1-\varepsilon^2}$, $\varkappa = (-1)^{k-l} k$, $k = j + 1/2$, n_r – радіальне квантове число, j і $l = j \pm 1/2$ – повний і орбітальний моменти електрона, m – проекція j на між'ядерну вісь, $\alpha = 1/c \approx 1/137$ – стала тонкої структури. Проведено порівняння обчислених за асимптотичною формулою (1) енергій зв'язку кількох станів системи Pb-Pb (див. рис. 2.1 дисертації) з наявними в літературі прецизійними числовими розрахунками енергії цієї ж системи при малих міжцентрових відстанях. Розбіжність в результатах складає ~5% і пояснюється врахуванням у згаданих числових розрахунках скінчених розмірів ядра. Порівняння асимптотичного виразу (1) для енергії системи з його нерелятивістським аналогом показує, що із зростанням сумарного заряду ядер Z та міжцентрових відстаней R роль релятивістських ефектів зростає.

Власні значення енергії (терми) системи $Z_1 e Z_2$ з різними зарядами Z_1 та Z_2 розпадаються в асимптотичній границі $R \to \infty$ на дві серії: E_I- та E_{II}-терми, які при $R \to \infty$ переходять в енергетичні рівні ізольованих атомів eZ_1 і eZ_2, відповідно. В першому порядку теорії збурень для E_I-терму отримано асимптотичний вираз у формі розкладу за оберненими степенями великої між'ядерної відстані R:

$$E_I(R) = \varepsilon_1 c^2 - \frac{Z_2}{R} \pm \frac{3Z_2}{4R^2} \sqrt{N_1^2 - \varkappa_1^2} \, \frac{(n_{r_1} + \gamma_1) m_1}{j_1(j_1+1) Z_1} + O(R^{-3}), \qquad (2)$$

де величини ε_1, γ_1, N_1, λ_1, $\aleph_1$, n_{r_1} j_1, l_1, m_1 означені в формулі (1), але в цьому разі характеризують стани ізольованого eZ_1-атома. Формула (2) дає розклад за мультиполями енергії електростатичної взаємодії релятивістського атома з віддаленим точковим зарядом Z_2. Вираз для E_{II}-терму одержується з формули (2) замінами індексів $1 \leftrightarrow 2$. Потреба у використанні отриманих асимптотичних формул (1), (2) для енергії системи $Z_1 e Z_2$ виникає кожен раз, коли приходиться будувати релятивістські одноелектронні кореляційні діаграми важких квазімолекул в області між границями об'єднаного та роз'єднаного атомів.

Підрозділи 2.4-2.6 дисертації присвячені розробці релятивістської теорії дискретного спектра двоцентрової задачі $Z_1 e Z_2$ при великих між'ядерних відстанях *R*. На підставі параксіального наближення Фока-Леонтовича побудовано (підрозділ 2.4) квазікласичні зосереджені розв'язки стаціонарного рівняння Дірака у зовнішньому аксіально-симетричному полі. Основні технічні прийоми пропонованого тут методу побудови формальних асимптотик за малим параметром $\hbar \to 0$ (сталою Планка $\hbar$) розв'язків цього рівняння полягають в наступному:

А. Спочатку вихідне рівняння Дірака з довільним аксіально-симетричним потенціалом $V(\vec{r})$ зводиться до рівняння другого порядку. При цьому для кожної компоненти діраківського біспінора отримуємо матричне диференціальне рівняння другого порядку (типу рівняння Шредінгера).

Б. На другому етапі розв'язок згаданого матричного рівняння після відокремлення кутової змінної φ (z, ρ, φ – циліндричні координати електрона) зображається у вигляді добутку швидко осцилюючого (експоненційного) фазового множника на повільно осцилюючу амплітуду у формі розкладу за степенями сталої Планка $\hbar$. Підстановка розв'язку у такому вигляді в отримане рівняння другого порядку дає рекурентну систему диференціальних рівнянь першого порядку для коефіцієнтів розкладу, які є функціями від z, ρ і не допускають відокремлення змінних

В. При спрощенні ланцюжка матричних диференціальних рівнянь сприятливою є та обставина, що для розв'язання багатьох квантово-механічних задач (наприклад, задачі про тунельний розпад релятивістського атома в постійному електричному полі, розглядуваної в дисертації релятивістської задачі двох кулонівських центрів $Z_1 e Z_2$, тощо) достатньо знати хвильову функцію не у всьому конфігураційному просторі, а тільки в околі деякого многовиду *M* меншої розмірності, де вона в основному зосереджується. Стани, що описуються такими хвильовими функціями, називаються "локалізованими". Потенціал $V(\vec{r})$ в цьому випадку природно розкласти з точністю до квадратичних членів за координатами, перпендикулярними до многовиду *M*, в околі якого отримана система рівнянь зводиться до більш простої, що допускає точне розв'язання. (Сформульоване наближення, в якому розв'язання квантово-механічної задачі у всьому конфігураційному просторі можна звести до її розв'язання на многовиді *M* меншої розмірності, називають параксіальним, а сам розв'язок – квазікласично зосередженим.) Це дало можливість

знайти наближені квазікласично зосереджені розв'язки вихідного рівняння Дірака з довільним аксіально-симетричним потенціалом в класично забороненій області та розглянути широке коло питань релятивістської теорії дискретного спектра задачі Z_1eZ_2 в асимптотичній області ($R>>1$). Зокрема, для розв'язків цієї задачі, зосереджених в околі між'ядерної осі $\vec{R}$, знайдено зручні аналітичні вирази в підбар'єрній області (підрозділ 2.5). Ці розв'язки зшиваються потім з асимптотиками незбурених атомних хвильових функцій дираківського електрона в області перекривання: $2Z_1/\lambda_1^2 << z << R$. Зображаючи шукану величину обмінного розщеплення термів $\Delta E(R)$ задачі Z_1eZ_2 у формі поверхневого інтеграла та обчислюючи його за допомогою багатовимірного методу стаціонарної фази (підрозділ 2.6), отримано асимптотичний розклад для $\Delta E(R)$ при великих міжцентрових відстанях з точністю до членів $O(R^{-2})$:

$$\Delta E = \frac{2A_1A_2}{(|m|-1/2)!(\lambda_1+\lambda_2)^{|m|-1/2}} D_{j_1j_2m} R^{a-|m|-1/2} exp\left\{-\frac{R(\lambda_1+\lambda_2)+a}{2}\right\}\left[1+\frac{I_1+I_2}{R}\right], \qquad (3)$$

де $A_{1,2}$ – асимптотичні коефіцієнти незбурених атомних радіальних хвильових функцій, $a=\varepsilon_1Z_2/\lambda_1+\varepsilon_2Z_1/\lambda_2$, $m=m_1=m_2$, а величини $I_{1,2}$, $D_{j_1j_2m}$ виражаються через заряди $Z_{1,2}$, енергетичні параметри $\varepsilon_{1,2}$, $\lambda_{1,2}$ та квантові числа ізольованих eZ_1- та eZ_2-атомів (див. формули (2.49), (2.50) дисертації). Оцінено вклади степеневих (мультипольних) (2) та експоненційно малих (обмінних) (3) поправок до енергії системи Z_1eZ_2 в залежності від R. Встановлено, що в асимптотичній області ($R>>1$) домінуючими є мультипольні члени (2), а при проміжних значеннях R – навпаки, превалює експоненційна поправка (3) до енергії системи. Результати релятивістського (згідно формули (3)) та аналогічного нерелятивістського варіантів розрахунку величини $\Delta E(R)$ показують, що із збільшенням зарядів ядер вклад релятивістських ефектів у обмінне розщеплення термів зростає і складає ~50% вже при $Z=45$, а, починаючи із $Z>75$, визначає порядок цієї величини. Шляхом розв'язання рівняння Дірака з "обрізаним" на малих відстанях кулонівським потенціалом проведено (підрозділ 2.7) узагальнення отриманих асимптотичних формул (2) і (3) на випадок двоцентрової задачі із зарядами ядер $Z_{1,2}>137$.

В розглянутому в третьому розділі випадку центральносиметричних потенціалів $V(r)$ рівняння Дірака в 2+1 і 3+1 вимірах зводиться після відокремлення кутових змінних до системи матричних рівнянь першого порядку для радіальних функцій $F(r)$ і $G(r)$. Розклад цих функцій за степенями $\hbar$ приводить до ланцюжка матричних диференціальних рівнянь, котрі розв'язуються в підрозділі 3.2 рекурентно за допомогою відомої техніки лівих і правих власних векторів відповідної однорідної системи. Це дозволило побудувати наближені (в різних порядках за

степенями $\hbar$) квазікласичні розв'язки рівняння Дірака з довільним центральносиметричним потенціалом бар'єрного типу в двох та трьох просторових вимірах. Знайдено явний вигляд хвильових функцій дираківського електрона в класично дозволеній та забороненій областях, отримано (методом Цваана) правила їх зшивання при переході через точки повороту (підрозділ 3.3). На основі квазікласичних розв'язків рівняння Дірака отримано (підрозділ 3.4) релятивістський аналог правила квантування Бора-Зоммерфельда:

$$\int_{r_0}^{r_-}\left(p+\frac{\varkappa w}{pr}\right)dr=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\,,\quad n=0,1,2,\ldots, \tag{4а}$$

$$p(r)=\frac{1}{c}\sqrt{(E-V)^2-c^4-\frac{c^2\varkappa^2}{r^2}}\,,\qquad w=\frac{1}{2}\left(\frac{V'}{c^2+E-V}-\frac{1}{r}\right), \tag{4б}$$

та загальний аналітичний вираз для ширини розпаду квазістаціонарного стану у випадку достатньо широкого потенціального бар'єра:

$$\Gamma=-2c\,Im\left[G^*F\right]_{r\to\infty}=\frac{1}{T}exp\left[-2\int_{r_-}^{r_+}\left(q-\frac{\varkappa w}{qr}\right)dr\right],\qquad T=\frac{2}{c^3}\int_{r_0}^{r_-}\frac{E-V(r)}{p(r)}\,dr\,. \tag{5}$$

Тут r_0, r_-, r_+ – точки повороту, в яких квазікласичний імпульс $p(r)$ для радіального руху обертається в нуль, c – швидкість світла у вакуумі, а $\varkappa=\mp(j+1/2)$ ($\varkappa=-(l+1/2)$) – для 3+1 (2+1) вимірів (j і $l+1/2$ – власні значення оператора повного кутового моменту в 3+1 і, відповідно, в 2+1 вимірах). Отримані формули (4), (5) відрізняються від відповідних формул нерелятивістської квазікласики релятивістським виразом для квазіімпульсу $p(r)$ та включенням поправки $\sim w$, зумовленої спін-орбітальною взаємодією. На прикладі сферичної моделі ефекту Штарка розраховано квазістаціонарний спектр (положення E та ширину рівнів Γ) релятивістського водневоподібного атома (іона) в двох і трьох просторових вимірах. В граничному випадку слабого поля $F<<1$ для положення E і ширини Γ рівнів тонкої структури двовимірного та тривимірного водневоподібних атомів отримано відносно прості аналітичні формули (підрозділи 3.5, 3.6):

$$E=E_0+\frac{F}{2Z}\left[\varkappa-\varepsilon_0\left(\frac{3Z^2}{\lambda_0^2}-\varkappa^2\right)+\frac{Z\,sgn\varkappa}{\lambda_0}\left(1-\varepsilon_0+2\varepsilon_0^2-\frac{Z^2\alpha^2(1-\varepsilon_0)^2}{\varkappa^2(1+\varepsilon_0)}\right)\right], \tag{6}$$

$$\Gamma=2\lambda_0\left|A_{ac}\right|^2\left(\frac{2\lambda_0^2}{F}\right)^{\frac{2\varepsilon_0 Z}{\lambda_0}}exp\left[-\frac{arccos\,\varepsilon_0-\varepsilon_0\sqrt{1-\varepsilon_0^2}}{\alpha^3F}+2Z\alpha\,arccos\,\varepsilon_0\right], \tag{7}$$

де $\lambda_0 = c\sqrt{1-\varepsilon_0^2}$, $\varepsilon_0 = E_0/c^2$, $\varepsilon_0 = \left[1+Z^2\alpha^2/(n_r+\gamma)^2\right]^{-1/2}$, $\gamma = \sqrt{\varkappa^2 - Z^2\alpha^2}$, $n_r = n+(sgn\varkappa+1)/2$ – радіальне квантове число, $\alpha = 1/c \approx 1/137$ – стала тонкої структури. Одержані формули (6), (7) охоплюють, в якості граничних випадків, як іонізацію нерелятивістських зв'язаних систем (атоми, іони), так і випадок $E = -mc^2$, коли ширина рівня Г зрівнюється з ймовірністю народження електрон-позитронних пар з вакууму в сильному полі. Досліджено вплив релятивістських ефектів та просторової розмірності на положення E і ширину Г квазістаціонарних рівнів. Із проведених в підрозділі 3.5 (згідно (6), (7)) обчислень E і Г випливає, що зі збільшенням заряду ядра Z та із зменшенням напруженості електричного поля F, вплив релятивістських ефектів на вказані характеристики зростає, а залежність ширини рівня від Z і F є, крім того, ще й досить різкою. Вплив двовимірності простору на ширину Г є вельми істотним і, як показують розрахунки, зростає із зменшенням як енергії E, так і напруженості електричного поля F.

В четвертому розділі досліджуються деякі невивчені раніше принципові аспекти релятивістської кулонівської задачі в просторах зниженої розмірності. Зокрема, в підрозділі 4.2 зроблено постановку задачі, проведено відокремлення часової і кутової змінних в (2+1)-вимірному рівнянні Дірака з довільним центральносиметричним потенціалом і коротко проаналізовано особливості планарного руху релятивістського електрона в кулонівському полі точкового джерела. Аналіз формули для тонкої структуру рівнів водневоподібного атома в двох просторових вимірах: $\varepsilon = \left[1+(Z\alpha)^2/(n_r+\gamma)^2\right]^{-1/2}$ (тут $\hbar = c = m_e = 1$, $\gamma = \sqrt{(l+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}$, n_r – радіальне квантове число, $l+1/2$ – власне значення оператора повного моменту) показує, що енергія основного стану $\varepsilon_0(Z) = \sqrt{1-(2Z\alpha)^2}$ із зростанням заряду Z зменшується і обертається в нуль при $Z\alpha = 1/2$, тоді як в тривимірному випадку енергія ферміона $\varepsilon_0 = 0$ при $Z\alpha = 1$. Таким чином, як в (3+1)-вимірній, так і в (2+1)-вимірній квантових теоріях вираз для енергії основного стану електрона в кулонівському полі точкового заряду втрачає зміст, коли $\varepsilon_0(Z)$ перетворюється в нуль. Продовження формули для $\varepsilon_0(Z)$ на область $2Z > 137$ приводить до комплексних значень енергії ε, що відповідає "падінню на центр". Врахування скінчених розмірів ядра (підрозділ 4.3) приводить, як і в (3+1)-вимірному випадку, до регуляризації кулонівського потенціалу при $r \to 0$ і дозволяє пройти точку $2Z = 137$ аж до "критичного" значення Z_{cr}, при якому енергія основного стану сягає межі нижнього континуума. Зокрема, для однієї простої моделі протяжного джерела отримано (підрозділ 4.3) точні нормовані розв'язки двовимірного рівняння Дірака, а також трансцендентне рівняння, яке визначає рівні основного та збуджених електронних станів в області $137 < 2Z < 2Z_{cr}$. В підрозділі 4.4 розглянуто випадок $\varepsilon = -1$ та одержано трансцендентне рівняння для визначення величини критичного заряду. Числове розв'язання цього рівняння для основного

стану показує, що величина критичного заряду в 2+1 вимірах ($Z_{cr}^{(2+1)} = 107$) значно менша його значення для тієї ж моделі ядра в 3+1 вимірах ($Z_{cr}^{(3+1)} = 173$). Таким чином, вакуум квантової електродинаміки в двох просторових вимірах в присутності сильного кулонівського поля є нестабільним по відношенню до народження електрон-позитронних пар при значно меншому критичному заряді, ніж у тривимірному випадку. В підрозділі 4.4 обчислено середній радіус двовимірної системи і показано, що при $Z \to Z_{cr}$ стан електрона, що лежить на межі нижнього енергетичного континууму ($\varepsilon \to -1$) залишається локалізованим (на відміну від станів з $\varepsilon \to +1$). Ця властивість релятивістської двовимірної кулонівської задачі вкрай важлива для пояснення явищ, які відбуваються в закритичній області $Z > Z_{cr}$.

Застосовуючи розроблену в попередньому розділі рекурентну схему отримання ВКБ-розкладів до системи рівнянь Дірака з кулонівським потенціалом при $Z > Z_{cr}$, в підрозділі 4.5 знайдено: 1) явний вигляд радіальних хвильових функцій в класично дозволеній та забороненій областях; 2) правила їх зшивання при переході через точки повороту; 3) трансцендентне рівняння для положення ε та аналітичний вираз для ширини Γ квазістаціонарних рівнів, що належать нижньому континууму ($\varepsilon < -1$) розв'язків рівняння Дірака в 2+1 вимірах:

$$\frac{\varepsilon Z\alpha}{2k} ln\frac{|\varepsilon| Z\alpha + k\theta}{|\varepsilon| Z\alpha - k\theta} - \theta\, ln\frac{r_N \mu}{2\theta^2} + \sigma\, arccos\frac{\theta^2 - \varepsilon\aleph^2}{Z\alpha\mu} + \left(\sigma - |\aleph|\right) arccos\frac{|l+1/2|}{Z\alpha} = \pi\left(n_r + \sigma\right), \tag{8}$$

$$\Gamma = \frac{k^2}{2}\left[|\varepsilon|\theta - \frac{Z\alpha}{2k} ln\left(\frac{|\varepsilon| Z\alpha + k\theta}{|\varepsilon| Z\alpha - k\theta}\right)\right]^{-1} exp\left\{-2\pi Z\alpha\left[\sqrt{1+1/k^2} - \sqrt{1-\rho_0^2}\right]\right\}. \tag{9}$$

(Тут $k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$, $\mu = \sqrt{(\varepsilon Z\alpha)^2 - (k\theta)^2}$, $\theta = \sqrt{(Z\alpha)^2 - (l+1/2)^2}$, $\rho_0 = |l+1/2|/Z\alpha$, $\sigma = sgn(l+1/2)/2$, r_N – радіус ядра). Проведене порівняльне вивчення спектрів (2+1)-вимірного і (3+1)-вимірного рівнянь Дірака вказує на значний вплив двовимірності простору на фізику явищ в закритичній області (положення та ширину квазістаціонарних рівнів). Особливо різко цей вплив проявляється для ширини Γ при значеннях заряду $Z \sim Z_{cr}$.

<u>У висновках</u> сформульовано отримані в дисертації основні результати.

<u>В додаток</u> винесено обчислення інтегралів, які виникають при нормуванні хвильової функції електрона в області енергій $-1 \le \varepsilon \le 1$ з урахуванням скінчених розмірів ядра та при розрахунках середнього радіуса системи.

ВИСНОВКИ

Дисертація присвячена розробці нових і розвиненню запропонованих раніше версій квазікласичного наближення (методу ВКБ) для рівняння Дірака в сильних зовнішніх полях та їх застосуванню до вивчення особливостей в енергетичних спектрах трьох релятивістських квантово-механічних систем, що мають для атомної фізики характер фундаментальних еталонних задач: квантово-механічної задачі двох центрів для рівняння Дірака; сферичної моделі ефекту Штарка в релятивістському водневоподібному атомі (іоні) в двох і трьох просторових вимірах; релятивістської кулонівської задачі протяжного ядра в просторах зниженої розмірності. Нижче сформульовано підсумки проведеного дослідження і основні положення, які висуваються автором на захист.

1. В рамках параксіального наближення Фока-Леонтовича розроблено релятивістську тривимірну версію методу ВКБ для рівняння Дірака з довільним аксіально-симетричним потенціалом, що не допускає повного відокремлення змінних.

2. За допомогою розвинутого квазікласичного методу докладно вивчено дискретний спектр релятивістської задачі двох центрів. Виявлено сильний вплив релятивістських ефектів на параметри, що визначають перезарядку атомів на важких багатозарядних іонах. Для основного ландау-зінерівського параметра – розщеплення термів в точках квазіперетину – обчислено перші два члени асимптотичного розкладу за великими міжцентровими відстанями.

3. В рамках теорії збурень для оператора енергії отримано декілька членів степеневого розкладу енергії електрона (термів) в релятивістській задачі $Z_1 e Z_2$ в граничних випадках великих та малих між'ядерних відстаней. Крім інтенсивно досліджуваних останнім часом процесів з перерозподілом частинок у повільних зіткненнях важких багатозарядних іонів, такі розклади використовуються при побудові релятивістських одноелектронних кореляційних діаграм важких квазімолекул в області між границями об'єднаного та роз'єднаного атомів.

4. За допомогою техніки лівих та правих власних векторів відповідної однорідної системи розроблено рекурентну схему отримання ВКБ-розкладів для рівняння Дірака з довільним центральносиметричним потенціалом бар'єрного типу в двох та трьох просторових вимірах. Знайдено явний вигляд хвильових функцій дираківського електрона в класично дозволеній та забороненій областях, отримано правила їх зшивання при переході через точки повороту. На основі квазікласичних розв'язків рівняння Дірака отримано релятивістський аналог правила квантування Бора-Зоммерфельда та загальний аналітичний вираз для ширини розпаду квазістаціонарного стану у випадку достатньо широкого потенціального бар'єра.

5. На прикладі сферичної моделі ефекту Штарка розраховано квазістаціонарний спектр (положення та ширину рівнів) релятивістського двовимірного та тривимірного водневоподібного

атома (іона) в зовнішньому центральносиметричному полі. Досліджено вплив релятивістських ефектів та просторової розмірності на положення і ширину квазістаціонарних рівнів.

6. Знайдено точні розв'язки (2+1)-вимірного рівняння Дірака для електрона в кулонівському полі ядра при $Z > 137/2$, коли в наближенні точкового заряду Z відбувається "падіння на центр". Для однієї простої моделі протяжного джерела (ядра) отримано трансцендентне рівняння, яке визначає рівні основного і збуджених електронних станів в області $137 < 2Z < 2Z_{cr}$. Виведено рівняння для визначення критичного заряду Z_{cr}, обчислено середній радіус двовимірної водневоподібної системи і показано, що при $Z \to Z_{cr}$ стан електрона, який лежить на межі нижнього континууму, залишається локалізованим.

7. За допомогою методу ВКБ для рівняння Дірака в сильному зовнішньому полі вивчено питання про квазістаціонарні рівні, що лежать в нижньому континуумі в 2+1 вимірах. Обчислено енергію і ширину квазістаціонарних станів, що є продовженням рівнів дискретного спектра при $Z > Z_{cr}$. Виявлено сильний вплив розмірності простору на: положення та ширину квазістаціонарних рівнів в нижньому континуумі розв'язків рівняння Дірака; значення критичних зарядів Z_{cr} для основного і збуджених станів; локалізацію електронної густини на межі нижнього континуума $\varepsilon = -1$; ефективний розмір системи при $Z > 137/2$, тощо. Проведене порівняльне вивчення спектрів (2+1)-вимірного та (3+1)-вимірного рівнянь Дірака в кулонівському полі протяжного джерела в докритичній $Z < Z_{cr}$ і закритичній $Z > Z_{cr}$ областях є суттєвим доповненням до відомої теорії надкритичних атомів.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Лазур В.Ю., Король І.Ю., Горват П.П., Мигалина С.І., Рейтій О.К. Квазікласичний підхід до проблеми розщеплення термів у релятивістській задачі двох центрів // Доповіді НАН України. – 1997. – №11. – С. 83-88.

2. Катернога А.В., Лазур В.Ю., Рейтій О.К. Асимптотичні методи в релятивістських задачах з невідокремлювальними змінними // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія "Фізика". – 2000. – №7. – С. 70-76.

3. Lazur V.Yu., Reity O.K. WKB-Method in the Two-Center Problem for the Dirac Equation // Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics. – 2000. – Issue 8, part 2. – P. 255-260.

4. Reity O.K., Lazur V.Yu., Katernoha A.V. The quantum mechanical two-Coulomb-centre problem in the Dirac equation framework // J. Phys. B. – 2002. – Vol. 35, No 1. – P. 1-17.

5. Reity O.K., Lazur V.Yu. The relativistic two-Coulomb-centre problem at small and large inter-centre separations // Укр. фіз. жур. – 2002. – Т. 47, №3. – С. 280-287.

6. Reity O.K. Asymptotic Expansions of the Potential Curves in the Relativistic Quantum-mechanical Two-Coulomb-Centre Problem // Proc. Inst. Math. NAS Ukraine. – 2002. – Vol. 43, Part 2. – P. 676-682.

7. Горват А.А. (мол.), Лазур В.Ю., Рейтій О.К. Релятивістська сферична модель ефекту Штарка у водневоподібному іоні // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія “Фізика”. – 2000. – №6. – С. 48-60.

8. Рейтій О.К., Лазур В.Ю. Релятивістський водневоподібний атом в 2+1 вимірах // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія “Фізика”. – 2001. – №9. – С. 94-109.

9. Reity O.K., Lazur V.Yu. WKB method for the Dirac equation with central-symmetrical potential and its application to the theory of two dimensional supercritical atoms // Proc. Inst. Math. NAS Ukraine. – 2002. – Vol. 43, Part 2. – P. 672-675.

10. Лазур В.Ю., Рейтій О.К., Мигалина С.І. Квазікласичні розв’язки релятивістської задачі двох кулонівських центрів // Зб. тезисів міжрегіональної науково-практичної конференції “Фізика конденсованих систем”. – Ужгород. – 1998. – С. 53-54.

11. Lazur V.Yu., Reity O.K. WKB-method in the Two-Center Problem for the Dirac Equation // Abst. Conf. Elem. Proc. Atom. Sys. – Uzhgorod. – 2000. – P. 116.

12. Lazur V.Yu., Khoma M.V., Reity O.K., Horvat A.A. WKB method for the Dirac equation // 1-st Periodic Report (01. May 2000 – 30. April 2001) of the INTAS Project No. 99-01326. – Gissen. – 2001. – P. 76-84.

13. Lazur V.Yu., Reity O.K. WKB-Method in the Two-Center Problem for the Dirac Equation // Proc. Small Trian. Meet. Theor. Phys. – Košice. – 2000. – P. 40-43

14. Horvat A., Lazur V., Reity O. Semiclassical Approach for the Dirac Equation with a Spherically Symmetric Potential // Tudományos Üléseinek Elóadás – Összefoglalói. Szabolcs – Szatmár – Bereg Megyei Tudományos Testülete. – Nyiregyháza. – 2000. – P. 35.

15. Reity O.K., Lazur V.Yu. WKB Method for the Dirac Equation with a Strong Coulomb Field and Its Application to the Theory of Two-Dimensional Supercritical Atoms // Proc. Small Trian. Meet. Theor. Phys. – Košice. – 2001. – P. 36-42.

16. Рейтій О.К., Лазур В.Ю. Рівняння Дірака в сильному кулонівському полі в 2+1 вимірах // Зб. тез Всеукраїнської конференції молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРІКА-2002”. – Львів. – 2002. – С. 152-153.

17. Lazur V.Yu., Khoma M.V., Reity O.K., Horvat A.A. The relativistic spherical model of Stark effect in H-like ion // 2-st Periodic Report (01. May 2001 – 30. April 2002) of the INTAS Project No. 99-01326. – Gissen. – 2002. – P. 94-97.

18. Lazur V.Yu., Khoma M.V., Reity O.K., Horvat A.A. The relativistic Coulomb problem in two spatial dimensions // 2-st Periodic Report (01. May 2001 – 30. April 2002) of the INTAS Project No. 99-01326. – Gissen. – 2002. – P. 98-102.

Рейтій О.К. Квазікласичне наближення для релятивістських одно- та двоцентрових квантово-механічних задач. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, 2002.

Дисертація присвячена розробці нових і розвиненню запропонованих раніше версій квазікласичного наближення (методу ВКБ) для рівняння Дірака в сильних зовнішніх полях та їх застосуванню до вивчення особливостей в енергетичних спектрах релятивістських одно- та двоцентрових квантово-механічних задач. В рамках параксіального наближення Фока-Леонтовича розроблено релятивістську тривимірну версію методу ВКБ для рівняння Дірака з довільним аксіально-симетричним потенціалом, що дозволило ґрунтовно проаналізувати дискретний спектр релятивістської задачі двох центрів в границі роз'єднаних атомів. Використовуючи техніку лівих та правих власних векторів відповідної однорідної системи, розроблено рекурентну схему отримання ВКБ-розкладів для рівняння Дірака з довільним центральносиметричним потенціалом бар'єрного типу в двох та трьох просторових вимірах. За допомогою розвинутого квазікласичного методу вивчено квазістаціонарний спектр релятивістського водневоподібного атома (іона) в сферичній моделі ефекту Штарка в двох і трьох просторових вимірах та релятивістської кулонівської задачі в 2+1 вимірах при $Z > Z_{cr}$, $\varepsilon < -1$. Проведено порівняльне вивчення спектрів (2+1)- і (3+1)-вимірного рівняння Дірака в кулонівському полі протяжного джерела при $\varepsilon > -1$, $Z < Z_{cr}$ і проаналізовано фізику явищ в закритичній $Z > Z_{cr}$ області в просторах зниженої розмірності. Досліджено вплив різних фізичних ефектів – кулонівських, бар'єрних, обмінних, просторової розмірності та спін-орбітальної взаємодії – на спектральні характеристики релятивістських одно- та двоцентрових квантово-механічних систем.

Ключові слова: рівняння Дірака, задача двох кулонівських центрів, квазімолекулярні терми, ефект Штарка, квазістаціонарні стани, релятивістська кулонівська задача, простір зниженої розмірності.

Рейтий А.К. Квазиклассическое приближение для релятивистских одно- и двуцентровых квантово-механических задач. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Киевский национальный университет имени Тараса Шевченка, Киев, 2002.

Диссертация посвящена разработке новых и развитию уже известных версий квазиклассического приближения (метода ВКБ) для уравнения Дирака в сильных внешних полях и

их приложению к изучению особенностей в энергетических спектрах релятивистских одно- и двуцентровых квантово-механических задач. В рамках параксиального приближения Фока-Леонтовича разработано релятивистскую трехмерную версию метода ВКБ для уравнения Дирака с произвольным аксиально-симметрическим потенциалом, что позволило подробно проанализировать дискретный спектр релятивистской задачи двух центров в пределе разъединенных атомов. Используя технику левых и правых векторов соответствующей однородной системы, разработано рекуррентную схему получения ВКБ-разложений для уравнения Дирака с произвольным центрально-симметрическим потенциалом барьерного типа в двух и трех пространственных измерениях. С помощью развитого квазиклассического метода изучен квазистационарный спектр релятивистского водородоподобного атома (иона) в сферической модели эффекта Штарка в двух и трех пространственных измерениях и релятивистской задачи в 2+1 измерениях при $Z > Z_{cr}$, $\varepsilon < -1$. Проведено сравнительное изучение спектров (2+1)- и (3+1)-мерного уравнений Дирака в кулоновском поле протяженного источника при $\varepsilon > -1$, $Z < Z_{cr}$ и проанализирована физика явлений в закритической $Z > Z_{cr}$ области в пространствах пониженной размерности. Изучено влияние различных эффектов – кулоновских, барьерных, обменных, пространственной размерности и спин-орбитального взаимодействия – на спектральные характеристики релятивистских одно- и двуцентровых квантово-механических систем.

Ключевые слова: уравнение Дирака, задача двух кулоновских центров, квазимолекулярные термы, эффект Штарка, квазистационарные состояния, релятивистская кулоновская задача, пространство пониженной размерности.

Reity O.K. Quasiclassical approximation for the relativistic one- and two-centre quantum mechanical problems. – Manuscript.

Thesis for a scientific degree of the candidate of physical and mathematical sciences by speciality 01.04.02 – theoretical physics. – National Taras Shevchenko University of Kyiv, Kyiv, 2002.

The thesis is devoted to the elaboration of new and development already of known versions of a quasiclassical approximation (WKB method) for the Dirac equation in strong external fields and to their application to study features in energy spectra of three relativistic quantum-mechanical systems having for atomic physics character of fundamental reference problems: the quantum-mechanical problem of two centres for the Dirac equation; the spherical model of Stark effect in the relativistic hydrogen-like atom (ion) in two and three spatial dimensions; the relativistic problem of a extended nuclear in spaces of lower dimensionality.

In the framework of Fock-Leontovich paraxial approximation the relativistic three-dimensional version of the WKB method for the Dirac equation with arbitrary axially symmetrical potential not

allowing complete separation of variables is elaborated. The first two terms of the asymptotic expansion (at large internuclear distances) of the exchange splitting of the potential curves in points of their pseudocrossing are calculated. By means of perturbation theory for the functional of energy the asymptotic formulae for energy of Z_1eZ_2 system at large internuclear distances ($R>>1$) to within terms $O(R^{-3})$ and in the limit of united atom ($R<<1$) to within terms $O(R^3)$ are obtained. Such expansions are necessary to construct the relativistic one-electron correlation diagrams of heavy quasimolecules between the limits of united and separated atoms.

The recurrent scheme deriving of WKB-expansions for the Dirac equation with arbitrary central-symmetrical potential of a barrier type in two and three spatial dimensions is developed by the technique of the left and right eigenvectors of the corresponding homogeneous system. The explicit view of wave functions of the Dirac electron in classically allowed and forbidden regions is found, the rules of their sewing are obtained at transition through turning points. On the basis of the quasiclassical solutions of the Dirac equation the relativistic analog of the Bohr-Sommerfeld quantization condition and the general analytical expression for decay width of a quasistationary state in a case of enough wide potential barrier are obtained.

On the example of spherical model of the Stark effect the quasistationary spectrum (position and width of levels) of relativistic two- and three-dimensional hydrogen-like atoms (ions) in the external central-symmetrical field is found. Influences of the relativistic effects and spatial dimensionality on a position and width of quasistationary levels are investigated.

The exact solutions (2+1)-dimensional Dirac equation for the electron in the Coulomb field of a nuclear at $Z>137/2$ are obtained when in approximation of a point charge Z "a falling on centre" occurs. For a simple model of an extended source (core) the transcendental equation determining levels of ground and excited electron states in range $137<2Z<2Z_{cr}$ is obtained. The equations for the critical charge Z_{cr} determination are deduced. The mean radius of two-dimensional hydrogen-like system is calculated and the electron state at the boundary of the lower energy continuum $\varepsilon=-1$ is shown to be localized.

By means of the WKB method for the Dirac equation in a strong external field the problem on quasistationary levels lying in the lower energy continuum in 2+1 dimensions is studied. The energy and width of quasistationary states being prolongation of the discrete spectrum levels at $Z>Z_{cr}$ are calculated. The strong influences of spatial dimensionality on a position and width of quasistationary levels in the lower continuum of the Dirac equation solutions, on value of critical charges Z_{cr} for the ground and exited states, on localization of electronic density on boundary of the lower continuum $\varepsilon=-1$, on the effective size of system at $Z>137/2$ are detected. Performed comparative study of

spectra of the (2+1)-dimensional and (3+1)-dimensional Dirac equations in a Coulomb field of the extended core in subcritical $Z < Z_{cr}$ and supercritical $Z > Z_{cr}$ regions is the essential addition to the known theory of supercritical atoms.

Key words: the Dirac equation, the two-Coulomb-centre problem, the quasimolecular potential curves, the Stark effect, the quasistationary states, the relativistic Coulomb problem, a space of lower dimensionality.