

УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

На правах рукопису

Рейтій Олександр Костянтинович

УДК 539.186

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

01.04.02 – теоретична фізика

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата
фізико-математичних наук

Науковий керівник
Лазур Володимир Юрійович,
доктор фіз.-мат. наук, професор

Ужгород – 2002

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ	4
ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	17
1.1. Задача двох кулонівських центрів в квантовій механіці	17
1.2. Ефект Штарка водневоподібного атома	20
1.3. Спонтанне народження позитронів в надкритичному полі ядра	25
1.4. Методи дослідження релятивістських квантово- механічних задач та межі їх застосовності	29
1.5 Висновки до розділу 1	31
РОЗДІЛ 2. КВАНТОВО-МЕХАНІЧНА ЗАДАЧА ДВОХ КУЛОНІВ- СЬКИХ ЦЕНТРІВ ДЛЯ РІВНЯННЯ ДІРАКА	33
2.1. Вступні зауваження	33
2.2. Асимптотична поведінка енергетичних термів релятивістської задачі $Z_1 e Z_2$ в границі об'єднаного атома	36
2.3. Асимптотична поведінка енергетичних термів релятивістської задачі $Z_1 e Z_2$ в границі роз'єднаного атома	43
2.4. Метод ВКБ для рівняння Дірака з аксіально- симетричним потенціалом	47
2.5. Квазікласична асимптотика двоцентрової хвильової функції в підбар'єрній області	55
2.6. Асимптотичний підхід до проблеми обмінного розщеплення адіабатичних термів в релятивістській задачі двох кулонівських центрів	60
2.7. Врахування скінчених розмірів ядра при $Z > 137 \mathfrak{N} $	65

2.8. Висновки до розділу 2	69
----------------------------------	----

РОЗДІЛ 3. РЕЛЯТИВІСТСЬКА СФЕРИЧНА МОДЕЛЬ ЕФЕКТУ

ШТАРКА У ВОДНЕВОПОДІБНОМУ ІОНІ	71
3.1. Вступні зауваження	71
3.2. Метод ВКБ для центральних потенціалів	73
3.3. Хвильова функція діраківського електрона в класично дозволених та забороненій областях	83
3.4. Квazікласична теорія квазістаціонарних станів.....	86
3.5. Сферична модель ефекту Штарка в атомі водню	89
3.6. (2+1)-вимірна модель штарківської іонізації в атомі водню	97
3.7. Висновки до розділу 3	98

РОЗДІЛ 4. РІВНЯННЯ ДІРАКА В СИЛЬНОМУ КУЛОНІВСЬКОМУ

ПОЛІ В 2+1 ВИМІРАХ	100
4.1. Вступні зауваження	100
4.2. Точний розв'язок рівняння Дірака для кулонівського поля точкового ядра в 2+1 вимірах	105
4.3. Дискретний спектр при $2Z > 137$	114
4.4. Критичний заряд ядра. Ефективний розмір системи при $Z > 137/2$	120
4.5. Метод ВКБ для двовимірного рівняння Дірака в нижньому енергетичному континуумі	126
4.6. Положення і ширина квазістаціонарних рівнів	

в нижньому континуумі.....	130
4.7. Висновки до розділу 4	135
ВИСНОВКИ	138
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	141
ДОДАТОК	157

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

В дисертації прийнято атомну систему одиниць $\hbar = m_e = |e| = 1$, за винятком розділу 4, де запроваджено релятивістську систему одиниць $\hbar = m_e = c = 1$.

В роботі введено наступні позначення:

R – відстань між ядрами,

Z_1 та Z_2 – їх заряди,

$Z_1 e Z_2$ – задача двох кулонівських центрів,

r_N – радіус ядра,

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ – стала тонкої структури,

Z_{cr} – критичний заряд, при якому рівень дискретного спектра опускається до межі нижнього континууму.

ВСТУП

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. Ряд її розділів розвинуто до такого стану, що дозволяє передбачати результати поточного експерименту з великою точністю. 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.

Проте точне розв'язання рівняння Дірака з реалістичними атомними і міжатомними потенціалами наштовхується на суттєві математичні труднощі. Для відшукування 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 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 (див., наприклад, [1-4]), для яких або невідомі, або надто громіздкі точні розв'язки. Як відомо [1-4], у випадку кулонівського поля воно має високу точність навіть для невеликих значень квантових чисел. На відміну від теорії збурень дане наближення не пов'язане з малістю взаємодії і тому має більш широку область застосовності, дозволяючи досліджувати якісні закономірності в поведінці і властивостях квантово-механічних систем. Зокрема, метод ВКБ успішно використовувався для атома водню в електричному і магнітному полях (див., наприклад, [1,5-10] і наявні там посилання), для ряду модельних потенціалів [11], в нерелятивістській задачі двох кулонівських центрів (молекулярний іон водню H_2^+ [12,13]) та ін. Обговорення сучасного стану ВКБ-методу, різних його варіантів і застосувань в нерелятивістській теорії атомів і молекул, квантовій хімії, в задачах теорії зіткнень, тощо можна знайти в монографії [14].

Актуальність теми. Успішне застосування квазікласичного наближення до задач нерелятивістської фізики стимулювало поширення даного методу і на релятивістські системи, які описуються рівнянням Дірака. В якості історичної довідки вкажемо, що граничний перехід від рівняння Дірака в зовнішньому полі до рівняння Гамільтона-Якобі для класичної релятивістської частинки вперше розглядував Паулі [15], а потім більш докладно ряд авторів [16,17]. Зазвичай метод ВКБ використовувався у випадку дискретного спектра [18-22] і дещо рідше – для обчислення хвильових функцій неперервного спектра та в теорії розсіяння [23]. При цьому відмічено деякі особливості квазікласичного дискретного спектра при енергіях зв'язку електрона, порівнянних з енергією спокою mc^2 [22]. Однак багато цікавих задач теорії атомних зіткнень, ядерної фізики, фізики елементарних частинок [24-26] зводяться в кінцевому рахунку до розв'язування рівняння Дірака з потенціалами бар'єрного типу (в тому

числі і такими, що не допускають повного відокремлення змінних), для яких рівні енергії є квазістаціонарними. Властивості таких станів представляють інтерес для дослідження одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом в зіткненнях важких багатозарядних іонів з іншими частинками (іонами, атомами, молекулами та ін.) [27], для описання ефектів спонтанного народження позитронів при повільних зіткненнях важких ядер [28], при розгляді вакуумної оболонки надкритичного атома [28,29], а також з точки зору дослідження іонізації s-рівня (з енергією зв'язку порядку mc^2) важких атомів під дією зовнішніх полів [30].

Застосування методу ВКБ в ранніх роботах повністю ґрунтувалося на можливості відокремлення змінних в рівнянні Дірака в сферичній системі координат. Для загального випадку тривимірної задачі з невідокремлюваними змінними такий метод не був розроблений раніше. Проте багато задач релятивістської квантової механіки і ядерної фізики та теорії повільних іон-атомних зіткнень в кінцевому рахунку зводяться до обчислення ймовірності тунелювання через багатовимірні потенціальні бар'єри. При проведенні таких розрахунків необхідно знати асимптотики хвильових функцій в класично забороненій області (теорія тунельних ядерних процесів [31] і атомно-молекулярних реакцій [32-34], розрахунок обмінного розщеплення енергетичних термів в релятивістській задачі двох кулонівських центрів [35], іонізація важких атомів у зовнішніх електричному і магнітному полях [30,36], обчислення ймовірності спонтанного та вимушеного народження позитронів в надкритичному полі двох ядер, що зближаються [28,29], тощо). Розробці нових і розвиненню запропонованих раніше методів побудови асимптотик квазікласичного типу для рівняння Дірака в сильних зовнішніх полях присвячені наші дослідження [37-54], які й склали основу даної дисертації.

Останнім часом значний інтерес викликають (2+1)-вимірні версії релятивістської квантової механіки та квантової електродинаміки [55-60].

Це пов'язано в першу чергу зі спробами теоретичного опису таких явищ як високотемпературна надпровідність [55] і квантовий ефект Холла [56], котрі реалізуються в планарних структурах. Деякі ефекти в фізиці конденсованих середовищ вказують, що існують квантові системи, які можна описати за допомогою рівняння Дірака в 2+1 вимірах [57,58]. Питання нестабільності вакууму в (2+1)-вимірній квантовій електродинаміці в сильному кулонівському полі і ефект народження пар заряджених ферміонів із вакууму кулонівським полем протяжного джерела в 2+1 вимірах обговорювалися недавно в роботах [59,60]. Варто нагадати, що малорозмірні теорії являються не тільки спрощеними версіями (3+1)-вимірних: за рахунок непарного числа вимірів в них з'являється низка нових нетривіальних ефектів (дробовий заряд [61], аномальна статистика [55], тощо). Такі теорії знаходять останнім часом все нові й нові експериментальні підтвердження. В зв'язку з цим серйозну увагу привертають дослідження фізичних ефектів, які відбуваються в (2+1)-вимірних системах заряджених частинок і античастинок при наявності сильних зовнішніх полів в області релятивістських енергій зв'язку в просторах зниженої розмірності.

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

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 зіткнювальні 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:

1. Квантово-механічної задачі двох центрів для рівняння Дірака.
2. Релятивістської кулонівської задачі протяжного ядра в просторах зниженої розмірності.

3. Сферичної моделі ефекту Штарка в релятивістському водневоподібному атомі (іоні) в двох і трьох просторових вимірах.

Об'єднання в одному дослідженні цих споріднених з фізичної точки зору еталонних задач пов'язане також із загальністю математичного апарату, за допомогою якого вони досліджуються. Ще в дисертації Паулі (1922 р. [62]) система водневоподібний іон + електричне поле розглядалася як граничний випадок двоцентрової системи $Z_1 e Z_2$ при одночасному прямуванні до нескінченності величини одного із зарядів ($Z_2 \rightarrow \infty$) та міжцентрової відстані ($R \rightarrow \infty$), в якій ми цікавимося лише рівнями, локалізованими поблизу першого центру (Z_1). Діраківський гамільтоніан при цьому стає не ермітовим. Проте в слабкому полі ширина рівнів мала і штарківський спектр водневоподібного атома має квазістаціонарний характер.

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 двоцентрової задачі в границі роз'єднаних атомів. Обчислено перші два члени асимптотичного (за великими міжцентровими відстанями) розкладу величини обмінного розщеплення адіабатичних термів в релятивістській задачі $Z_1 e Z_2$.
3. Отримано асимптотичні формули для енергії системи $Z_1 e Z_2$ при великих міжцентрових відстанях ($R \gg 1$) з точністю до членів $O(R^{-3})$ та в

границі (наближенні) об'єднаного атома ($R \ll 1$) 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. Знайдено явний вигляд хвильових функцій діраківського електрона в класично дозволених та заборонених 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. На прикладі сферичної моделі ефекту Штарка розраховано квазістаціонарний спектр (положення та ширину рівнів) релятивістського двовимірного та тривимірного водневоподібного атома (іона). Досліджено вплив релятивістських ефектів та просторової розмірності на положення і ширину квазістаціонарних рівнів.

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". Врахування скінчених розмірів ядра дозволило пройти точку $2Z=137$ аж до "критичного" значення Z_{cr} , при якому енергія основного стану досягає межі нижнього континууму ($\varepsilon = E/mc^2 \rightarrow -1$). 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

$Z \rightarrow Z_{cr}$ стан електрона, який лежить на межі нижнього континууму, залишається локалізованим (на відміну від станів з $\varepsilon \rightarrow +1$).

б. 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)-вимірних рівнянь 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 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.

Отримані в дисертації квазікласичні формули для ширини штарківських рівнів можуть бути використані в фізиці повільних атомних зіткнень і, зокрема, при аналізі та описанні процесів перезарядки важких атомів (іонів) на багатозарядних іонах в релятивістських версіях моделей розпаду [63]. Нагадаємо, що перезарядка в таких моделях трактується як

штарківська іонізація релятивістського атома електричним полем налітаючого багатозарядного іона.

Одержана в дисертації квазікласична формула для величини обмінного розщеплення термів ΔE в релятивістській задачі $Z_1 e Z_2$ уже використовувалася нашими партнерами по спільному проєкті від міжнародної асоціації INTAS (Ref. No. 99-01326) при побудові асимптотичної теорії процесів одноелектронної перезарядки у зіткненнях важких багатозарядних іонів. Знайдені асимптотичні розклади для енергії системи $Z_1 e Z_2$ при великих та малих міжцентрових відстанях є основним технічним засобом при побудові одноелектронних релятивістських кореляційних діаграм важких квазімолекул в області між границями об'єднаного та роз'єднаного атомів.

Розглянута в роботі сферична модель ефекту Штарка дозволяє визначити ймовірність іншого процесу з перерозподілом частинок – штарківської іонізації водневоподібного іона в постійному однорідному електричному полі.

Проведені в дисертаційній роботі дослідження релятивістської двовимірної кулонівської задачі протяжного джерела при $Z > 137/2$ (ширини та положення квазістаціонарних рівнів в нижньому континуумі розв'язків рівняння Дірака, значення критичних зарядів Z_{cr} для основного і збуджених станів, тощо) являються суттєвим доповненням до відомої теорії надкритичних атомів [21,27], що розв'язує питання про вплив двовимірності на ширину та положення 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.

Особистий внесок здобувача. В працях, що виконані зі співавторами, особистий внесок здобувача полягав в постановці задач, виконанні чисельних 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 [37-41,43-46], автором розроблено нову тривимірну версію методу ВКБ для рівняння Дірака з аксіально-симетричними потенціалами та отримано степеневі та обмінні поправки для енергетичних термів в релятивістській задачі $Z_1 e Z_2$. В працях [47,48,53], 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) в зовнішньому сферично-симетричному полі. В працях [49-52,54] 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 ВРУ-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.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Докладне теоретичне і експериментальне дослідження релятивістського водневоподібного атома і іона, а також систем, що утворюються при їх взаємодії з іншими атомними частинками або з зовнішніми електромагнітними полями, представляє значний інтерес, зумовлений наступними причинами.

По-перше, ці атомні і двоатомні системи досить прості, що в поєднанні з даними прецизійних вимірювань дозволяє використовувати їх для верифікації релятивістської квантової механіки і квантової електродинаміки.

По-друге, навіть в цих найпростіших системах існують аналоги ефектів, характерних для більш складних квазіатомних і квазімолекулярних систем, що дозволяє використовувати їх для перевірки різних наближених методів в теорії багатоелектронних атомів та молекул.

По-третє, такі системи відіграють для атомної і ядерної фізики та теорії зіткнень роль фундаментальних еталонних задач, а їх малорозмірні аналоги мають велику кількість цікавих застосувань в теорії планарних структур.

Перейдемо до огляду літератури існуючих до початку наших робіт теоретичних і експериментальних досліджень розглядуваних в дисертації релятивістських одно- та двоцентрових квантово-механічних задач.

1.1. Задача двох кулонівських центрів в квантовій механіці

На даний час існує глибока асиметрія в розвитку теорії і методів розв'язування нерелятивістської та релятивістської задач двох кулонівських центрів Z_1eZ_2 квантової механіки. Численним ефективним

асимптотичним і числовим методам розв'язування двоцентрової задачі $Z_1 e Z_2$ для рівняння Шредінгера (детальна бібліографія приведена в [64]) можна протиставити лише окремі приклади розгляду цієї ж задачі для рівняння Дірака [65-71] за допомогою різних наближених методів (Гальоркіна, діагоналізації, варіаційного, теорії збурень, наближення Фаррі-Зоммерфельда-Мауе). Слід мати на увазі, що надійність і точність таких методів важко оцінити, оскільки приходиться використовувати досить велику кількість різноманітних наближень, котрі часто робляться задля математичної зручності і не мають достатнього фізичного обґрунтування. Така ситуація є дивним прикладом пасивності теорії за умов браку експериментальних даних про важкі та надважкі квазімолекулярні системи, які зовсім не носять принципового характеру, а повільних зіткненнях скоріше пов'язані з труднощами створення джерел багатозарядних іонів та формування пучків порівняно повільних частинок.

Між тим, з появою в останні роки в багатьох лабораторіях світу потужних прискорювачів високочарядних іонів [72,73] в різних областях фізики все сильніше відчувається потреба послідовної діраківської теорії квантово-механічної задачі $Z_1 e Z_2$. Раніше ця задача застосовувалася в основному для опису ефектів спонтанного та вимушеного народження позитронів у надкритичному полі квазіатома, що утворюється при зближенні двох важких іонів з сумарним атомним номером $Z_1 + Z_2 > 173$. Піонерський розгляд цього питання був зроблений Герштейном та Зельдовичем [74], і в серії робіт Попова [18, 21, 75-77]. Не претендуючи ні в якій мірі на повноту цієї історичної довідки, відмітимо, що інтенсивні експериментальні дослідження процесів народження позитронів при важких ядрах можуть за умов еквівалентного розвитку теорій цих процесів істотним чином доповнити наші уявлення про вакуумну оболонку надкритичного атома, а також перевірити статус квантової

електродинаміки в області сильних зовнішніх полів, що становить принциповий інтерес [18,21,65-78]. У відповідності з вказаними застосуваннями задачі Z_1eZ_2 цікавилися, головним чином, нижніми термами системи Z_1eZ_2 з сумарним зарядом обох ядер $Z = Z_1 + Z_2$ більше критичного $Z_{cr} \cong 173$ при міжцентрових відстанях R порядку критичної R_{cr} [21] (тобто в моделі об'єданого атома). Порівняно недавно [79] почали використовувати цю задачу в якості модельного наближення при дослідженні елементарних процесів зіткнення (збудження, перезарядки, іонізації) за участю багатозарядних іонів. При цьому задача Z_1eZ_2 розглядалася [35, 37, 80] в асимптотичній границі, коли відстань між ядрами R велика порівняно з комптонівською довжиною хвилі електрона. Перспективи використання релятивістської моделі Z_1eZ_2 в теорії зіткнень стають особливо важливими в зв'язку з недавнім повідомленням [72] групи др. Гоулда (Берклі, США) про отримання і реєстрацію воднево- та гелієподібних іонів урану (U^{91+} і U^{90+}). Релятивістські та радіаційні ефекти при таких значеннях заряду перестають відігравати роль малих поправок, а істотно визначають порядки спектральних характеристик. Підхід, базований на гамільтоніані Брейта-Паулі, тут, очевидно, стає непридатним і, природно, виникає питання про застосовність сучасних методів розрахунку релятивістської квантової механіки і квантової електродинаміки, яке може бути розв'язане тільки при співставленні результатів енергетичної структури з експериментальними даними.

Інше застосування релятивістської задачі Z_1eZ_2 в теорії зіткнень є більш традиційним і зводиться до використання модельних функцій суцільного спектра для аналізу розсіяння релятивістських електронів на важких двоатомних системах [63, 70, 71, 79]. Подальші посилання на деякі інші приклади застосувань релятивістської моделі Z_1eZ_2 в атомній та мезоатомній фізиці можна знайти в [79] і ми не будемо їх повторювати.

Зазначимо лише, що останнім часом почалося систематичне вивчення релятивістських ефектів в атомах і молекулах, які часто виявляються досить істотними для пояснення хімічних властивостей багатьох елементів, особливо важких (див. [81], де є подальші посилання).

Трудність розгляду задачі Z_1eZ_2 пов'язана з тим, що рівняння Дірака не відокремлюється для потенціалу двох кулонівських центрів в жодній ортогональній системі координат і потрібно мати справу з системою рівнянь в частинних похідних першого порядку, що істотно ускладнює всю конкретну проблему знаходження термів і хвильових функцій електрона. На жаль, навіть числове розв'язання цієї системи є досить важкою і громіздкою задачею [68, 69, 82], яка вимагає проведення заново досить складних обчислень для кожної окремої системи Z_1eZ_2 . Це призводить до необхідності створення і дослідження наближених методів розв'язування даної задачі, які побудовані на фундаменті ясних фізичних уявлень, добре розробленого математичного апарату і мають чітку область застосування [37-46]. Дана робота є спробою зробити крок в цьому напрямку.

1.2. Ефект Штарка водневоподібного атома

Задача про атом водню в електричному і магнітному полях має фундаментальне значення для квантової механіки та атомної фізики і часто зустрічається в застосуваннях (див., наприклад, [1, 83, 84] і вказані там посилання). Властивості енергетичного спектра атома водню і інших атомів у зовнішніх полях досліджувались досить детально в рамках рівняння Шредінгера, починаючи з кінця двадцятих років. Стан проблеми і детальну бібліографію з цієї тематики до 1985 р. можна знайти в колективній монографії [10], тому ми тільки коротко зупинимося на деяких аспектах нерелятивістської теорії ефекту Штарка і її розвитку після

1985 р., а також розглянемо узагальнення цієї задачі на релятивістський випадок.

Як відомо, в нерелятивістському випадку однорідне електричне поле знімає виродження енергетичних рівнів атома водню по відношенню до орбітального і магнітного квантовим числам, причому стани, які відрізняються знаком магнітного квантового числа, залишаються виродженими. Енергетичний спектр цих станів вже не є дискретним; він складається з низки розмитих рівнів, ширина яких зростає з ростом напруженості поля. Це явище називається ефектом Штарка [83]. Для того, щоб оцінити вплив електричного поля даної напруженості F на атом, що знаходиться в деякому квантовому стані, необхідно визначити положення відповідного йому рівня E_r і ширину цього рівня Γ . Ширина рівня характеризує ймовірність іонізації квазістаціонарного стану атома в електричному полі; вона обернено пропорційна часу життя атома в цьому стані: $\Gamma \sim \hbar/\tau_{\text{іон}}$ [1].

Механізм розпаду атома в електричному полі, пов'язаний з підбар'єрним переходом електронів з поля атомного залишку в неперервний спектр, був виявлений ще на першій стадії дослідження цього процесу [10]. У полі, малому в порівнянні з внутрішньоатомним (порядок якого 5×10^9 В/см), час відходу електронів великий порівняно з атомним часом, так що стан електронів можна розглядати як квазістаціонарний.

При визначенні квазістаціонарних станів звичайно вимагають, щоб розв'язок рівняння Шредінгера на нескінченності представляв собою розбіжну хвилю [1, 83]. Умова відсутності збіжної компоненти в асимптотичному виразі для хвильової функції відбирає комплексні власні значення енергії $E = E_r - i\Gamma/2$, де E_r визначає положення, а Γ – ширину рівня, що відповідає квазістаціонарному стану.

Найпростіший приклад атома водню у постійному однорідному електричному полі був розглянутий Оппенгеймером [85] ще в 1928 р. Однак в отриманій ним формулі для ймовірності іонізації основного стану атома водню фігурує неправильне значення передекспоненційного множника, що свідчить про нетривіальність цієї задачі. Для поля, що складається з суперпозиції кулонівського і однорідного електричного полів, рівняння Шредінгера відокремлюється в параболічних координатах, що, здавалось би, мало значно полегшити обчислення штарківської енергії E_r і ймовірності розпаду Γ . Однак отримані при відокремленні змінних рівняння не були зведені до рівнянь для якихось відомих спеціальних функцій. Тому зсуви атомних рівнів і їх ширини одержуються чисельно [10, 86-93]. Добре відомі, розвинуті Дамбургом і Колосовим [86], методи числового розрахунку положення і ширини рівнів енергії нерелятивістського атома водню, що спираються на лоренцову параметризацію брейт-вігнерівських резонансів.

Не дивлячись на очевидну цінність таких розрахунків (що відносяться до окремих значень напруженостей поля і до конкретних атомів), вони не можуть замінити аналітичну теорію. Навіть наявність точних результатів, отриманих досконалими чисельними методами, не виключає потреби в, можливо більш складних, але наочних аналітичних моделях; скоріше між цими сторонами знання існує своєрідне співвідношення доповнюваності. Створена у 60-ті роки квазікласична теорія розпаду атомних частинок в електричному полі (див., наприклад, [94]) дозволила отримати корисні аналітичні формули для ймовірності іонізації, асимптотично точні в границі “слабих” полів. Причому були розглянуті випадки як нейтральних атомів [1, 5-7, 94], так і від’ємних іонів типу H^- , J^- і т.д. [95, 96] (перша з цих задач є більш складною в зв’язку з необхідністю врахування кулонівської взаємодії між електроном, що вилітає, і атомним залишком).

Недавно (див. роботи [97, 98] і наведені в них посилання) було розвинуто квазікласичну теорію іонізації атомів та іонів під дією постійних і однорідних електричного та магнітного полів з урахуванням кулонівської взаємодії між електроном і атомним залишком в процесі тунелювання. При цьому для обчислення ймовірності іонізації використовувався метод “уявного часу” [6, 7], який дає наглядний опис підбар’єрного руху частинок за допомогою класичних рівнянь руху, але з чисто “уявним” часом. Серед нових квантово-механічних методів дослідження процесів взаємодії атомних частинок з електричними та магнітними полями особливе місце займає $1/n$ – розклад (n – головне квантове число), який досить ефективний для високозбуджених (рідбергівських) станів атомів і молекул, в тому числі при розгляді ефектів у сильних зовнішніх полях (див., наприклад, [99]).

Відмітимо, що у всіх згаданих роботах основна увага приділялась нерелятивістським аспектам теорії іонізації атомів та іонів електричним полем. Разом з тим внутрішня логіка розвитку досліджень атомних систем з високою кратністю іонізації (багатозарядних іонів) диктує, очевидно, постановку цілого ряду якісно нових задач, аналогічних тим, які раніше розв’язувались тільки для нейтральних або слабоіонізованих атомів. Особливістю багатозарядних іонів, що відрізняє їх від нейтральних атомів, є суттєво релятивістський характер руху електронів у породжених такими іонами полях (характерна швидкість електрона у водневоподібному іоні з зарядом ядра Z складає $v \sim \alpha Zc$; α – постійна тонкої структури, c – швидкість світла). Тому послідовна теорія штарківської іонізації таких систем повинна базуватися на релятивістській основі з урахуванням того, що релятивістські ефекти складають вже не малі поправки, а суттєво визначають порядки спектральних характеристик.

При побудові цієї теорії необхідно мати розв’язок релятивістської задачі про рух електрона у полі ядра та постійного зовнішнього

електричного поля. Оскільки змінні у рівнянні Дірака для такого суперпозиційного потенціалу не відокремлюються в жодній ортогональній системі координат, то дана задача не має точного аналітичного розв'язку, а чисельні методи для неї достатньо громіздкі.

Перші спроби аналітичного розрахунку квадратичного за полем F зсуву рівня для основного стану релятивістського водневоподібного атома були зроблені в [100] на основі неоднорідного рівняння Дірака. Однак з огляду на труднощі аналітичного інтегрування системи двох неоднорідних рівнів другого порядку вдалося отримати тільки першу релятивістську поправку за $Z\alpha$ до нерелятивістського виразу для зсуву рівнів ΔE . Точний розрахунок цієї величини для основного стану був виконаний в [101] (див. також незалежні обчислення в [102]) і виявився першим прикладом повністю аналітичного розрахунку переходу другого порядку для зв'язаного електрона, що показав перспективність використання координатного зображення РКФГ (релятивістської кулонівської функції Гріна) в задачах такого роду.

Якщо для основного стану спостерігається тільки квадратичний зсув рівня, то для збуджених станів ситуація ускладнюється внаслідок ефектів виродження [83]. В слабких полях, коли розщеплення ΔE рівнів полем мале порівняно з інтервалами тонкої структури (але велике в порівнянні з лембівським розщепленням), спостерігається лінійний ефект Штарка, зумовлений перемішуванням підрівнів з $l = j \pm 1/2$ при даному j . Релятивістські розрахунки лінійного ефекту Штарка за допомогою теорії збурень виконані в [103, 104], а квадратичного – за допомогою РКФГ – у вигляді розкладу за $Z\alpha$ в [105].

Слід відмітити, що у більшості робіт в основному цікавилися тільки положенням квазістаціонарного рівня, яким можуть бути протиставлені тільки рідкі випадки обчислення ширини Γ в релятивістському випадку. Порівняно недавно ймовірність іонізації s -рівня, енергія зв'язку якого

може бути порядку енергії спокою, під дією електричного та магнітного полів було розраховано за допомогою узагальнення методу уявного часу. Однак, в загальному випадку ширини квазістаціонарних станів до цього часу так і не пораховано.

У зв'язку з таким станом теорії та інтенсивними експериментальними дослідженнями останніх років особливого значення набувають асимптотичні методи обчислення ймовірності іонізації, які ґрунтуються на фізично наочній картині підбар'єрного переходу електрона. З цієї точки зору доцільно скористатись методом ВКБ (або квазікласичним наближенням), який дає можливість знайти наближені аналітичні розв'язки релятивістської задачі, а також виразити шукану величину ймовірності іонізації через квантову проникність потенціального бар'єра, що розділяє області з дискретним і неперервним спектрами [47, 48, 53]. Як відомо, цей метод дає досить високу точність навіть для невеликих квантових чисел.

1.3. Спонтанне народження позитронів в надкритичному полі ядра

Питання про електронну структуру атома при $Z\alpha > 1$, і особливо при надкритичному заряді ядра $Z > 173$, представляє принциповий інтерес. Не можна вважати закінченою квантову теорію електронів, позитронів і електромагнітного поля до тих пір, поки не досягнуто повної ясності у вказаному питанні.

Ще Дірак показав [106], що розв'язок рівняння Дірака для зв'язаних станів електрона в полі точкового кулонівського ядра в тривимірному випадку стає сингулярним при $Z \geq 137$. Вираз для енергії нижнього електронного рівня $1s_{1/2}$ має вигляд:

$$E_0 = m_e c^2 \left[1 - (Z\alpha)^2 \right]^{1/2}. \quad (1.1)$$

При $Z\alpha = 1$ енергія E_0 доходить до нуля і залежність $E_0 = E_0(Z)$ на цьому обривається. Вираз (1.1) має кореневу особливість в точці $Z\alpha = 1$; формальне продовження (1.1) на область $Z\alpha > 1$ призводить до комплексних значень E_0 . В зв'язку з цим часто кажуть, що при $Z > 137$ розв'язків рівняння Дірака не існує, що є невірним. На справді розв'язання рівняння Дірака з потенціалом $V = -Z/r$ можливе і при $Z\alpha > 1$, але задача стає некоректною без вибору граничної умови на хвильову функцію в нулі. Фізичний зміст цієї умови полягає в тому, що задачу слід розв'язувати з потенціалом, обрізаним при $r < r_N$.

Для ядра скінчених розмірів вперше оцінка для енергій електронних рівнів була зроблена Померанчуком та Смородінським [74, 107], які показали, що при $Z = 137$ в розв'язку немає особливостей, а заряд, при якому енергія рівня $1s_{1/2}$ досягає величини $E = -m_e c^2$ (енергія нижнього континуума), тобто енергія зв'язку електрона на K -оболонці сягає $2m_e c^2$, приблизно рівний 200 (критичний заряд). Пізніші більш точні дослідження розв'язку рівняння Дірака для зарядів ядер, близьких до критичного, проведені Вернером і Уїллером [108], Герштейном і Зельдовичем [74], в серії робіт Попова [18, 21, 75-78], а також Піпером і Грайнером (див. монографію [109]), Мюллером та ін. [110, 111], привели до значення для критичного заряду $Z_c = 173 \pm 1$. Герштейн і Зельдович [74], а також Піпер і Грайнер [109] вперше висловили припущення, що для голого ядра з $Z > Z_{cr}$, або при наявності вакансії на K -оболонці, йде спонтанний процес захоплення електрона із від'ємного континуума на K -оболонку і утворення дірки у від'ємному континуумі, яке спостерігається як народження вільного електрона. За іншою термінологією вакуум стає від'ємно

зарядженим, одночасно з'являється позитрон, при цьому повний заряд, зрозуміло, зберігається.

Таким чином, якщо на деякий час зблизити два важких ядра [22, 74] так, щоб сумарний заряд перевищив критичний, то можна очікувати спонтанне народження позитронів. Істотно, що спонтанний процес не залежить від швидкості руху ядер і можливий при як завгодно повільному зближенні ядер. Аналіз [19, 109] показує, що завдяки кулонівському бар'єру в ефективному потенціалі двох ядер утворений позитрон спочатку локалізований поблизу ядер, а потім тунелює на нескінченність.

Із сказаного випливає, що при зіткненні важких іонів можна експериментально досліджувати процеси спонтанного народження позитронів та позитрон-електронних пар, демонструючи фундаментальну роль вакууму в квантовій електродинаміці.

В середині 70-х років в GSI (Дармштадт, ФРН) на прискорювачі UNILAC було розпочато програму експериментальних досліджень з перевірки фундаментальних аспектів квантової електродинаміки в області надсильних полів, джерелом яких слугують ядра важких елементів, що приймають участь у зіткненні [109, 112-117]. При цьому основним мотивом дармштадтських експериментів був пошук можливого фундаментального процесу – спонтанного народження позитронів з вакууму в зіткненнях важких іонів з сумарним зарядом ядер $Z_u = Z_1 + Z_2$, що перевищує критичний $Z_{cr} = 173$. Проте, вже в ранніх вимірюваннях [117-120] було отримано зовсім несподівані результати: виявлені вузькі позитронні лінії, а потім і вузькі ($\Delta E \sim 10$ кеВ) позитрон-електронні пари, що спостерігалися і в докритичних системах ($163 \leq Z_u \leq 188$) в діапазоні мас $1.6 \div 1.8 \text{ MeV}/mc^2$ і енергій зіткнення нижче кулонівського бар'єра, демонструють ряд незвичних рис, які не допускають їх інтерпретацію як очікуваний спонтанний процес. Подальші чисельні експериментальні

пошуки подібних явищ в ядерних переходах, в e^+e^- розсіюванні, в розпадах різних частинок і експериментах при високих енергіях не дали позитивного результату. Сталість позитронних ліній, їх ширина свідчать про незалежність їх від деталей ядерних і квазіатомних процесів при зіткненні ядер і вказують на спільне джерело. Очевидним міркуванням є те, що цим джерелом є двочастинковий розпад невідомої раніше легкої частинки на позитрон-електронну пару [118, 121]. Але машинне моделювання методом Монте-Карло процесу розпаду такої частинки в експериментальних умовах обох установок і порівняння з вимірними позитронними спектрами змалювало дивну картину – розпад на позитрон-електронну пару об'єкта, який знаходиться в спокої в системі центру мас іонів, що стикаються, проходить за час, який на два порядки перевищує час зіткнення, коли іони вже розходяться на відстані $\geq 10^2$ Фм.

Таким чином, гіпотеза двочастинкового розпаду на позитрон і електрон вільної елементарної або складної частинки не може бути визнана придатною для опису спостережуваного явища. Напевно, більш складні сценарії, які б включали додаткові припущення про швидкості джерел позитронів, їх часу життя, наявності взаємодії в кінцевому стані, тощо, і які могли б пояснити деякі з експериментальних даних, навряд чи зможуть дати загальну самоузгоджену картину. Це змусило висувати самі різноманітні гіпотези для пояснення описаних вище явищ, починаючи з варіантів опису в рамках стандартної (3+1)-вимірної КЕД і аж до вельми екзотичних теорій, які включали гіпотетичні нові частинки і сили, нову фазу КЕД, тощо [73]. Проте ні одне із запропонованих пояснень не змогло вирішити проблему інтерпретації основних особливостей дармштадтського ефекту.

Не маючи тут можливості обговорювати цю надзвичайно складну проблему в більш повному об'ємі, відмітимо лише, що поки що не дуже вдалі пошуки адекватного теоретичного сценарію для спостережуваних в

GSI явищ винагороджено, принаймні, появою численних і вельми цікавих ідей і обчислень, експериментів і евристичних міркувань, які носять більш загальний характер, а не тільки утилітарну мету пояснення конкретного експериментального факту. В даній дисертаційній роботі (див. розділ 4) робиться спроба розглянути процес спонтанного народження позитронів в полі надважкого ядра з точки зору також не зовсім звичної $(2+1)$ -вимірної КЕД [49-52, 54].

1.4. Методи дослідження релятивістських квантово-механічних задач та межі їх застосовності

Дослідження фізичних процесів в сильних електромагнітних полях в дисертаційній роботі буде проводитися методом точних або асимптотично точних розв'язків рівняння Дірака в зовнішньому полі. Як відомо, метод релятивістських хвильових рівнянь (в зовнішньому полі) добре працює в задачах квантової електродинаміки, які можуть бути розв'язані в рамках одночастинкової теорії. Розв'язок фізичної задачі в згаданому методі проводиться в два етапи: 1) спочатку потрібно знайти розв'язки відповідного хвильового рівняння в присутності зовнішнього поля; 2) за допомогою знайдених розв'язків обчислюються величини, які визначають амплітуду і ймовірність фізичного процесу.

Таким чином, в хвильові рівняння взаємодія вводиться за допомогою поняття зовнішнього поля так само, як і в нерелятивістській квантовій механіці. Перехід від вільного рівняння Дірака до рівняння Дірака в присутності зовнішнього електромагнітного поля здійснюється, як звичайно, на основі "принципу" мінімальності електромагнітної взаємодії (або "принципу" мінімальної підстановки), тобто шляхом калібрувально-інваріантної заміни

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x^\mu} + ieA_\mu(x), \quad c = \hbar = 1,$$

де $x^\mu = (x^0, \vec{r})$ – 4-вектор координати; $A_\mu(x)$ – потенціал зовнішнього поля. Подібна заміна проводиться для 4-імпульсу, як відомо, в класичній релятивістській механіці при включенні взаємодії точкової частинки заряду e , із зовнішнім полем: $p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu(x)$.

Одним із аспектів проблеми є застосовність поняття зовнішнього поля в релятивістській теорії. Чи потрібно накладати обмеження на “силу” зовнішніх полів і на масштаби їх зміни, щоб одночастинкова теорія частинки в зовнішньому полі була б послідовною і не містила протиріч? Труднощі, з якими ми зустрічаємося, розглядаючи фізичні процеси в сильних полях в рамках одночастинкової теорії, добре відомі: явища типу парадокса Клейна, від’ємні потоки, від’ємна енергія в глибоких потенціальних ямах, труднощі з означенням вакууму як найнижчого стану системи, падіння частинки в центр поля.

Ці питання не можуть бути послідовно розв’язані в рамках одночастинкової теорії в зовнішньому полі. Для їх розв’язання необхідною є вторинно-квантована (тобто істотно багаточастинкова) теорія, яка враховує процеси спонтанного народження пар частинок і античастинок зовнішнім полем. Застосовність одночастинкової теорії, що ґрунтується на хвильових рівняннях із зовнішнім полем, взаємодія з яким можлива згідно принципу мінімальної підстановки, обмежена в зв’язку з так званими радіаційними поправками до рівнянь руху частинок. В деяких випадках, однак, ці поправки можна врахувати шляхом модифікації одночастинкових рівнянь.

Уточнимо, який зміст ми вкладаємо в поняття “сильне і надсильне поле”. Розглянемо взаємодію електрично зарядженої частинки із зовнішнім

електричним полем. Нехай m – маса частинки, e – заряд частинки. Сильним полем ми будемо називати таке поле, вплив якого на стан частинки не може розглядатися як збурення. Додаючи до m і e фундаментальні сталі c (швидкість світла у вакуумі) і \hbar (сталу Планка), побудуємо величини з розмірністю напруженості електричного поля:

$$E_c = m^2 c^3 / |e| \hbar = m^2 c^4 \alpha / |e|^3 = E_k \alpha ,$$

$$E_k = m^2 c^4 / |e|^3 , \alpha = e^2 / c \hbar .$$

Поле напруженості E_c часто називають критичним. Значенням E_k визначається межа застосовності класичної електродинаміки заряджених частинок маси m , в той час як E_c з'являється в квантовій теорії.

Однорідне електричне поле E_c здійснює роботу з переміщення точкового заряду e маси m на комптонівській довжині $\lambda_c = \hbar / mc$, рівну mc^2 . Поля напруженості E_c будемо називати надсильними. В присутності таких полів, як буде показано нижче на прикладі трьох модельних квантових систем, істотними є як релятивістські ефекти, так і ефекти просторової розмірності.

1.5. Висновки до розділу 1

З аналізу наведених вище літературних даних випливає, що вивчення важких і надважких квазімолекул та квазіатомів із сумарним зарядом ядер $Z_1 + Z_2 > 137$ поставили перед атомною спектроскопією ряд нових принципових проблем. Особливістю таких систем, що відрізняє їх від нейтральних чи слабоіонізованих атомів і молекул, є їх істотно релятивістський характер. Для розрахунку електронної структури таких

систем необхідний повністю релятивістський розгляд. Релятивістські ефекти відіграють істотну роль і при розрахунках термів багатозарядних легких молекул, що утворюються при повільних зіткненнях важких іонів з іншими атомними частинками. Тому послідовна теорія таких систем та елементарних процесів зіткнення за їх участю повинна ґрунтуватися на релятивістській основі з урахуванням того, що релятивістські ефекти складають вже не малі поправки, а суттєво визначають порядки спектральних характеристик. Втім, побудова такої теорії пов'язана з певними труднощами внаслідок відсутності строгих методів розрахунку релятивістських багаточастинкових систем у сильних зовнішніх полях. З огляду на складність об'єктів досліджень разом з розвитком різних схем числових розрахунків, великого значення набуває асимптотичний підхід, в якому будуються розклади за різними малими параметрами. Одною з переваг такого підходу є можливість побудови якісної картини процесу, котра, наприклад, в числових розрахунках може виявитися прихованою. Навіть наявність точних результатів, отриманих самими досконалими числовими методами, не усуває потребу в, можливо, менш точних, але прозорих наближених аналітичних підходах; скоріш за все між цими методами дослідження існує своєрідне співвідношення доповняльності. З огляду на сказане найбільш зручним математичним апаратом для аналізу та дослідження дискретного спектра важких та надважких атомних і квазімолекулярних систем є узагальнення квазікласичного наближення (методу ВКБ) на релятивістський випадок. Це дозволяє отримувати розв'язок тієї чи іншої задачі в загальному вигляді і досліджувати його залежність від різних параметрів.

РОЗДІЛ 2

КВАНТОВО-МЕХАНІЧНА ЗАДАЧА ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ ДЛЯ РІВНЯННЯ ДІРАКА

2.1. Вступні зауваження

У багатьох фізичних задачах, приклади яких будуть розглянуті нижче, необхідно знати асимптотику двоцентрової хвильової функції діраківського електрона при великих між'ядерних відстанях R . В залежності від поставленої мети для побудови таких асимптотик можна використовувати різні форми розкладів і методи їх отримання. Так, в застосуванні до нерелятивістської двоцентрової задачі Z_1eZ_2 добре зарекомендували себе метод еталонних рівнянь [122-124], метод квазікласичних наближень [12], різні схеми теорії збурень [125], тощо. Нажаль, всі ці методи у своєму первинному вигляді мають надто вузьку область застосовності і не можуть бути безпосередньо використані у випадку релятивістських двоцентрових задач, оскільки повністю ґрунтуються на можливості відокремлення змінних у вихідному тривимірному хвильовому рівнянні і зведенні його розв'язання до одновимірних диференціальних крайових задач. Тому незаперечний інтерес представляють спроби відшукування і розробки нових методів розв'язування релятивістських тривимірних задач з невідокремлюваними змінними.

Основна мета цього розділу полягає в розробці нового підходу до математичних проблем, що виникають при розв'язанні релятивістської задачі двох кулонівських центрів Z_1eZ_2 у рамках рівняння Дірака. Наведемо спочатку евристичні міркування, які лежать в основі використовуваного тут методу побудови асимптотики електронних хвильових функцій.

Нерідко трапляється, коли для розв'язання квантово-механічної задачі достатньо знайти 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”. Гамільтоніан в цьому випадку природно розкласти з точністю до квадратичних членів за координатами, перпендикулярними до многовиду M , в околі якого вихідне рівняння Шредінгера чи Дірака зводиться до більш простого, що допускає точне розв'язання. Наближення, в якому розв'язок квантово-механічної задачі у всьому конфігураційному просторі можна звести до її розв'язання на многовиді M меншої розмірності, називають параксіальним [126].

Як приклад локалізованих станів наведемо задачу про обмінну взаємодію двох атомних частинок на великих між'ядерних відстанях (M – пряма), яка приводить до розщеплення квазімолекулярних термів в точках квазіперетину [127]. Другий приклад локалізованого стану – процес тунельної іонізації водневоподібного атома (іона) в досить слабкому постійному електричному полі. В згаданих задачах потік імовірності в підбар'єрній області локалізується у квазікласичному наближенні в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання електрона. Ця обставина дає можливість достатньо точної апроксимації тривимірної хвильової функції в околі вказаного шляху за допомогою методу параболічного рівняння [128], започаткованого в працях М.А. Леонтовича та В.А. Фока [129].

Крім згаданих вище, методом параболічного рівняння розв'язано задачі про тунельний розпад неводневоподібного атома в неоднорідному зовнішньому полі [130, 131] і штарк ефект для двоатомної молекули в сильному електричному полі [132], а також обчислено амплітуди переходів для колінеарної хімічної реакції обміну [133].

Велика кількість праць (див., наприклад, [36, 134, 135] і наявні там посилання) присвячена дослідженню методом параболічного рівняння

високозбуджених (рідбергівських) станів атома водню у сильному магнітному полі, локалізованому поблизу осі симетрії потенціалу. Отримано аналітичні вирази для хвильових функцій, правила квантування, а також значення дипольних матричних елементів переходів як із низьколежачих, так і з близьколежачих високозбуджених станів.

Нижче ми зупинимося на квазікласичних локалізованих станах, зосереджених поблизу деякої класичної траєкторії, що описують взаємодію електрона з одним чи двома атомними залишками. Математичну теорію таких станів (теорія гауссових пучків) розвинуто в [128, 136].

Інтерес до вивчення локалізованих станів в атомній фізиці викликаний перш за все тим, що їх аналіз часто вдається виконати до кінця аналітично. Такий підхід є одним із небагатьох, що дозволяють вивчити системи з невідокремлюваними змінними, не залучаючи теорію збурень, адіабатичне наближення або громіздкі числові методи.

Можна очікувати, що ідея про локалізацію потоку в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання буде плідною і в релятивістській задачі двох кулонівських центрів $Z_1 e Z_2$, де точного розв'язку рівняння Дірака вже не існує. Основні аналітичні прийоми пропонованого нами методу побудови асимптотик хвильових функцій полягають в наступному.

1. Зведення рівняння Дірака з довільним аксіально-симетричним потенціалом до еквівалентного, більш звичного рівняння другого порядку, яке за формою нагадує рівняння Шредінгера.

2. Розклад потенціалу $V(z, \rho)$ в циліндричній системі координат (z, ρ, φ) в параксіальному наближенні в околі осі симетрії з точністю до квадратичних по ρ членів: $V(z, \rho) \cong V_0(z) + V_1(z)\rho^2$. При цьому система зачеплених диференціальних рівнянь першого порядку в частинних похідних для ВКБ-поправок розв'язується (рекурентно) в квадратурах.

Отримані в такий спосіб квазікласичні розв'язки рівняння Дірака в підбар'єрній області зшиваються потім з асимптотиками атомних хвильових функцій.

3. Представлення шуканих величин (розщеплення термів і їх зсувів, тощо) у вигляді поверхневого інтегралу (в конфігураційному просторі задачі) з подальшим його обчисленням за допомогою багатовимірних методів перевалу чи стаціонарної фази.

Це дозволяє отримати в явному вигляді хвильову функцію діраківського електрона в підбар'єрній області, а також обчислити величину обмінного розщеплення термів в релятивістській задачі $Z_1 e Z_2$.

Перейдемо до технічного оформлення сформульованих вище аналітичних прийомів.

2.2. Асимптотична поведінка енергетичних термів релятивістської задачі $Z_1 e Z_2$ в границі об'єднаного атома

Коли сумарний заряд кулонівських центрів $Z = Z_1 + Z_2$ позитивний і міжцентрова відстань R прямує до нуля, можна розглядувати задачу $Z_1 e Z_2$ за теорією збурень. Рівняння Дірака задачі $Z_1 e Z_2$ має наступний вигляд ($m_e = e = \hbar = 1$):

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (2.1a)$$

$$\hat{H} = c\vec{\alpha}\vec{p} + c^2\beta - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, \quad (2.1b)$$

де r_i – віддаль від електрона до відповідного ядра ($i=1,2$); $Z_{1,2}$ – заряди кулонівських центрів у полі яких рухається електрон; $\vec{p} = -i\vec{\nabla}_r$ – оператор імпульсу електрона; c – швидкість світла.

У стандартному зображенні [137] матриці $\vec{\alpha}$, β мають вигляд:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

де $\vec{\sigma}$ – матриці Паулі, а 0 та I – нульова та одинична матриці 2×2 . Розіб'ємо повний гамільтоніан двоцентрової задачі \hat{H} на гамільтоніан нульового наближення \hat{H}^{UA} і збурення \hat{W} :

$$\hat{H} = \hat{H}^{UA} + \hat{W}. \quad (2.2)$$

В якості \hat{H}^{UA} виберемо гамільтоніан об'єднаного релятивістського атома (united atom)

$$\hat{H}^{UA} = c\vec{\alpha}\vec{p} + c^2\beta - \frac{Z}{r_0}, \quad (2.3)$$

який знаходиться на осі Oz в точці $z = z_0$

$$z_0 = \left(-\frac{1}{2} + \frac{Z_2}{Z}\right)R = \left(\frac{1}{2} - \frac{Z_1}{Z}\right)R. \quad (2.4)$$

Точка z_0 ділить міжцентрову віддаль на два відрізки:

$$R_1 = \frac{Z_2}{Z} R, \quad R_2 = \frac{Z_1}{Z} R. \quad (2.5)$$

Уведемо сферичну систему координат r_0, θ_0, φ_0 , початок якої знаходиться в точці $(0,0,z_0)$, а кут θ_0 відраховується від осі Oz , направленої від центра Z_1 до центра Z_2 .

За функції нульового наближення виберемо незбурені хвильові функції об'єднаного атома з гамільтоніаном (2.3). Власні стани цього гамільтоніана характеризуються набором сферичних квантових чисел n, j, l, m , де n – головне квантове число; j і l – повний і орбітальний моменти електрона; m – проекція j на між'ядерну вісь. Для даних j і l існують два типи розв'язків, які відрізняються парністю $P = (-1)^l$, замість якої, надалі, будемо використовувати орбітальний момент $l = j \pm 1/2$. Розв'язки рівняння Дірака для двоцентрової задачі $Z_1 e Z_2$ повинні переходити при неперервному зближенні ядер $R \rightarrow 0$ у відповідні розв'язки одноцентрової кулонівської задачі. Тому в задачі двох центрів слід розрізняти два типи термів і, відповідно до цього, два типи розв'язків рівняння Дірака з гамільтоніаном (2.1б). А саме ті, які при неперервному зближенні ядер Z_1 і Z_2 переходять в стани з $l = j - 1/2$ і $l = j + 1/2$ для об'єднаного атома із зарядом ядра $Z = Z_1 + Z_2$. Відповідно до цього власні функції оператора \hat{H}^{UA} для обох типів розв'язків запишемо (в стандартному зображенні) у вигляді [137]:

$$\Psi_{njlm}^{UA}(\vec{r}_0) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r_0) \Omega_{jlm}(\theta_0, \varphi_0) \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} G(r_0) \Omega_{j'l'm}(\theta_0, \varphi_0) \end{pmatrix}, \quad l = j \pm \frac{1}{2}, \quad l' = 2j - l, \quad (2.6)$$

де Ω_{jlm} – кульові спінори [137]. Радіальні функції F і G є відповідно великою та малою компонентами діраківських біспінорних хвильових функцій. Випишемо їх явні вирази [137]:

$$\begin{aligned}
\left. \begin{array}{l} F \\ G \end{array} \right\} &= \pm \frac{\sqrt{\Gamma(2\gamma + n_r + 1)}}{\Gamma(2\gamma + 1)\sqrt{n_r!}} \cdot \sqrt{\frac{1 \pm \varepsilon}{4N(N - \aleph)}} \cdot \left(\frac{2Z}{N}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr_0}{N}} \left(\frac{2Zr_0}{N}\right)^\gamma \times \\
&\times \left[(N - \aleph) F\left(-n_r, 2\gamma + 1, \frac{2Zr_0}{N}\right) \mp n' F\left(-n_r + 1, 2\gamma + 1, \frac{2Zr_0}{N}\right) \right]. \quad (2.7)
\end{aligned}$$

Тут використано наступні позначення:

$$\begin{aligned}
n_r &= n - j - \frac{1}{2}, \quad \aleph = (-1)^{k-l} k, \quad k = j + \frac{1}{2}, \\
N &= \sqrt{n^2 - 2n_r(k - \gamma)}, \quad \gamma = \sqrt{k^2 - (Z\alpha)^2}, \quad \varepsilon = \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n_r + \gamma}\right)^2 \right]^{-1/2}.
\end{aligned}$$

Власні значення оператора \hat{H}^{UA} описуються відомою формулою Дірака-Зоммерфельда [137], яку в наших позначеннях можна подати у вигляді:

$$E_{nj}^{UA} = \varepsilon c^2 = \frac{c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z\alpha}{n_r + \gamma}\right)^2}}. \quad (2.8)$$

Так як спектр оператора \hat{H}^{UA} вироджений по l і m , то для застосування теорії збурень перш за все потрібно побудувати правильні функції нульового наближення, на яких матриця оператора збурення \hat{W} діагональна. Покажемо, що матриця $\left\| W_{njl'm'}^{njl'm'} \right\|$ оператора збурення

діагональна на функціях об'єднаного атома (2.6), (2.7), якщо z_0 визначено умовою (2.4). Визначимо матричні елементи оператора збурення системи

$$\widehat{W} = \frac{Z}{r_0} - \frac{Z_1}{|\vec{r}_0 + \vec{R}_1|} - \frac{Z_2}{|\vec{r}_0 - \vec{R}_2|}. \quad (2.9)$$

Для цього скористаємось розкладом \widehat{W} в ряд за поліномами Лежандра:

$$\widehat{W} = \frac{Z}{r_0} - \left\{ \begin{array}{l} Z_1 \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l R_1^l r_0^{-l-1} P_l(\cos \theta_0), r_0 \rangle |\vec{R}_1| \\ Z_1 \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l R_1^{-l-1} r_0^l P_l(\cos \theta_0), r_0 \langle |\vec{R}_1| \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} Z_2 \sum_{l=0}^{\infty} R_2^l r_0^{-l-1} P_l(\cos \theta_0), r_0 \rangle |\vec{R}_2| \\ Z_2 \sum_{l=0}^{\infty} R_2^{-l-1} r_0^l P_l(\cos \theta_0), r_0 \langle |\vec{R}_2| \end{array} \right\}. \quad (2.10)$$

Коефіцієнт при $r_0^{-2} P_l$ для $r_0 \rangle \max\{|\vec{R}_1|, |\vec{R}_2|\}$ рівний $Z_2 R_2 - Z_1 R_1$ і обертається в нуль внаслідок умови (2.5). Оцінка всіх радіальних і кутових інтегралів з функціями (2.6), (2.7) від наступного члена розкладу в (2.10) показує, що матриця $\|W_{njlm}^{njlm}\|$, побудована з матричних елементів

$$W_{njlm}^{njlm} = \int \Psi_{njlm}^{UA+}(\vec{r}_0) \widehat{W} \Psi_{njlm}^{UA}(\vec{r}_0) d\vec{r}_0$$

діагональна з точністю до членів $O(R^3)$ по відношенню до кожної групи взаємовироджених станів, тобто

$$W_{njlm}^{njlm} = \delta_{ll'} \delta_{mm'} [W_{njlm}^{njlm}]_2 + O(R^3).$$

Головний член $\left[W_{njlm}^{njlm}\right]_2$ розкладу діагонального матричного елемента оператора \hat{W} визначається розкладом (2.10) для $r_0 > \max\{|\vec{R}_1|, |\vec{R}_2|\}$, в якому інтегрування по r_0 ведеться від нуля:

$$\begin{aligned} \left[W_{njlm}^{njlm}\right]_2 &= -(Z_1 R_1^2 + Z_2 R_2^2) \cdot \int |\Psi_{njlm}^{UA}(\vec{r}_0)| r_0^{-3} P_2(\cos\theta_0) d\vec{r}_0 = \\ &= \frac{Z_1 Z_2}{2N^3} \cdot \frac{[3m^2 - j(j+1)]}{j(j+1)} \cdot \frac{[3\varepsilon\aleph(\varepsilon\aleph - 1) - \gamma^2 + 1] \cdot (ZR)^2}{\gamma(\gamma^2 - 1)(4\gamma^2 - 1)}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Формули (2.8), (2.11) визначають два перші члени розкладу повної енергії системи $Z_1 e Z_2$ (яка включає і енергію спокою електрона $m_e c^2$) при малих R :

$$E_{njlm}(Z_1, Z_2, R) = \varepsilon c^2 + \left[W_{njlm}^{njlm}\right]_2, \quad l = j \pm 1/2. \quad (2.12)$$

В нерелятивістській границі ($\alpha \rightarrow 0$) формула (2.11) переходить у вираз, який може бути отриманий за допомогою рівняння Брейта-Паулі:

$$\left[\bar{W}_{njlm}^{njlm}\right] = \lim_{\alpha_0 \rightarrow 0} \left[W_{njlm}^{njlm}\right]_2 = Z_1 Z_2 \frac{[3m^2 - j(j+1)](2\aleph - 1)(\aleph - 1)(ZR)^2}{n^3 j^2 (j+1)^2 (2j-1)(2j+1)(2j+3)}.$$

Для станів з $j = m = 1/2$ потрібно в останній формулі покласти $m = j$, а потім, скоротивши на $2j - 1$, взяти $j = 1/2$. В результаті отримаємо

$$\left[\overline{W}_{n_2^1 0 \frac{1}{2}}^{n_2^1 0 \frac{1}{2}} \right] = \frac{2}{3n^3} Z_1 Z_2 (ZR)^2,$$

що повністю співпадає з формулою, отриманою в нерелятивістському випадку [64] для станів з $l=0$.

Енергії зв'язку кількох станів системи Pb-Pb, обчислені за допомогою формули (2.12), порівнювалися (див. рис. 2.1) з чисельними розрахунками роботи [109]. Розбіжність в результатах складає $\sim 5\%$ і пояснюється врахуванням в [109] скінчених розмірів ядра.

Для того, щоб оцінити вклад релятивістських ефектів в енергію системи $Z_1 e Z_2$, на рис. 2.2 зображено відношення $Q_l(Z_1, R) = E_{bin} / E_n$ енергії зв'язку $E_{bin} = (E_{njl m}^2 - c^4) / (2c^2)$ (див. (2.12)) і нерелятивістським виразом E_n [64] для енергії у випадку, коли $Z_1 = Z_2$. Видно, що із зростанням сумарного заряду ядер Z та міжцентрових відстаней R роль релятивістських ефектів зростає.

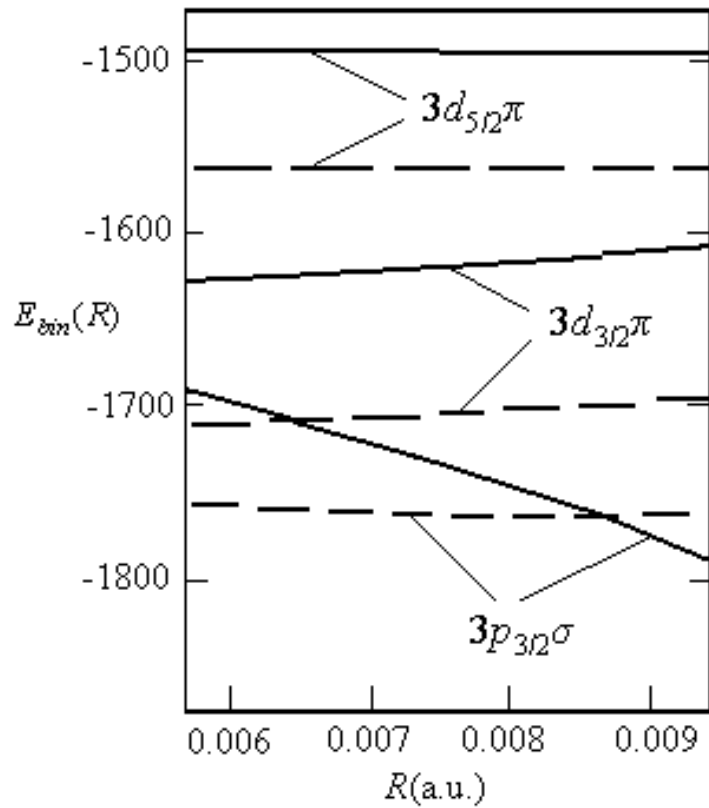


Рис. 2.1. Енергії зв'язку деяких зв'язаних станів системи Pb-Pb, отримані в даній роботі (суцільні лінії) та в статті [109] (пунктирні лінії).

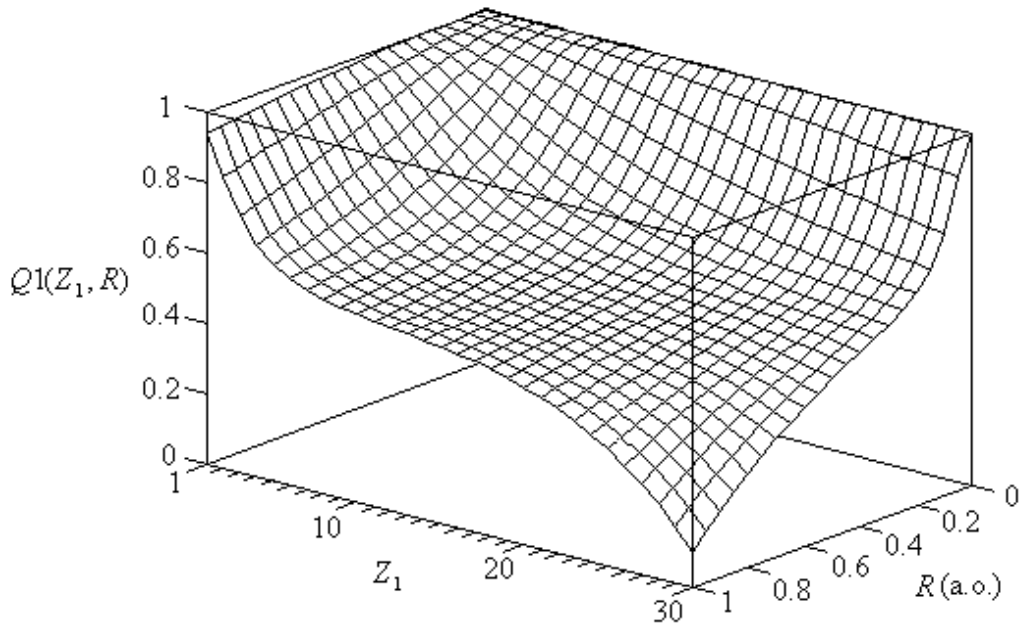


Рис. 2.2. Відносний вклад $Q_1(Z_1, R)$ релятивістських ефектів в енергію системи Z_1eZ_2 у резонансному випадку $Z_1 = Z_2$ для $2P_{3/2}\sigma$ стану.

2.3. Асимптотична поведінка енергетичних термів релятивістської задачі Z_1eZ_2 в границі роз'єданого атома

Визначимо енергію $E(R)$ і хвильові функції $\Psi(\vec{r}; R)$ електрона в іншому граничному випадку, коли міжцентрові відстані R великі ($R \gg 1$). Ці відстані мають бути настільки великими, щоб квантова проникність потенціального бар'єра, який розділяє атомні частинки, була б набагато менша від одиниці. Коли заряди Z_1, Z_2 різні, власні значення $E(R)$ двоцентрової задачі Z_1eZ_2 розпадаються в асимптотичній границі $R \rightarrow \infty$ на два класи: E_I - та E_{II} -терми, які при $R \rightarrow \infty$ переходять в енергетичні рівні ізольованих атомів eZ_1 і eZ_2 , відповідно. Критерій застосовності проведеного нижче розкладу зводиться до вимоги, щоб, скажімо, хвильова функція Ψ_1 -стану електрона в ізольованому атомі 1 не збурювалася сильно частинкою 2. Спотворення залежності цієї функції від координат повинно

бути малим. Воно пов'язане із зміщенням енергії стану, викликаним взаємодією із збурюючою частинкою 2. З огляду на можливість застосування теорії збурень зовнішнє (кулонівське) поле останньої вважатимемо слабким у порівнянні із характерними внутрішньоатомними полями.

Аналогічно до (2.2), розіб'ємо оператор повної енергії (2.1б) на гамільтоніан нульового наближення \hat{H}^{SA} і збурення \hat{V} :

$$\hat{H} = \hat{H}^{SA} + \hat{V}.$$

Введемо сферичну систему координат r_1, θ_1, φ_1 , початок якої знаходиться в центрі водневоподібного іона eZ_1 , а кут θ_1 відраховується від осі Oz , направленої від центра Z_1 до центра Z_2 . Тоді в якості \hat{H}^{SA} виберемо гамільтоніан роз'єданого атома (separated atom) із зарядом ядра Z_1 :

$$\hat{H}^{SA} = c\vec{\alpha}\vec{p} + c^2\beta - \frac{Z_1}{r_1}.$$

При великих міжцентрових відстанях оператор взаємодії $\hat{V} = -Z_2/|\vec{R} - \vec{r}|$ між електроном і ядром Z_2 можна вважати малим збуренням до гамільтоніана \hat{H}^{SA} .

Аналогічно до \hat{H}^{UA} власні стани оператора \hat{H}^{SA} характеризуються набором сферичних квантових чисел n_1, j_1, l_1, m_1 . Власні функції $\Psi_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{SA}(\vec{r}_1)$ мають вигляд (2.7) з точністю до заміни $\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r}_1$ та введенням індексу 1 в інших величинах. Власні значення \hat{H}^{SA} описуються формулою:

$$E_1 = \varepsilon_1 c^2 = \frac{c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{Z_1 \alpha}{n_{r_1} + \gamma_1} \right)^2}}. \quad (2.15)$$

Визначимо матричні елементи оператора збурення \widehat{V} . Для цього, як і в підрозділі 2.2 для оператора \widehat{W} , скористаємося розкладом \widehat{V} за поліномами Лежандра:

$$\widehat{V} = - \begin{cases} Z_2 \sum_{s=0}^{\infty} R^s r_1^{-s-1} P_s(\cos \theta_1), r_1 \rangle \left| \vec{R} \right\rangle \\ Z_2 \sum_{s=0}^{\infty} R^{-s-1} r_1^s P_s(\cos \theta_1), r_1 \langle \left| \vec{R} \right\rangle \end{cases}. \quad (2.16)$$

Матриця $\left\| V_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{n_1 j_1 l_1 m_1} \right\|$, складена з матричних елементів

$$V_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{n_1 j_1 l_1 m_1} = \int \Psi_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{SA^\dagger}(\vec{r}_1) \widehat{V} \Psi_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{SA}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1,$$

не є діагональною по l_1 (але діагональна по m_1), як у випадку об'єднаного атома (слід зауважити, що тут інтегрування по r_1 ведеться від нуля, користуючись розкладом (2.16) для $r_1 \langle \left| \vec{R} \right\rangle$). Тому хвильові функції нульового наближення шукаються у вигляді:

$$\Psi_0 = \sum_{l_1} C_{l_1}^{l_1}(R) \Psi_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{SA}(\vec{r}_1). \quad (2.17)$$

Підставляючи (2.17) в рівняння Дірака (2.1), домножуючи його на $\Psi_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{SA^+}(\vec{r}_1)$ зліва і інтегруючи по всім трьом змінним, приходимо до секулярного рівняння

$$\sum_{l_1} \left[(E_I - E_1) \delta_{l_1 l_1} - V_{n_1 j_1 l_1 m_1}^{n_1 j_1 l_1 m_1} \right] C_{l_1}^{l_1}(R) = 0. \quad (2.18)$$

Очевидно, що перший член розкладу (за великими R) оператора збурення (2.16) є діагональним по відношенню до кожної з груп взаємовироджених станів, а другий член містить ненульові недіагональні елементи:

$$V_{n_1 j_1 l_1+1/2 m_1}^{n_1 j_1 l_1+1/2 m_1} = V_{n_1 j_1 l_1-1/2 m_1}^{n_1 j_1 l_1-1/2 m_1} = -\frac{Z_2}{R}, \quad (2.19a)$$

$$V_{n_1 j_1 l_1+1/2 m_1}^{n_1 j_1 l_1-1/2 m_1} = -V_{n_1 j_1 l_1-1/2 m_1}^{n_1 j_1 l_1+1/2 m_1} = \frac{3i}{4} \sqrt{N_1^2 - \aleph_1^2} \frac{(n_{r_1} + \gamma_1) m_1}{j_1(j_1 + 1)} \frac{Z_2}{Z_1 R^2}. \quad (2.19b)$$

Використовуючи матричні елементи (2.19) і розв'язуючи рівняння, отримане з умови, що детермінант системи рівнянь (2.18) повинен бути рівний нулю, приходимо до виразу для енергії в першому порядку теорії збурень:

$$E_I(R) = E_1 - \frac{Z_2}{R} + \frac{Z_2 \xi_1}{R^2} + \mathcal{O}(R^{-3}), \quad (2.20a)$$

$$\xi_1 = \pm \frac{3}{4} \sqrt{N_1^2 - \aleph_1^2} \frac{(n_{r_1} + \gamma_1) m_1}{j_1(j_1 + 1) Z_1}, \quad (2.20b)$$

де знаки “ \pm ” відповідають станам з $l_1 = j_1 \pm 1/2$. Останній доданок у формулі (2.20) збігається з добре відомим штарківським зсувом рівня в слабкому електричному полі напруженості $-Z_2/R^2$ [104].

Асимптотика терму E_{II} отримується із виразу (2.20) за допомогою замін $\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_2$, $Z_{1,2} \rightarrow Z_{2,1}$, $n_1, \mathcal{N}_1, j_1, m_1 \rightarrow n_2, \mathcal{N}_2, j_2, m_2$, де $n_2, \mathcal{N}_2, j_2, m_2$ – набір квантових чисел ізольованого водневоподібного атома eZ_2 .

2.4. Метод ВКБ для рівняння Дірака з аксіально-симетричним потенціалом

Розглянемо тривимірну аксіально-симетричну квантово-механічну задачу, коли дві класично дозволені області розділені потенціальним бар'єром. Така ситуація реалізується, наприклад, при дослідженні штарківської іонізації релятивістського водневоподібного атома у постійному однорідному електричному полі та в задачі двох кулонівських центрів для рівняння Дірака. У цих випадках електронна хвильова функція зосереджена в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання, що є віссю симетрії потенціалу. Знайдемо її квазікласичну асимптотику в підбар'єрній області.

Для біспінора

$$\Psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

рівняння Дірака має вигляд ($m_e = e = \hbar = 1$):

$$\left. \begin{aligned} c\vec{\sigma}\vec{p}\xi &= (E - V + c^2)\eta \\ c\vec{\sigma}\vec{p}\eta &= (E - V - c^2)\xi \end{aligned} \right\} \quad (2.22)$$

де, нагадаємо, $\vec{p} = -i\vec{\nabla}$ – оператор імпульсу, c – швидкість світла, $\vec{\sigma}$ – матриці Паулі, E – енергія електрона, яка включає енергію спокою c^2 , V – ефективна потенціальна енергія взаємодії електрона із зовнішнім аксіально-симетричним полем, що не допускає повного відокремлення змінних в системі рівнянь Дірака (2.22).

Підставляючи перше рівняння системи (2.22) в друге і використовуючи підстановку

$$\xi = (W^+)^{1/2} \Phi, \quad W^\pm = E - V \pm c^2,$$

отримаємо матричне диференціальне рівняння другого порядку для невідомої функції Φ :

$$\Delta\Phi + k^2\Phi = 0, \quad (2.23a)$$

$$k^2 = \frac{1}{c^2} \left[(E - V)^2 - c^4 \right] - \frac{\Delta V}{2W^+} - \frac{3}{4} \left(\frac{\vec{\nabla} V}{W^+} \right)^2 + \frac{i}{W^+} \vec{\sigma} [\vec{\nabla} V, \vec{\nabla}]. \quad (2.23b)$$

З огляду на осьову симетрію потенціалу V введемо циліндричну систему координат $\{\rho z \varphi\}$, де вісь Oz співпадає з віссю симетрії потенціалу, вісь ρ є перпендикулярною до осі Oz , а φ – азимутальний кут.

Оскільки потенціал є аксіально-симетричним, то гамільтоніан рівняння Дірака комутує з оператором проекції повного кутового моменту на вісь симетрії Oz , і тому, вочевидь, система рівнянь (2.22) допускає

відокремлення кутової змінної φ . Для цього розв'язок рівняння (2.23) будемо шукати, зобразивши його у мультиплікативній формі

$$\Phi = \begin{pmatrix} F_1(z, \rho) \exp[i(m-1/2)\varphi] \\ F_2(z, \rho) \exp[i(m+1/2)\varphi] \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

де $F_{1,2}$ – нові невідомі функції, m – оператор проекції повного кутового моменту електрона на вісь симетрії Oz . Увівши в розгляд спінор $F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}$ та підставивши (2.24) в (2.23), отримаємо матричне диференціальне рівняння для F :

$$(\Delta + \partial)F = (\hbar^{-2} q^2 + \gamma)F, \quad q = \frac{1}{c} [c^4 - (E - V)^2]^{1/2}, \quad (2.25a)$$

де введено позначення:

$$\partial = \frac{1}{W^+} \begin{pmatrix} \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} \\ \frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial V}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma = \begin{pmatrix} a_{m-1/2} & b_{m+1/2} \\ b_{m-1/2} & a_{-m-1/2} \end{pmatrix}, \quad (2.25б)$$

$$a_\mu(z, \rho) = \frac{\mu^2}{\rho^2} + \frac{1}{W^+} \left[\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial V}{\partial \rho} + \frac{\Delta V}{2} + \frac{3}{4} \frac{(\vec{\nabla} V)^2}{W^+} \right], \quad b_\mu(z, \rho) = -\frac{\mu}{\rho W^+} \frac{\partial V}{\partial z}. \quad (2.25в)$$

Тут ми відновили сталу Планка \hbar в явному вигляді. Розв'язки рівняння (2.25) будемо шукати у вигляді формального степеневого ряду

$$F = \varphi \exp(\hbar^{-1} S), \quad \varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \varphi^{(n)}. \quad (2.26)$$

Тут $\varphi^{(n)}$ – біспіно́р (верхня компонента відповідає функції F_1 , нижня – F_2). Підставляючи (2.26) в (2.25) та прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях \hbar , отримуємо систему диференціальних рівнянь першого порядку для невідомих функцій S і компонент спіно́ра $\varphi^{(n)}$:

$$(\vec{\nabla} S)^2 - q^2 = 0, \quad (2.27a)$$

$$2\vec{\nabla} S \vec{\nabla} \varphi^{(0)} + \Delta S \varphi^{(0)} + \partial S \varphi^{(0)} = 0, \quad (2.27б)$$

$$2\vec{\nabla} S \vec{\nabla} \varphi^{(n+1)} + \Delta S \varphi^{(n+1)} + \partial S \varphi^{(n+1)} + \Delta \varphi^{(n)} + \partial \varphi^{(n)} - \gamma \varphi^{(n)} = 0, \quad (2.27в)$$

де $n=0, 1, 2, \dots$. Нажаль, рівняння (2.27), так само, як і вихідна система (2.25), не допускають відокремлення змінних ρ і z . Для того, щоб розв'язати цю проблему, скористаємось ідеєю методу примежового шару про локалізовані стани, яка реалізується тут наступним чином.

Шукатимемо розв'язки рівнянь (2.27) в підбар'єрній області, де, на відміну від класично дозволених областей, хвильова функція часто локалізована в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання електрона, що істотно спрощує задачу. В цьому випадку природно шукати хвильову функцію не у всьому конфігураційному просторі, а тільки в околі осі симетрії потенціалу Oz , де змінну ρ можна використовувати в якості малого параметра розкладу.

Розглянемо рівняння (2.27а), в якому величину q^2 розкладемо за степенями ρ . Причому, припустимо, що коефіцієнти розкладу при ρ в непарних степенях дорівнюють нулю:

$$q^2(z, \rho) = q_0^2(z) + \sum_{k=1}^{\infty} Q_k(z) \rho^{2k}, \quad q_0^2(z) = q^2(z, 0), \quad Q_k = \frac{1}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} q^2(z, 0)}{\partial \rho^{2k}}. \quad (2.28)$$

Дане припущення не є чисто математичним (зроблене з міркувань зручності), а реалізується для багатьох потенціалів (зокрема, для розглядуваного в наступному підрозділі потенціалу двох кулонівських центрів, а також для вже згадуваного потенціалу кулонівський центр+постійне однорідне електричне поле).

В світлі вищесказаного логічно шукати функцію S теж у вигляді степеневого ряду за ρ :

$$S(z, \rho) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(z) \rho^{2n}. \quad (2.29)$$

Підставляючи (2.29) в (2.27а) та прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях ρ , отримуємо систему рекурентних диференціальних рівнянь першого порядку:

$$(S'_0)^2 - q_0^2 = 0, \quad (2.30a)$$

$$2S'_0 S'_1 + 4S_1^2 - Q_1 = 0, \quad (2.30б)$$

$$2S'_0 S'_2 + 16S_1 S_2 + (S'_1)^2 - Q_2 = 0, \dots, \quad (2.30в)$$

з якої величини S_n ($n=0,1,2,\dots$) визначаються послідовно. Тут штрих означає похідну по z . Зауважимо, що, якщо в розкладі (2.29) врахувати коефіцієнти при непарних, а також від'ємних степенях ρ , то після підстановки (2.29) в (2.27а) вони зануляться. Аналогічна ситуація буде пізніше для спінора $\varphi^{(n)}$.

Всі рівняння системи (2.30), окрім другого, є звичайними диференціальними рівняннями першого порядку, які розв'язуються в квадратурах. Розглянемо перші три рівняння отриманої системи (2.30). Легко бачити, що розв'язком рівняння (2.30а) є функція

$$S_0 = \pm \int q_0 dz + C_0, \quad C_0 = \text{const.} \quad (2.31)$$

Оскільки в підбар'єрній області хвильова функція діраківського електрона повинна спадати з ростом z , то перед інтегралом в (2.31) вибирається від'ємний знак.

Рівняння (2.30б) є нелінійним диференціальним рівнянням Ріккати і точно не розв'язується в загальному вигляді. Однак за допомогою підстановки

$$S_1 = \frac{q_0(z)}{2} \left(\frac{1}{2} \frac{q_0'(z)}{q_0(z)} - \frac{\sigma'(z)}{\sigma(z)} \right), \quad (2.32)$$

його можна звести до лінійного диференціального рівняння другого порядку

$$\sigma'' + \left[\frac{1}{4} \left(\frac{q_0'}{q_0} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{q_0''}{q_0} - \frac{Q_1}{q_0^2} \right] \sigma = 0, \quad (2.33)$$

яке може бути розв'язане для кожної конкретної задачі точно або, як у випадку задачі двох кулонівських центрів (див. підрозділ 2.5), наближено. Слід зауважити, що в нерелятивістській границі $c \rightarrow \infty$ рівняння (2.33) переходить в рівняння, отримане Сумецьким [131] при розв'язуванні рівняння Шредінгера з аксіально-симетричним потенціалом методом параболічного рівняння.

Враховуючи (2.31) та (2.32), отримуємо інтегруванням розв'язок рівняння (2.30в)

$$S_2 = \frac{q_0^2}{2\sigma^4} \left\{ \int \frac{\sigma^4}{q_0^3} \left[(S_1'^2) - Q_2 \right] dz + C_1 \right\}, \quad C_1 = \text{const.} \quad (2.34)$$

Перейдемо до розв'язування наступних рівнянь системи (2.27). Їхні розв'язки, які є спінорами, ми будемо шукати, аналогічно до (2.29) у вигляді степеневих рядів за ρ :

$$\varphi^{(n)}(z, \rho) = \begin{pmatrix} \rho^{|m-1/2|} \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_{1k}^{(n)}(z) \rho^{2k} \\ \rho^{|m+1/2|} \sum_{k=0}^{\infty} \varphi_{2k}^{(n)}(z) \rho^{2k} \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Після підстановки (2.35) у відповідні рівняння та прирівнювання до нуля коефіцієнтів при однакових степенях ρ , одержуємо систему звичайних диференціальних рівнянь першого порядку, які легко інтегруються. Для $m > 0$ розв'язки зображаються у формі

$$\varphi_{10}^{(0)} = \frac{C_2^+}{\sigma} \left(\frac{\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^{p-2}, \quad \varphi_{20}^{(0)} = \frac{C_2^{(+)}}{\sigma} \left(\frac{\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^{p-1} \left[\int \frac{\sigma A_1(z)}{q_0 \sqrt{q_0}} dz + C_3^+ \right], \quad (2.36a)$$

$$\varphi_{11}^{(0)} = -\frac{1}{\sigma} \left(\frac{\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^p \left\{ \int \frac{1}{\sqrt{q_0}} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{q_0}} \right)^{p+1} \left[S_1' \varphi_{10}^{(0)'} + \frac{1}{2} S_1'' \varphi_{10}^{(0)} + \right. \right. \\ \left. \left. + 4p S_2 \varphi_{10}^{(0)} + A_1(z) \varphi_{20}^{(0)} \right] dz \right\} + C_4^+, \quad (2.36b)$$

$$\varphi_{21}^{(0)} = -\frac{1}{\sigma} \left(\frac{\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^{p+1} \left\{ \int \frac{1}{\sqrt{q_0}} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{q_0}} \right)^{p+2} \left[S_1' \varphi_{20}^{(0)'} + \frac{1}{2} S_1'' \varphi_{20}^{(0)} + \right. \right. \\ \left. \left. + 4(p+1) S_2 \varphi_{20}^{(0)} - A_1(z) \left(\varphi_{11}^{(0)} + \frac{V_1}{W_0^+} \varphi_{10}^{(0)} \right) + A_2(z) \varphi_{10}^{(0)} \right] dz + C_5^+ \right\}, \quad (2.36b)$$

$$\varphi_{10}^{(1)} = \frac{1}{\sigma} \left(\frac{\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^{p-2} \left\{ \int \frac{1}{2\sqrt{q_0}} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{q_0}} \right)^{p-1} \left[\varphi_{10}^{(0)''} - B_1(z)\varphi_{10}^{(0)} + \right. \right. \\ \left. \left. + 2(p-1) \left(2\varphi_{11}^{(0)} + \frac{V_0' \varphi_{20}^{(0)}}{W_0^+} \right) \right] dz + C_6^+ \right\}, \quad (2.36\Gamma)$$

$$\varphi_{20}^{(1)} = \frac{1}{\sigma} \left(\frac{\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^{p-1} \left\{ \int \frac{1}{2\sqrt{q_0}} \left(\frac{\sigma}{\sqrt{q_0}} \right)^p \left[\varphi_{20}^{(0)''} - B_2(z)\varphi_{20}^{(0)} + 4p\varphi_{21}^{(0)'} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2V_1'}{W_0^+} \varphi_{10}^{(0)'} - \frac{2V_0'}{W_0^+} \varphi_{11}^{(0)} + 2A_1(z)\varphi_{10}^{(1)l} \right] dz + C_7^+ \right\}, \quad (2.36\Delta)$$

де введено позначення

$$A_1(z) = (S_1 V_0' - q_0 V_1) / W_0^+, \\ A_2(z) = (S_1' V_1 - S_1 V_1' + 2q_0 V_2 - 2S_2 V_0') / W_0^+, \\ B^\pm(z) = \frac{1}{W_0^+} \left[(1 \pm 2|m|)V_1 + \frac{1}{2} V_0'' + \frac{3}{4} \frac{(V_0')^2}{W_0^+} \right], \quad p = |m| + 3/2, \\ V_0(z) = V(z,0), \quad V_k(z) = \frac{1}{(2k)!} \frac{\partial^{2k} V(z,0)}{\partial \rho^{2k}}, \quad W_0^\pm = W^\pm(z,0).$$

Для $m < 0$ розв'язки системи отримуються з (2.36) замінами: $\varphi_{1i}^{(j)} \rightarrow \varphi_{2i}^{(j)}$, $\varphi_{2i}^{(j)} \rightarrow -\varphi_{1i}^{(j)}$, $C_k^+ \rightarrow C_k^-$, ($i, j = 0, 1$, $k = 2, 3, \dots, 7$).

Зауважимо, що для того, щоб врахувати, наприклад, l членів в розкладі (2.29), треба в кожній з функцій $\varphi^{(n)}$ врахувати перші $l - n - 1$ ($n = 0, 1, \dots, l - 2$) членів розкладу за ρ . В даній роботі ми обмежимося першими трьома членами в S , двома – в $\varphi^{(0)}$ і головним – $\varphi^{(1)}$.

Вираз для нижньої компоненти η біспінора Ψ отримується з формули для ξ заміною

$$\xi \xrightarrow{W^+ \rightarrow W^-} \eta.$$

Таким чином ми отримали розв'язки рівняння (2.22) з точністю до сталих C_0, C_1, C_k^\pm ($k = 2, 3, \dots, 7$). Для того, щоб їх визначити, потрібно розглянути конкретний потенціал і нормувати хвильову функцію. В наступному підрозділі буде розглянутий потенціал двох кулонівських центрів.

2.5. Квазікласична асимптотика двоцентрової хвильової функції в підбар'єрній області

Знайдемо асимптотику (при $z \sim R \gg 1$) хвильової функції діраківського електрона в полі двох фіксованих ядер із зарядами Z_1 і Z_2 , розташованих на великій відстані R один від одного. Потенціал такої задачі подамо у вигляді:

$$V = -\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{|\vec{R} - \vec{r}_1|}. \quad (2.37)$$

Розв'язки рівняння Дірака з потенціалом (2.37) будемо шукати з граничною умовою

$$\Psi_I \xrightarrow{z \ll R} \Psi_1, \quad (2.38)$$

яка означає, що при наближенні електрона до атома 1, двоцентрова функція Ψ_I прямує до незбуреної атомної хвильової функції Ψ_1 (див. формули (2.13), (2.14)). Для радіальних хвильових функцій (2.14) доцільно скористатися асимптотичними розкладами

$$\left. \begin{matrix} F_1 \\ G_1 \end{matrix} \right\} = \pm \sqrt{1 \pm \varepsilon_1} A_1 r_1^{\varepsilon_1 Z_1 / \lambda_1} e^{-\lambda_1 r_1} \left[1 + B_1^{(\pm)} r_1^{-1} + \dots \right], \quad r_1 \lambda_1^2 \gg Z_1, \quad (2.39a)$$

$$A_1 = \lambda_1 (2\lambda_1)^{\varepsilon_1 Z_1 / \lambda_1} \left(\frac{Z_1 / \lambda_1 - \aleph_1}{2Z_1 \Gamma(\varepsilon_1 Z_1 / \lambda_1 - \gamma_1 + 1) \Gamma(\varepsilon_1 Z_1 / \lambda_1 + \gamma_1 + 1)} \right)^{1/2}, \quad (2.39b)$$

$$B_1^{(\pm)} = \frac{1}{2\lambda_1} \left(\aleph_1 + \frac{Z_1}{\lambda_1} \right) \left(\aleph_1 \pm 1 - \frac{Z_1}{\lambda_1} \right), \quad \lambda_1 = c\sqrt{1 - \varepsilon_1^2}, \quad (2.39b)$$

де “+” відповідає f_1 , “-” – g_1 . Для того, щоб визначити всі невідомі в підрозділі 1.4 стали C_0, C_1, C_k^\pm ($k = 2, 3, \dots, 7$), розкладемо Ψ_1 за степенями ρ і зшиємо Ψ_I з Ψ_1 за умови $Z_1 / \lambda_1^2 \ll z \ll R$.

Знайдемо хвильову функцію Ψ_I в між'ядерній області ($z \sim R$) з точністю до $O(R^{-2})$. Для цього застосуємо розроблену в підрозділі 2.4 загальну схему розв'язування рівняння Дірака до розглядуваного тут потенціалу (2.38). Використовуючи (2.20), (2.25), (2.28), (2.37)-(2.39), обчислюючи інтеграл (2.31) і нехтуючи величинами порядку R^{-2} , отримуємо вирази для функції S_0 :

$$S_0 = -\lambda_I z - \frac{Z_1^2}{2\lambda_I^3 z} + \frac{Z_2^2 z}{2\lambda_I^3 R(R-z)} + \frac{\varepsilon_1 Z_1}{\lambda_1} \ln z - \frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1} \left(1 + \frac{Z_1 - Z_2}{\varepsilon_1 \lambda_1^2 R} \right) \ln \left(1 - \frac{z}{R} \right),$$

де $\lambda_I = c\sqrt{1 - \varepsilon_I^2}$, $\varepsilon_I = E_I / c^2$.

Рівняння (2.33) з потенціалом (2.37) розв'язується ітераціями. Подамо його розв'язок у вигляді

$$\sigma = \sigma_0(1 + \sigma_1 + \sigma_2 + \dots). \quad (2.40)$$

Тут $\sigma_0 = z\sqrt{q_0}$ є розв'язком рівняння (2.33) з модельним сферично-симетричним потенціалом $V = -Z_1/r_1 - Z_2/(R - r_1)$:

$$\sigma_0'' + \left[\frac{1}{4} \left(\frac{q_0'}{q_0} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{q_0''}{q_0} - \frac{1}{z} \frac{q_0'}{q_0} \right] \sigma_0 = 0. \quad (2.41)$$

Поправки $\sigma_1, \sigma_2, \dots$ є величинами порядку R^{-1}, R^{-2}, \dots , відповідно, які враховують слабу залежність потенціалу (2.37) від сферичного кута θ_1 в околі між'ядерної осі \vec{R} . Підставляючи (2.40), з урахуванням (2.41), в рівняння (2.33) і прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях R , отримуємо систему рекурентних рівнянь

$$\sigma_1'' + 2 \frac{\sigma_0'}{\sigma_0} \sigma_1' + H(z) \sigma_1 = 0, \quad (2.42a)$$

$$\sigma_{n+1}'' + 2 \frac{\sigma_0'}{\sigma_0} \sigma_{n+1}' + H(z) \sigma_n = 0, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.42b)$$

де

$$H(z) = \frac{E_I - V_0(z)}{c^2 q_0^2} - \frac{Z_2 R}{z(R-z)^3}.$$

Зауважимо, що рівняння системи (2.42) є рівняннями другого порядку відносно σ_i , але першого – відносно σ'_i . Тому розв'язки цієї системи обчислюються в квадратурах.

Для відшукування $\sigma(z)$ з точністю до членів $\mathcal{O}(R^{-2})$ достатньо знайти тільки σ_1 . Інтегруючи рівняння (2.42а) з граничною умовою (2.38), приходимо до виразу

$$\sigma = z\sqrt{q_0} \left[1 + \frac{\varepsilon_I Z_2}{2\lambda_I^2} \frac{z}{R(R-z)} + \mathcal{O}(R^{-2}) \right]. \quad (2.43)$$

Підстановкою (2.43) в (2.32) отримуємо

$$\mathcal{S}_1 = -\frac{q_0}{2z} \left[1 + \frac{\varepsilon_I Z_2}{2\lambda_I^2} \frac{z}{(R-z)^2} \right]. \quad (2.44)$$

Підставляючи (2.44) в (2.34) і обчислюючи інтеграл з урахуванням (2.38), знаходимо головний член асимптотики функції \mathcal{S}_2 :

$$\mathcal{S}_2 = \frac{\lambda_1}{8z^3}.$$

Врахувавши визначені вище величини і обмежувачись першими двома членами асимптотичного розкладу $\varphi^{(0)}$ (за малим параметром R^{-1}) та головним членом розкладу $\varphi^{(1)}$ (аналогічна процедура проводиться і для біспінора η), отримуємо вираз

$$\varphi^\pm = \frac{\sqrt{\lambda_1} A}{c\sigma} \begin{pmatrix} K^\pm \left(\frac{\rho\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^{|m_1-1/2|} \left[1 + L^\pm \left(\frac{\rho}{z} \right)^2 + \delta_{-m_1|m_1|} U^\pm(z) + \omega^\pm(z) \right] \\ M^\pm \left(\frac{\rho\sqrt{q_0}}{\sigma} \right)^{|m_1+1/2|} \left[1 + N^\pm \left(\frac{\rho}{z} \right)^2 + \delta_{m_1|m_1|} U^\pm(z) + \omega^\pm(z) \right] \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

де введені наступні позначення

$$K^\pm = \left(-P^\pm \right)^{\frac{1-\text{sgn } m_1}{2}} Q^\pm, \quad M^\pm = \left(P^\pm \right)^{\frac{1+\text{sgn } m_1}{2}} Q^\pm, \quad P^\pm = \frac{|m_1| \pm \aleph_1 + 1/2}{2|m_1| + 1},$$

$$Q^\pm = \left[(-1)^{m_1 + \frac{1}{2}} \text{sgn } \aleph_1 \right]^{\frac{1+\text{sgn } m_1}{2}} (\pm 1)^{\frac{1-\text{sgn } m_1}{2}} \frac{i^{j_1 \pm \frac{\text{sgn } \aleph_1}{2}}}{2^{|m_1|-1/2} (|m_1| - 1/2)!} \sqrt{\frac{(j_1 + |m_1|)!}{4\pi(j_1 - |m_1|)!}},$$

$$L^\pm = -\frac{1}{2} \left[|m_1| + 1 - \frac{\text{sgn } m_1}{2} + \frac{\left(\aleph_1 \pm \frac{1}{2} \right)^2 - \left(|m_1| + \frac{1 - \text{sgn } m_1}{2} \right)^2}{2|m_1| + 2 - \text{sgn } m_1} \right],$$

$$L^\pm \xrightarrow{\text{sgn } m_1 \rightarrow -\text{sgn } m_1} N^\pm, \quad U^\pm(z) = -\frac{Z_2}{4W_0^\pm P^\pm} \frac{z(2R-z)}{R(R-z)^2}, \quad \omega^\pm(z) = \frac{\aleph_1(\aleph_1 \pm 1)}{2\lambda_I z}.$$

Тут верхній знак відповідає компоненті ξ , нижній – η . Таким чином ми отримали розв'язки рівняння Дірака з потенціалом двох кулонівських центрів в між'ядерній області з точністю до членів $\mathcal{O}(R^{-2})$. Члени $\omega^\pm(z)$ в формулі (2.45) відповідають відцентровій енергії.

Дане наближення хвильової функції не враховує члени, які відповідають за спін-спінову взаємодію і є порядку R^{-2} , хоча загальна схема, розроблена в підрозділі 2.4 дозволяє знаходити і вищі наближення. Хвильова функція Ψ_{II} , яка відповідає власному значенню E_{II} , будується

аналогічно і може бути отримана з виразу для Ψ_I за допомогою заміни $\varepsilon_{I,1} \rightarrow \varepsilon_{II,2}$, $Z_{1,2} \rightarrow Z_{2,1}$, $z \rightarrow R - z$, $n_1, \mathcal{N}_1, j_1, m_1 \rightarrow n_2, \mathcal{N}_2, j_2, m_2$.

2.6. Асимптотичний підхід до проблеми обмінного розщеплення адіабатичних термів в релятивістській задачі двох кулонівських центрів

Сучасні дослідження у фізиці атомних зіткнень пред'являють все більш високі вимоги до точності та надійності визначення характеристик елементарних процесів (перезарядки, іонізації, тощо) з участю важких іонів [79]. У теоретичному описі таких процесів звернемо увагу на необхідність урахування релятивістських ефектів, роль яких із збільшенням зарядів ядер істотно зростає.

Для обчислення ймовірностей перезарядки атомів на іонах необхідно знати розщеплення адіабатичних термів у точках квазіперетину, яке безпосередньо пов'язане з подвоєним недіагональним матричним елементом електронного гамільтоніана між електронними хвильовими функціями початкового та кінцевого станів. Тому мета даного підрозділу – обчислення перших двох членів асимптотичного (за великих між'ядерних відстаней R) розкладу розщеплення ΔE адіабатичних термів у задачі двох кулонівських центрів для рівняння Дірака.

Розглянемо взаємодію атома 1 з атомом 2, рівень енергії зв'язку якого з електроном близький до атомного. Інакше кажучи, діраківські рівні енергії E_1 і E_2 для потенціалів $-Z_1/r_1$ і $-Z_2/r_2$ випадково виявляються близькими. Припустимо, що різниця енергій $|E_1 - E_2|$ мала порівняно з інтервалами енергій до інших рівнів тонкої структури на будь-якому із взаємодіючих атомів.

Для обчислення величини обмінного розщеплення адиабатичних термів скористаємося отриманим в [35] представленням цієї величини через інтеграл по поверхні S , яка умовно розділяє області локалізації електрона в Ψ_I - і Ψ_{II} -станах:

$$\Delta E = 2ic \int_S d\vec{S} (\Psi_{II}^+ \vec{\alpha} \Psi_I). \quad (2.46)$$

Зазначимо, що зображення (2.46) справедливе тільки в околі точок R_p квазіперетину E_I - і E_{II} - термів. З умови $E_I \cong E_{II}$ за допомогою формули (2.20) отримуємо вираз для точок квазіперетину

$$R_p = \frac{Z_2 - Z_1 + \sqrt{(Z_2 - Z_1)^2 - 4(E_1 - E_2)(Z_2\xi_1 - Z_1\xi_2)}}{2(E_1 - E_2)}. \quad (2.47)$$

Зауважимо, що зображення (2.46) є аналогом добре відомої формули Фірсова [138] для $\Delta E(R)$ в нерелятивістському випадку.

Обчислюючи поверхневий інтеграл (2.46) методом стаціонарної фази [139], приходимо до аналітичного виразу для перших двох членів асимптотичного розкладу $\Delta E(R)$:

$$\Delta E = \frac{2A_1 A_2}{(|m| - 1/2)! (\lambda_1 + \lambda_2)^{|m|-1/2}} D_{j_1 j_2 m} R^{a-|m|-1/2} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{R(\lambda_1 + \lambda_2) + a}{2}\right\} \left[1 + \frac{I_1 + I_2}{R}\right], \quad (2.48)$$

$$I_1 = \frac{1}{\lambda_1 + \lambda_2} \left[\aleph_1^2 + \aleph_2^2 - (|m| + 1/2)^2 - \frac{\aleph_1 \aleph_2}{|m| + 1/2} \right], \quad (2.49a)$$

$$I_2 = \frac{|m| + 1/2}{2} \left(\frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1^2} + \frac{\varepsilon_2 Z_1}{\lambda_2^2} \right) + \frac{\varepsilon_1 Z_2 \xi_1}{2\lambda_1} + \frac{\varepsilon_2 Z_1 \xi_2}{2\lambda_2} - \frac{Z_1^2}{4\lambda_1^3} - \frac{Z_2^2}{4\lambda_2^3}, \quad (2.496)$$

$$D_{j_1 j_2 m} = \sqrt{\frac{(j_1 + |m|)!(j_2 + |m|)!}{(j_1 - |m|)!(j_2 - |m|)!}}, \quad a = \frac{\varepsilon_1 Z_2}{\lambda_1} + \frac{\varepsilon_2 Z_1}{\lambda_2}, \quad m = m_1 = m_2. \quad (2.50)$$

В резонансному випадку, коли всі параметри обох атомів співпадають ($Z_1 = Z_2$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\lambda_1 = \lambda_2$, $n_1 = n_2$, $j_1 = j_2$, $\varkappa_1 = \varkappa_2$) вирази (2.47)-(2.50) визначають обмінне розщеплення між станами E_g і E_u системи (Z, e, Z) , які є симетричним (g) і антисиметричним (u) по відношенню до відображення координат електрона в площині, яка перпендикулярна до між'ядерної осі і ділить її навпіл.

Для того, щоб задовольнялася умова застосовності методу ВКБ, необхідно, щоб між'ядерні віддалі R були набагато більші за відстань R_0 , при якій зникає потенціальний бар'єр по осі \vec{R} між ядрами, тобто

$$R \gg R_0 = \frac{Z_1 + 2\sqrt{Z_1 Z_2} + \sqrt{(Z_1 + 2\sqrt{Z_1 Z_2})^2 + 4(c^2 - E_1)Z_2 \xi_1}}{2(c^2 - E_1)}.$$

Відмітимо, однак, що аналітичні вирази, які отримуються для асимптотичних виразів різного роду розщеплень і зсувів термів, можна використовувати іноді і в області більш малих між'ядерних відстаней, ніж це визначають формальні критерії застосовності асимптотичних розкладів. Кількісним поясненням цієї обставини може служити той факт, що асимптотичні розв'язки двоцентрової задачі зберігають свої аналітичні властивості точного розв'язку [64] і вже перший член розкладу хвильової функції за степенями R^{-1} досить добре і аж до відносно малих R відтворює

результати варіаційних розрахунків [140]. Ці властивості зберігаються і у всіх інших величин, які обчислюються за допомогою цих функцій.

Таким чином, при $R \gg 1$ зсув енергії визначається формулою

$$\delta E = E_- - E_1 = -\frac{Z_2}{R} + \frac{Z_2 \xi_1}{R^2} - \frac{\Delta E}{2}. \quad (2.51)$$

Вклад кожного з членів у формулі (2.51) в залежності від R показаний на рис. 2.3 у резонансного випадку для урану. Відмітимо, що при дуже великих між'ядерних відстанях степеневі монопольний і дипольний члени,

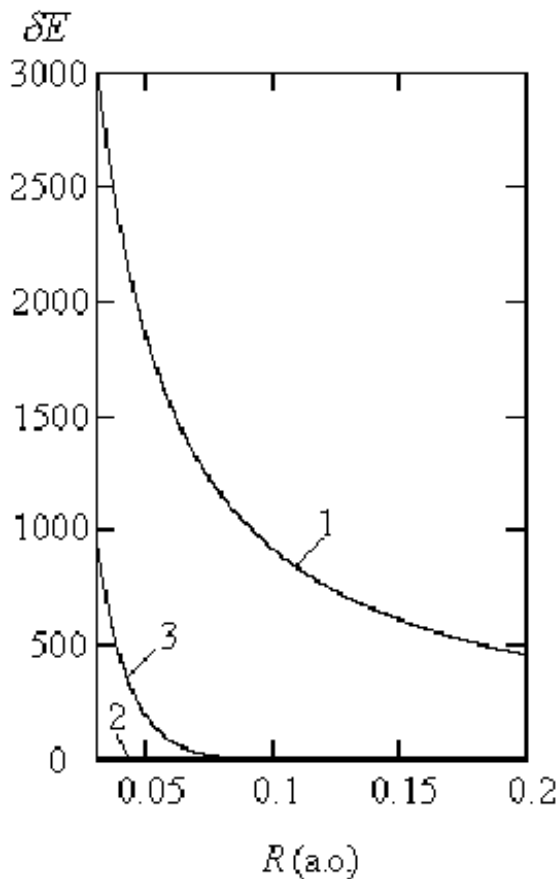


Рис. 2.3а

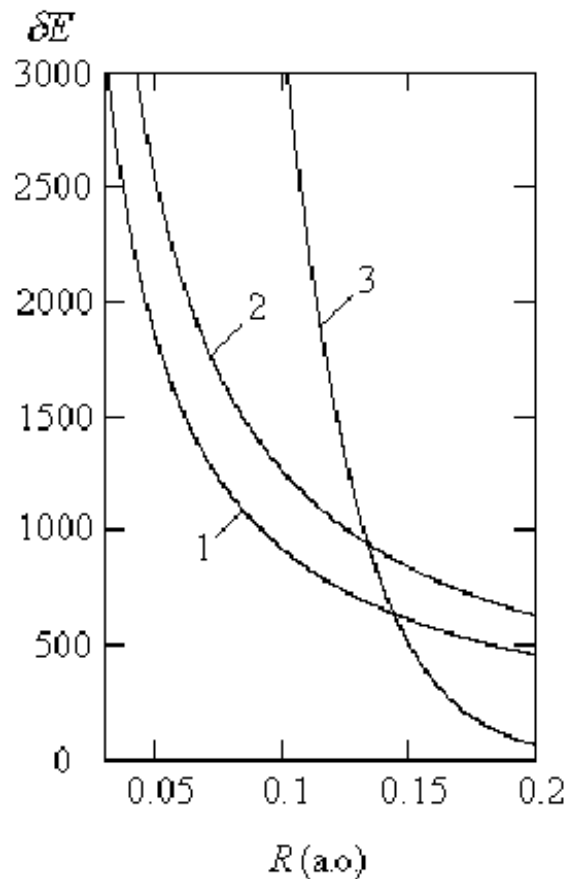


Рис. 2.3б

Рис. 2.3. Абсолютні величини вкладів монопольного (1), дипольного (2) і обмінного (3) членів в енергію системи $Z_1 e Z_2$ в резонансному випадку $Z_1 = Z_2 = 92$ для станів $1S_{1/2}\sigma$ (рис. 2.3а) і $2P_{1/2}\sigma$ (рис. 2.3б).

звичайно, стає більшим, ніж експоненційно згасаючий доданок. Однак при менших значеннях R експоненційний член набагато більший за мультипольні. Ця ситуація аналогічна нерелятивістській [64].

Для оцінки ролі релятивістських ефектів на рис. 2.4 зображено відношення $Q_2(Z, R) = \Delta E / \Delta E^{(n)}$ між релятивістськими (2.47)-(2.50) і нерелятивістськими [64] розрахунками величини обмінного розщеплення симетричного g і антисиметричного u термів системи (Z, e, Z) . Видно, що із збільшенням заряду ядер $Z = Z_1 = Z_2$ вклад релятивістських ефектів зростає і становить $\sim 50\%$ вже при $Z = 45$, а при більших зарядах складає кілька порядків величини.

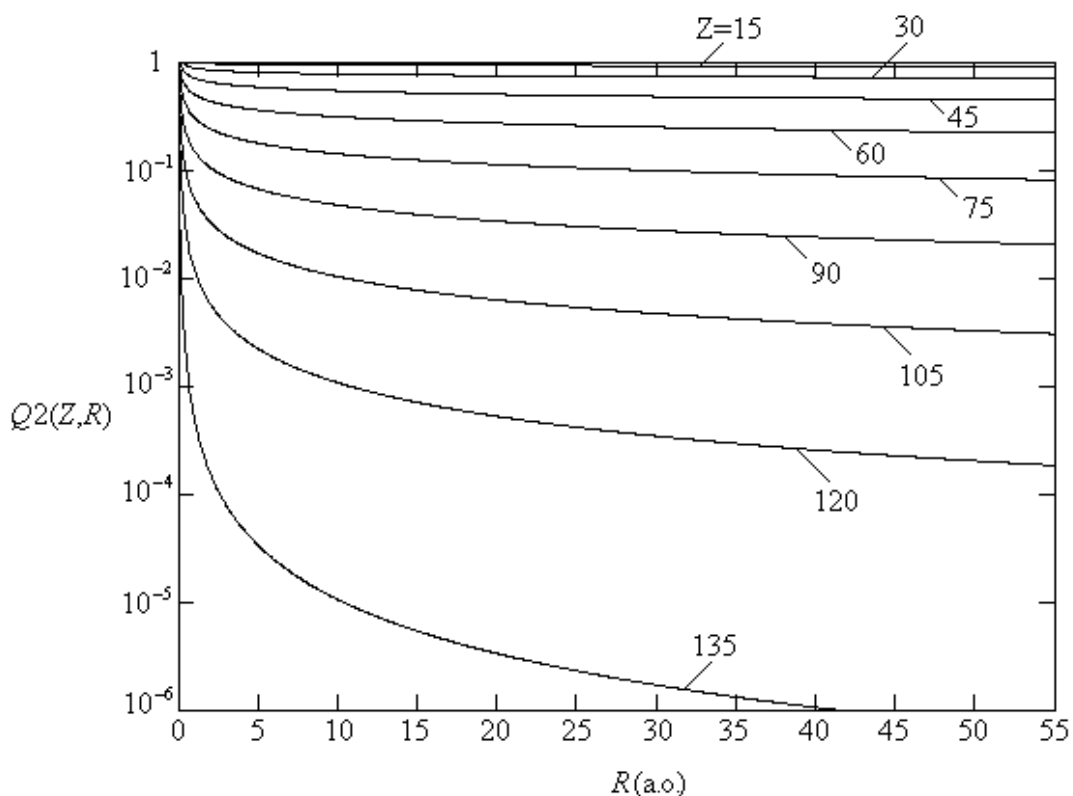


Рис. 2.4. Відносний вклад $Q_2(Z, R)$ релятивістських ефектів в величину обмінного розщеплення термів в резонансному випадку для $1S_{1/2}\sigma$ стану.

2.7. Врахування скінчених розмірів ядра при $Z > 137|\kappa|$

Розглянемо випадок, коли хоча б один із зарядів Z_1 або Z_2 (надалі ми у всіх величинах опустимо індекси, пов'язані із ядрами Z_1 та Z_2 , і будемо розглядати заряд Z) є більшим за 137. Тоді величина $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}$ стає уявною і спектр одноцентрової кулонівської задачі втрачає зміст, а відповідні хвильові функції осцилюють при $r \rightarrow 0$ [137]. Щоб обійти цю проблему, необхідно поставити деяку граничну умову в нулі (що еквівалентно визначенню самоспряженого розширення оператора енергії [141]); лише після цього задача стає математично коректною [142, 143]. Фізично постановка граничної умови в нулі означає обрізування кулонівського потенціалу на малих відстанях, тобто врахування скінчених розмірів ядра.

Припустимо, що $V(r)$ підлягає закону Кулона впритул до поверхні ядра, а всередині ядра має більш складний вигляд:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{r}, & r > r_N, \\ -\frac{Z}{r} f\left(\frac{r}{r_N}\right), & r \leq r_N. \end{cases} \quad (2.52)$$

Тут $f(x)$ – функція обрізування, яка враховує скінчені розміри ядра, $0 \leq x = r/r_N \leq 1$. Найчастіше використовуються дві найпростіші моделі обрізування [18, 21, 22, 75-78]:

Модель I. $f(x) = 1$, тобто прямокутне обрізування. Йому відповідає концентрація всього електричного заряду на поверхні ядра.

Модель II. $f(x) = (3 - x^2)/2$, що відповідає рівномірному розподілу заряду по об'єму ядра.

Щоб знайти спектр рівняння Дірака з потенціалом (2.52), необхідно розв'язати це рівняння всередині ($0 < r < r_N$) і ззовні ($r > r_N$) ядра, що у випадку моделі II вимагає при $0 < r < r_N$ чисельних розрахунків. Ми обмежимося моделлю прямокутного обрізування, для якої рівняння Дірака розв'язується в аналітичному вигляді.

Представляючи розв'язок рівняння Дірака з потенціалом (2.52) у вигляді (2.6), де для спрощення можна опустити індекс 0, після відокремлення змінних отримуємо систему рівнянь для радіальних функцій $F(r)$ і $G(r)$:

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dr} &= -\frac{\aleph}{r} F + \frac{1}{c} (c^2 + E - V) G, \\ \frac{dG}{dr} &= \frac{1}{c} (c^2 - E + V) F + \frac{\aleph}{r} G. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Розв'язки системи (2.53) відомі [144]:

для $r < r_N$

$$F(r) = A\sqrt{r} J_{|\aleph+1/2|}(kr), \quad G(r) = A \operatorname{sgn} \aleph \frac{ck\sqrt{r}}{E_1 + Z_1/r_N + c^2} J_{|\aleph-1/2|}(kr), \quad (2.54)$$

$$k = \frac{1}{c} \sqrt{\left(E + \frac{Z}{r_N}\right)^2 - c^4}.$$

для $r < r_N$

$$\left. \begin{matrix} F \\ G \end{matrix} \right\} = \pm \sqrt{1 \pm \varepsilon} e^{-\rho/2} \rho^\gamma (Q_1 \pm Q_2), \quad (2.55)$$

$$Q_j = C_j \Psi(\chi_j, 2\gamma + 1; \rho), \quad j=1,2, \quad \rho = 2\lambda r, \quad (2.56)$$

$$\chi_1 = -\varepsilon Z/\lambda + \gamma, \quad \chi_2 = \chi_1 + 1,$$

$$C_2/C_1 = Z/\lambda + \aleph, \quad \lambda = c\sqrt{1-\varepsilon^2}, \quad \gamma = \sqrt{\aleph^2 - (Z\alpha)^2},$$

де $J_n(x)$ – функція Бесселя, $\Psi(a; b; z)$ – іррегулярний розв’язок виродженого гіпергеометричного рівняння [145].

Зшиваючи відношення G/F в точці $r=r_N$, отримуємо вираз, який визначає рівні енергії електрона в розглянутому потенціалі:

$$\frac{\sqrt{1-\varepsilon}}{\sqrt{1+\varepsilon}} \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2} \Big|_{r=r_N} = A_{\aleph}. \quad (2.57)$$

Тут A_{\aleph} – відношення $G/F|_{r=r_N}$ функцій (2.54), що описують електрон всередині ядра.

Оскільки радіус ядра r_N малий порівняно з комптонівською довжиною хвилі електрона (для реальних ядер $r_N \approx 1.1 \cdot (2.5Z)^{1/3}$ фермі і, наприклад, при $Z=137$ $r_N \approx 1.5 \times 10^{-4}$ а. о.), то всюди можна вважати $k \approx Z\alpha/r_N$.

Зв’язок між сталими A і C_1 (або C_2) знаходиться за допомогою зшивання в точці $r=r_N$ розв’язків F (або G), які справедливі зліва і справа від цієї точки:

$$B = \frac{A}{C_1} = \frac{1}{J_{|\aleph+1/2|}(Z\alpha)} \sqrt{\frac{1+\varepsilon}{r_N}} \left[\frac{\Gamma(-2\gamma)}{\Gamma(\chi_2 - 2\gamma)} \left(\frac{C_2}{C_1} + \chi_1 - 2\gamma \right) (2\lambda r_N)^\gamma + \frac{\Gamma(2\gamma)}{\Gamma(\chi_2)} \left(\frac{C_2}{C_1} + \chi_1 \right) (2\lambda r_N)^{-\gamma} \right]. \quad (2.58)$$

Відмітимо, що хоча зв'язок між сталими A , C_1 і C_2 відомий [144], самі константи в загальному випадку не було обчислено. Для цього потрібно віднормувати хвильові функції за допомогою умови:

$$\int_0^{\infty} (F^2 + G^2) dr = 1. \quad (2.59)$$

Інтеграл (2.59) обчислений в Додатку. Випишемо тільки кінцевий результат для сталої C_1 :

$$|C_1| = (B^2 I_{<}^0 + I_{>}^0)^{-1/2}, \quad (2.60)$$

де введено позначення

$$I_{<}^0 = r_N^2 \left[J_{|\aleph+1/2|}^2(Z\alpha) - \frac{2|\aleph|}{Z\alpha} J_{|\aleph+1/2|}(Z\alpha) J_{|\aleph-1/2|}(Z\alpha) + J_{|\aleph-1/2|}^2(Z\alpha) \right],$$

$$I_{>}^0 = \frac{2\Gamma(-2\gamma)\Gamma(2\gamma+1)}{\lambda\Gamma(\chi_2-2\gamma)\Gamma(\chi_2)} \left\{ \left(\frac{Z\alpha}{\lambda} + \aleph \right) \left[\frac{Z\alpha}{\lambda} (\psi(\chi_2-2\gamma) - \psi(\chi_2)) - 2\epsilon\gamma \right] - \gamma \right\}.$$

Цікаво, що асимптотики радіальних хвильових функцій F і G (2.55) мають такий самий вигляд, як і без врахування скінчених розмірів ядра (див. (2.39)), де ϵ_1 є розв'язком трансцендентного рівняння (2.57), замість асимптотичного коефіцієнта A_1 фігурує вираз $|C_1|(2\lambda_1)^{\epsilon_1 Z_1/\lambda_1}$, а квантові числа n_1 , j_1 , l_1 , m_1 характеризують стани ізольованого eZ_1 -атома. Це означає, що вирази для двоцентрової хвильової функції та для величини обмінного розщеплення термів можуть бути поширені на випадок ядер із скінченими розмірами з точністю до вказаних замін. Величина ξ_1 в

розкладі (2.20a) для енергії системи Z_1eZ_2 з використанням у якості нульового наближення функцій (2.54)-(2.56) буде мати, звичайно, набагато складніший вигляд, але оскільки $r_N \ll 1$, то в прийнятому наближенні для ξ_1 можна користуватися формулою (2.20б).

2.8. Висновки до розділу 2

В другому розділі асимптотичними методами детально проаналізовано дискретний спектр релятивістської задачі двох кулонівських центрів Z_1eZ_2 . Для обчислення степеневих поправок до енергії $E(R)$ системи Z_1eZ_2 використовується метод теорії збурень, який не вимагає відокремлення змінних. Отримані при малих та великих R асимптотичні формули є основним технічним засобом при побудові релятивістських одноелектронних кореляційних діаграм важких квазімолекул в області між границями об'єднаного та роз'єднаного атомів.

Запропоновано новий метод розрахунку хвильових функцій діраківського електрона в підбар'єрній області для тривимірних аксіально-симетричних задач. Показано, що в параксіальному наближенні Фока-Леонтовича рівняння Дірака в околі найбільш ймовірного шляху тунелювання електрона допускає відокремлення змінних для довільних потенціалів з осьовою симетрією. На разі цей метод є єдиним прикладом загального підходу до розв'язання релятивістських одно- та двоцентрових задач, що дозволяє аналітично на рівних засадах враховувати вплив самих різноманітних, принципово важливих фізичних ефектів. Одним із найбільш результативних застосувань запропонованого методу є послідовне квазікласичне розв'язання релятивістської двоцентрової задачі, що дало можливість єдиним чином описати якісні особливості енергетичних спектрів одноелектронних важких та надважких двоатомних

квазімолекул: наявність в системі термів перетинів і квазіперетинів, обмінного розщеплення адіабатичних термів в подвійній потенціальній ямі, однократних “обмінно-перезарядочних” переходів, тощо. Отримані при цьому перші два члени асимптотичного (за великими міжцентровими відстанями) виразу для обмінного розщеплення термів ΔE виражаються через відомі характеристики роз’єднаних атомів: заряди атомних залишків Z_1 і Z_2 , асимптотичні коефіцієнти A_1 , A_2 , енергії зв’язку $\lambda_{1,2}^2/2$ і квантові числа електрона в розглянутих станах атомів (іонів). Вивчено вклад монопольного, дипольного і обмінного членів у енергію системи $Z_1 e Z_2$ в залежності від R і встановлено, що в асимптотичній області ($R \gg 1$) домінуючими є мультипольні члени (2.20), а при проміжних значеннях R – навпаки, превалює експоненційна поправка (2.48) до енергії системи.

На прикладі асимптотик енергії задачі $Z_1 e Z_2$ та величини обмінного розщеплення термів ΔE показано, що із збільшенням заряду ядер вклад релятивістських ефектів в ці величини різко зростає і, наприклад, для ΔE в резонансному випадку становить $\sim 50\%$ вже при $Z_1 = Z_2 = 45$, а при більших зарядах складає цілі порядки величини.

РОЗДІЛ 3

РЕЛЯТИВІСТСЬКА СФЕРИЧНА МОДЕЛЬ ЕФЕКТУ ШТАРКА У ВОДНЕВОПОДІБНОМУ ІОНІ

3.1. Вступні зауваження

Дослідженню поведінки атомів в зовнішніх електромагнітних полях присвячено велику кількість літератури (див. підрозділ 1.2 цієї дисертації та посилання в працях [146]). Властивості енергетичного спектра атома водню і інших атомів в сильних електричних полях обговорювались багатьма авторами [10, 47, 48, 53, 83, 86-105], однак при цьому ширинами рівнів зазвичай нехтували.

Проблеми, пов'язані з іонізацією атомів та іонів в зовнішніх полях, набули особливої актуальності після появи лазерів. В 60-ті роки було створено квазікласичну теорію іонізації в електричному полі, при цьому підбар'єрний рух електрона вважався нерелятивістським, що виконується для валентних електронів у всіх атомах, від водню до урану. Проте у випадку іонізації K -оболонки у важких атомах стають істотними релятивістські ефекти, послідовне врахування яких вимагає узагальнення квазікласичної теорії іонізації в електричному полі на релятивістський випадок, що може виявитися корисним також в низці питань релятивістської ядерної фізики та квантової хромодинаміки.

Ми продемонструємо можливість такого узагальнення на прикладі сферичної моделі штарківської іонізації зв'язаного стану, енергія зв'язку якого порівняна з енергією спокою mc^2 . Із загальнофізичної точки зору ця задача відноситься до однієї важливої проблеми, пов'язаної з вивченням взаємодій розпадних (квазістаціонарних) станів квантових об'єктів [141]. Такі стани вводяться, як відомо, за аналогією із звичайними стаціонарними

станами дискретної частини спектра власних значень гамільтоніана. На комплексній площині енергій E їм відповідають полюси стаціонарної функції Гріна (див. [141]), $G(E) = (E - \hat{H} + iq)^{-1}$ (тут \hat{H} – повний гамільтоніан системи).

Введення комплексних рівнів енергії порушує, однак, один з основних постулатів квантової теорії, згідно якого спектр власних значень довільного ермітового оператора має бути дійсним, а відповідні власні функції – нормованими. Аналітичні продовження стаціонарних розв’язків у комплексну площину енергій мають, таким чином, принципово новий зміст. Вони дають найпростішу і найбільш зручну апроксимацію нестаціонарних розв’язків у основній області зміни змінних, там, де точні хвильові функції $\Psi(\vec{r}, t)$ найбільш близькі до функцій стаціонарних зв’язаних станів:

$$\Psi(\vec{r}, t) \approx \psi_n(\vec{r}) \exp(-iE_{njlmt}), \quad \text{Im } E_{njlmt} \ll \text{Re } E_{njlmt}.$$

Уточнення області застосовності вихідних представлень теорії квазістаціонарних станів і вдосконалення методів розрахунку довгий час складали основну задачу досліджень цього напрямку. Ця задача залишається актуальною і зараз, особливо в застосуваннях до конкретних квантових систем. Так, природно виникає питання про вплив на властивості квазістаціонарних станів різних фізичних ефектів – бар’єрних, релятивістських (і, зокрема, спіно-орбітальної взаємодії), просторової розмірності, тощо.

Результати, отримані при розв’язанні подібних задач, знаходять застосування в фізиці повільних атомних зіткнень [63], в ядерній фізиці [147], в теорії багатофотонних процесів в атомах [148], в задачі про іонізацію атомів в електричному полі [30], тощо.

Послідовний розгляд ефекту Штарка рівнів тонкої структури водневоподібного атома повинен проводитися на основі релятивістської задачі про рух електрона у полі ядра та постійного зовнішнього електричного поля. Оскільки змінні у рівнянні Дірака для такого суперпозиційного потенціалу не відокремлюються в жодній ортогональній системі координат, то в даному розділі розглянуто задачу про розпад квазістаціонарного стану для модельного сферично-симетричного потенціалу, що має вигляд ями, відділеної від зовнішньої області потенціальним бар'єром.

На основі квазікласичних розв'язків рівняння Дірака отримано загальні аналітичні вирази для положення та ширини квазістаціонарних рівнів у випадку, коли потенціальна яма оточена достатньо широким потенціальним бар'єром. Як застосування розвиненого методу розглянуто релятивістський аналог сферичної моделі ефекту Штарка у двох та трьох просторових вимірах.

3.2. Метод ВКБ для центральних потенціалів

Застосування методу ВКБ до сильного зовнішнього поля ґрунтувалося в ранніх роботах [19,20] на квадрванні рівняння Дірака (метод ефективного потенціалу [18, 22]). Такий підхід добре працює при $E \geq -c^2$. Однак для станів з енергією $E < -c^2$ підстановка $\chi(r) = (c^2 + E - V)^{-1/2} F(r)$, яка використовується в цьому методі, стає сингулярною в точці $r = r_g$, де $V(r_g) = E + c^2$ (розглядується потенціал притягання: $V(r) < 0$, $0 < r < \infty$). Внаслідок цього звичайні квазікласичні формули втрачають зміст поблизу точки $r = r_g$ внаслідок розбіжності фазових інтегралів. Різні автори [18, 22, 149] долали цю трудність по-

різному, іноді досить оригінально, але єдиного методу запропоновано не було і, ймовірно, тому згадана версія ВКБ-методу в подальшому до цієї задачі не застосовувалась.

Поряд з цим в кінці 70-их років був розвинений новий варіант квазікласичного аналізу рівняння Дірака в сильному зовнішньому сферично-симетричному полі [21, 150], покликаний врятувати ситуацію. Виявилось, що вказана вище трудність носить формальний характер, так як вихідне рівняння Дірака не є сингулярним в точці $r = r_g$. Сингулярність при $r = r_g$ взагалі не виникає, якщо застосовувати ВКБ-наближення не до рівняння другого порядку для $\chi(r)$, а безпосередньо до вихідної системи Дірака для радіальних хвильових функцій F і G . Отримані таким шляхом квазікласичні формули для енергії квазістаціонарних рівнів, які належать до нижнього континуума розв'язків рівняння Дірака, мають численні застосування в теорії надкритичних атомів [21]. Тому природно спробувати використати метод ВКБ і для відшукування розв'язків рівняння Дірака в сферичній моделі штарк ефекту, вибраного нами в якості своєрідного полігону для випробовування можливостей ВКБ-методу.

Отримаємо формули квазікласичного наближення для розв'язків рівняння Дірака, обмежуючись класом потенціалів з сферичною симетрією. Розв'язок рівняння Дірака для електрона в центральному полі з потенціалом $V = -eA(r)$ може бути представлений у вигляді:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F(r)\Omega_{jlm}(\vec{n}) \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} G(r)\Omega_{j'l'm}(\vec{n}) \end{pmatrix}, \quad l = j \pm 1/2, \quad l' = 2j - l, \quad \vec{n} = \vec{r}/r, \quad (3.1)$$

де Ω_{jlm} і $\Omega_{j'l'm}$ – кульові спінори [137]; j , m – повний кутовий момент і його проекція ($j = l \pm 1/2$); l – орбітальний момент електрона в ізольованому

атомі. Відокремлення змінних в рівнянні Дірака призводить до системи двох звичайних диференціальних рівнянь першого порядку для радіальних функцій $F(r)$ і $G(r)$ [137]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dF}{dr} &= -\frac{\aleph}{r} F + \frac{1}{c}(c^2 + E - V)G \\ \frac{dG}{dr} &= \frac{1}{c}(c^2 - E + V)F + \frac{\aleph}{r} G \end{aligned} \right\}. \quad (3.2)$$

Тут $\aleph = \mp(j+1/2)$ для станів з $j = l \pm 1/2$ поряд з j , m і енергією E є інтегралом руху для діраківської частинки в довільному центральному полі.

Систему (3.2) можна звести до рівняння другого порядку, виключивши одну з невідомих функцій, але при побудові асимптотичних розв'язків зручніше оперувати безпосередньо з самою системою.

Для відшукування квазікласичних розв'язків системи Дірака (3.2) зручно переписати її у матричній формі:

$$\psi' = \frac{1}{\hbar} D\psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\aleph}{r} & \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \\ \frac{1}{c}(c^2 - E + V) & \frac{\hbar\aleph}{r} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Тут ми відновили в явному вигляді сталу Планка \hbar ; штрих означає похідну по r , а зовнішній електростатичний потенціал $V(r) = -eA^0(r)$.

Розв'язок рівняння (3.3) шукатимемо у вигляді формальних степеневих рядів за \hbar :

$$\psi = \varphi(r) \exp(\int y dr), \quad (3.4a)$$

$$y(r) = \frac{1}{\hbar} y_{-1}(r) + y_0(r) + \hbar y_1(r) + \dots, \quad \varphi(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \hbar^n \varphi_n(r), \quad (3.4б)$$

де φ і φ_n – двокомпонентні величини, верхня компонента яких відповідає радіальній функції F , а нижня – G . Підставляючи розклади (3.4) у систему (3.3) і прирівнюючи коефіцієнти при однакових степенях \hbar , отримуємо рекурентну систему рівнянь:

$$(D - y_{-1})\varphi^{(0)} = 0 \quad (3.5а)$$

$$(D - y_{-1})\varphi^{(n+1)} = \varphi^{(n)'} + \sum_{k=0}^n y_{n-k}\varphi^{(k)}, \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.5б)$$

з якої величини $y_n(r)$, $\varphi_n(r)$ визначаються послідовно. Ми обмежимося розглядом перших двох рівнянь, які визначають поправки нижчого порядку.

Із рівняння (3.5а) випливає, що y_{-1} повинно бути власним значенням, а $\varphi^{(0)} \equiv \varphi_i^{(0)}(r)$ – одним із власних (правих) векторів матриці $D(r)$. Власні значення $y_{-1}(r) = \lambda_i$ є коренями вікового (або характеристичного) рівняння $\det(D - y_{-1}) = 0$, а відповідні власні вектори $\varphi_i^{(0)}$ можна знайти в явному вигляді при діагоналізації матриці $D - y_{-1}$:

$$y_{-1}(r) = \lambda_i = \pm q, \quad q(r) = \frac{1}{c} \sqrt{c^4 - (E - V)^2 + \frac{c^2 \aleph^2}{r^2}}, \quad (3.6)$$

$$\varphi_i^{(0)} = A_1 \begin{pmatrix} \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \\ \pm Q_{\pm} \end{pmatrix} = A_2 \begin{pmatrix} \pm Q_{\mp} \\ \frac{1}{c}(c^2 - E + V) \end{pmatrix}, \quad Q_{\pm} = q \pm \aleph/r. \quad (3.7)$$

Тут і далі $\hbar = 1$; індекс i приймає два значення \pm , що відповідають двом значенням функції $y_{-1}(r) = \pm q$; $A_1(r)$ і $A_2(r)$ – деякі функції, які будуть визначені пізніше.

Оскільки матриця D не є симетричною, то поряд з правими власними векторами $\varphi_i^{(0)}$ потрібно ввести ліві власні вектори $\check{\varphi}_i^{(0)}$:

$$\check{\varphi}_i^{(0)}(D - \lambda_i) = 0, \quad \check{\varphi}_i^{(0)} \neq (\varphi_i^{(0)})^T, \quad (3.8)$$

$$\check{\varphi}_i^{(0)} = B_1 \left(\frac{1}{c}(c^2 - E + V), \pm Q_{\pm} \right) = B_2 \left(\pm Q_{\mp}, \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \right), \quad (3.9)$$

де T – транспонування матриці. Легко перевірити, що ліві і праві власні вектори взаємоортогональні:

$$\left(\check{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_j^{(0)} \right) = \text{const} \cdot \delta_{ij}.$$

Нагадаємо, що $\check{\varphi}_i^{(0)}$ – вектор-рядок, а δ_{ij} – символ Кронекера. Для визначення y_0 покладемо в другому рівнянні системи (3.5) $\varphi^{(0)} = \varphi_i^{(0)}$ і помножимо обидві частини зліва на $\check{\varphi}_i^{(0)}$. Тоді з урахуванням (3.8) член з $\varphi^{(1)}$ обернеться в нуль, і приходимо до рівняння для $y_0(r)$, з якого знаходимо

$$y_0(r) = - \left(\check{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)'} \right) / \left(\check{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)} \right). \quad (3.10)$$

Підберемо нормувальні множники $A_{1,2}$ і $B_{1,2}$ у (3.7) і (3.9) так, щоб виконувалась рівність

$$\begin{pmatrix} \check{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \check{\varphi}_i^{(0)'} , \varphi_i^{(0)} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

В цьому випадку інтеграл $\int^r y_0 dr$ обчислюється у замкнутому вигляді:

$$\int^r y_0 dr = \ln \left[\begin{pmatrix} \check{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)} \end{pmatrix}^{-1/2} \right]. \quad (3.12)$$

Знайдемо співвідношення між функціями A_1 і B_1 (A_2 і B_2 знаходяться аналогічно). Підставляючи в (3.11) вирази (3.7), (3.9), приходимо до рівняння

$$\frac{A_1 B_1' - A_1' B_1}{A_1 B_1} = -\frac{V'}{qQ_{\pm}}, \quad (3.13)$$

звідки

$$A_1 = B_1 \exp \left\{ \int^r \frac{V'}{qQ_{\pm}} dr \right\}. \quad (3.14)$$

Обчислимо тепер вектор-функцію $\varphi_i^{(1)} = \begin{pmatrix} \varphi_F^{(1)} \\ \varphi_G^{(1)} \end{pmatrix}$ та y_1 . Оскільки

$\det(D - y_{-1}) = 0$, то в другому рівнянні системи (3.5) достатньо розглянути

тільки одну (верхню або нижню) компоненту. Виразивши з нього $\varphi_G^{(1)}$ через $\varphi_F^{(1)}$, отримуємо

$$\varphi_G^{(1)} = \pm \frac{cQ_{\pm}}{(c^2 + E - V(r))} \varphi_F^{(1)} - \alpha_1 A, \quad (3.15)$$

де

$$\alpha_1(r) = \frac{1}{2q} \left[\frac{c^2 - E + V(r)}{c^2 Q_{\mp}} V'(r) + Q_{\pm} \right].$$

Для визначення y_1 помножимо третє рівняння системи (3.5) на $\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}$ зліва. Тоді, враховуючи (3.8), (3.10), приходимо до виразу для y_1 :

$$y_1 = - \left[\left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(1)'} \right) \left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)} \right) - \left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)'} \right) \left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(1)} \right) \right] / \left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)} \right)^2. \quad (3.16)$$

Для того, щоб інтеграл $\int^r y_1 dr$ обчислювався в скінченному вигляді,

припустимо, що

$$\left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(1)'} \right) = \left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)'} , \varphi_i^{(1)} \right), \quad (3.17)$$

тоді в результаті інтегрування

$$\int^r y_1 dr = -\frac{1}{2} \left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(1)} \right) / \left(\overset{\vee}{\varphi}_i^{(0)}, \varphi_i^{(0)} \right). \quad (3.18)$$

Умову (3.17) завжди можна задовольнити вибором $\varphi_F^{(1)}$ або $\varphi_G^{(1)}$. Підставивши (3.7), (3.9), (3.15) в рівність (3.17), приходимо до виразів для $\varphi_F^{(1)}$ та $\varphi_G^{(1)}$:

$$\varphi_F^{(1)} = \frac{A_1}{2c} (c^2 + E - V) \left\{ \int^r \frac{1}{q} \left[\frac{\aleph(\alpha_1(r))'}{r} \pm \frac{V'(r)\alpha_1(r)}{qQ_{\pm}} \right] dr \pm \frac{\alpha_1(r)}{Q_{\pm}} \right\}, \quad (3.19)$$

$$\varphi_G^{(1)} = \frac{A_1}{2} Q_{\pm} \left\{ \int^r \frac{1}{q} \left[\frac{V'(r)\alpha_1(r)}{qQ_{\pm}} \pm \frac{\aleph(\alpha_1(r))'}{r} \right] dr - \frac{\alpha_1(r)}{Q_{\pm}} \right\}. \quad (3.20)$$

Розв'язуючи подібним чином наступні рівняння системи (3.5), можна послідовно знайти члени $y_2, y_3, \dots, \varphi^{(2)}, \varphi^{(3)}, \dots$ в розкладах (3.4). Але, як ми вже бачимо на прикладі $y_1, \varphi^{(1)}$ (див. (3.18)-(3.20)), вирази для них виявляються громіздкими, і тому в застосуваннях обмежуються, як правило, першими членами розкладу. Насправді це пов'язано з тією обставиною, що розклади (3.4) за степенями \hbar в загальному випадку не збігаються [1-3], а є асимптотичними рядами, скінчене число членів яких дає добре наближення для хвильової функції, якщо параметр розкладу – стала Планка \hbar – досить малий. Таким чином, обмежувачись в розкладах (3.4) членами y_{-1}, y_0 та $\varphi^{(0)}$, які відповідають відомому виразу для класичної хвильової функції в нерелятивістській квантовій механіці:

$$\psi \sim p^{-1/2} \exp\left(\pm i \int^r p dr\right),$$

отримуємо для A_1 і B_1 (з точністю до нормувальної сталої)

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{qQ_{\pm}}} \exp\left[\int^r \left(\pm q + \frac{V'(r)}{2qQ_{\pm}}\right) dr\right] \begin{pmatrix} \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \\ \pm Q_{\pm} \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Використання другої форми запису власних векторів $\varphi_i^{(0)}$ і $\check{\varphi}_i^{(0)}$ (з множниками A_2 і B_2 в (3.7) і (3.9)) приводить після аналогічних обчислень до наступного виразу:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{qQ_{\mp}}} \exp\left[\int^r \left(\pm q - \frac{V'(r)}{2qQ_{\mp}}\right) dr\right] \begin{pmatrix} \pm Q_{\mp} \\ \frac{1}{c}(c^2 - E + V) \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Обговоримо зміст одержаних формул. Насамперед зауважимо, що q збігається (з точністю до $i = \sqrt{-1}$) з радіальним імпульсом релятивістської квазікласичної частинки. Знак $+$ ($-$) у (3.21) і (3.22) відповідає розв'язку, зростаючому (спадному) із зростанням r . Для спадного розв'язку (знак $-$) потрібно використовувати формулу (3.21) при $\aleph < 0$ і формулу (3.22) при $\aleph > 0$; для зростаючого розв'язку – навпаки. Вибір зручної форми запису розв'язку визначається тим, щоб величина $Q_{\pm} = q \pm \aleph/r$ була додатна у підбар'єрній області. При іншому виборі розв'язку у виразах для $F(r)$ і $G(r)$ з'являються сингулярності (обертання в нуль множника Q_{\pm} , що наявний у знаменнику). Неважко помітити, що ця сингулярність фіктивна, так як в цій же точці обертається в нуль і чисельник. Однак одержання

формул для $F(r)$ і $G(r)$, позбавлених від сингулярностей, вимагало б розкриття цієї невизначеності, що пов'язано з додатковими обчисленнями.

Якщо величину q зобразити у вигляді $q = \sqrt{2(U - E_{bin})}$, то виразу (3.6) відповідає енергія зв'язку $E_{bin} = -\lambda^2/2$, ($\lambda = c\sqrt{1 - \varepsilon^2}$, $\varepsilon = E/c^2$) та ефективний потенціал

$$U(r, \varepsilon) = \varepsilon V - V^2/2c^2 + \aleph^2/2r^2. \quad (3.23)$$

Припустимо, що потенціал V є бар'єрного типу, прикладом якого є потенціал $V(r) = -\frac{Z}{r} - Fr$, що буде розглянутий в підрозділі 3.5. В цьому випадку ефективний потенціал $U(r, \varepsilon)$ має вигляд, зображений на рис. 3.1, і відповідає притяганню на малих відстанях від ядра $r < r_-$ та відштовхуванню при $r > r_-$, де r_0 , r_- і r_+ є точками повороту (тобто розв'язками рівняння $q = 0$).

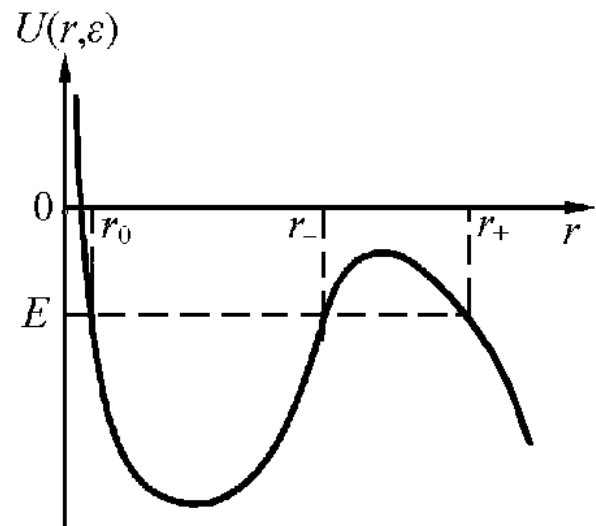


Рис. 3.1. Вигляд ефективного потенціалу $U(r, \varepsilon)$.

Хвильова функція квазістаціонарного стану має різний вигляд в різних областях: I) класично дозволена область $r_0 < r < r_-$ ($q^2 < 0$); II) підбар'єрна область $r_- < r < r_+$ ($q^2 > 0$); III) класично дозволена область з неперервним спектром $r > r_+$ ($q^2 < 0$). Розглянемо в наступному підрозділі поведінку розв'язку в цих областях.

3.3. Хвильова функція діраківського електрона в класично дозволених та забороненій областях

I. Область $r_0 < r < r_-$ – класично дозволена; в ній хвильові функції (3.21), (3.22) осцилюють

$$F = C_1^\pm \left(\frac{E - V + c^2}{cp} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \Theta_1, \quad G = C_1^\pm \operatorname{sgn} \aleph \left(\frac{E - V - c^2}{cp} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \Theta_2. \quad (3.24)$$

Тут

$$p(r) = \frac{1}{c} \sqrt{(E - V)^2 - c^4 - \frac{c^2 \aleph^2}{r^2}} \quad (3.25)$$

– квазікласичний імпульс для радіального руху частинки, C_1^\pm – стала нормування,

$$\Theta_1 = \int_{r_0}^r \left(p + \frac{\aleph w}{pr} \right) dr + \frac{\pi}{4}, \quad \Theta_2 = \int_{r_0}^r \left(p + \frac{\aleph \tilde{w}}{pr} \right) dr + \frac{\pi}{4},$$

$$w = \frac{1}{2} \left(\frac{V'}{c^2 + E - V} - \frac{1}{r} \right), \quad \tilde{w} = \frac{1}{2} \left(\frac{V'}{c^2 - E + V} + \frac{1}{r} \right).$$

Знаки \pm відповідають значенням $\aleph > 0$ і $\aleph < 0$. Якщо ширина рівня Γ мала (що підтверджується відповіддю), то хвильову функцію квазістаціонарного стану можна нормувати на одну частинку, локалізовану в області I, нехтуючи її проникненням в класично заборонені області $r < r_0$ і $r > r_-$, де F і G спадають експоненційно [1]:

$$\int_{r_0}^{r_-} (F^2 + G^2) dr = 1. \quad (3.26)$$

При цьому $\cos^2 \Theta_i(r)$ замінюється на його середнє значення 1/2:

$$|C_1^\pm| = \left\{ \int_{r_0}^{r_-} \frac{E - V(r)}{c^2 p(r)} dr \right\}^{-1/2} = \left(\frac{2}{cT} \right)^{1/2}, \quad (3.27)$$

де T – період коливань релятивістської частинки всередині потенціальної ями. Відмітимо, що в точках повороту r_0 і r_- виконується рівність

$$E - V = \left[c^4 + c^2 \aleph^2 / r^2 \right]^{1/2}$$

і $E - V > c^2$ в області I.

II. Підбар'єрна область $r_- < r < r_+$ – класично заборонена. Тут $p = iq$, а величини q , y_{-1} і y_0 – дійсні. Як відомо [1], хвильова функція повинна спадати в глиб цієї області. Отже, розв'язками системи рівнянь Дірака (3.3) в підбар'єрній області для $\aleph > 0$ є

$$\psi = \frac{C_2^+}{\sqrt{qQ_+}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(-q - \frac{V'(r)}{2qQ_+} \right) dr \right] \begin{pmatrix} -Q_+ \\ \frac{1}{c}(c^2 - E + V) \end{pmatrix}, \quad (3.28a)$$

для $\aleph < 0$

$$\psi = \frac{C_2^-}{\sqrt{qQ_-}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(-q + \frac{V'(r)}{2qQ_-} \right) dr \right] \begin{pmatrix} \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \\ -Q_- \end{pmatrix}. \quad (3.286)$$

III. Найбільш цікавим є результат для області неперервного спектра ($r > r_+$). Тут хвильова функція виражається як розбіжна хвиля (електрон, що вилітає):

для $\aleph > 0$

$$\psi = \frac{C_3^+}{\sqrt{pP_+}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(ip + \frac{V'(r)}{2pP_+} \right) dr \right] \begin{pmatrix} iP_+ \\ \frac{1}{c}(c^2 - E + V) \end{pmatrix}, \quad (3.29a)$$

для $\aleph < 0$

$$\psi = \frac{C_3^-}{\sqrt{pP_-}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(ip - \frac{V'(r)}{2pP_-} \right) dr \right] \begin{pmatrix} \frac{1}{c}(c^2 + E - V) \\ iP_- \end{pmatrix}, \quad (3.296)$$

де $P_{\pm} = p \pm i\aleph/r$.

Одержані формули визначають квазікласичну асимптоту розв'язків рівняння Дірака (3.2) при $\hbar \rightarrow 0$ і охоплюють весь діапазон значень r , за винятком околів точок повороту. Для обходу цих точок і зшивання розв'язків в різних областях застосовується стандартний метод [2]. Так, наприклад, поблизу точки повороту r_+ система рівнянь Дірака (3.2) зводиться до рівняння Шредінгера з лінійно залежним від $r - r_+$ ефективним потенціалом, розв'язок якого виражається через функцію Ейрі. Можна також використати більш елегантний метод Цваана [1, 3]. Таким чином, зв'язок між константами в різних областях має вигляд

$$C_2^\pm = -iC_3^\pm = \mp \frac{C_1^\pm}{2} \left[\frac{|\mathcal{N}|}{(c^2 r_-^2 + \mathcal{N}^2)^{1/2} + cr_-} \right]^{\mp \frac{1}{2}} \exp \left[- \int_{r_-}^{r_+} \left(q^\pm \frac{V(r)}{2qQ_\pm} \right) dr \right]. \quad (3.30)$$

Хоча формули (3.24)-(3.30) істотно відрізняються від аналогічних формул нерелятивістської квазікласики (зокрема, хвильові функції різняться від нерелятивістських релятивістським виразом для квазіімпульсу p , включенням поправки, що враховує спін-орбітальну взаємодію, а також наявністю додаткового передекспоненційного множника) і складніші від останніх, їх застосування до конкретних задач не зустрічає труднощів, оскільки всі величини в функціях F і G виражаються в квадратурах.

У наступному підрозділі проілюструємо застосування отриманих формул до задачі про квазістаціонарні рівні електрона.

3.4. Квазікласична теорія квазістаціонарних станів

При визначенні квазістаціонарних станів зазвичай вимагають, щоб розв'язок рівняння Дірака на нескінченності являв собою розбіжну хвилю; це відповідає частинці, яка вилітає із системи при її розпаді [1, 83]. Умова відсутності збіжної компоненти в асимптотичному виразі для хвильової функції відбирає комплексні власні значення для енергії:

$$E_{njlm} = E - i \frac{\Gamma}{2}, \quad (3.28)$$

де E визначає положення рівня, що відповідає квазістаціонарному стану, а Γ характеризує його ширину. Величина Γ – додатна, вона й характеризує ймовірність розпаду (іонізації) квазістаціонарного стану атома в одиницю часу: $W = \Gamma/\hbar$ (ми відновили тут у явному вигляді постійну Планка \hbar).

В якості застосування отриманих вище формул напишемо рівняння, що визначатимуть положення і ширину квазістаціонарних рівнів для сферичного потенціалу. Нехтуючи проникністю бар'єру в області $r_- < r < r_+$ отримаємо з (3.24) квазікласичну умову квантування:

$$\int_{r_0}^{r_-} \left(p + \frac{\aleph w}{pr} \right) dr = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

Рівняння (3.32) визначає дійсну частину E енергії рівня: $Re E_{njlm} = E$. Воно відрізняється від звичайного правила квантування Бора-Зомерфельда [1] релятивістським виразом (3.22) для імпульсу $p(r)$ і включенням поправки w , що виникає внаслідок спін-орбітальної взаємодії. Врахування цієї поправки не перевищує точності методу ВКБ. Покажемо це на прикладі кулонівського поля $V(r) = -Z/r$, де Z – заряд атомного залишку. Тоді після інтегрування умова (3.32) запишеться у вигляді

$$\pi \left[\varepsilon Z / \lambda - \gamma - \operatorname{sgn} \aleph / 2 \right] = \pi (n + 1/2), \quad (3.33)$$

з якої випливає, що

$$\varepsilon Z / \lambda - \gamma = n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, \aleph < 0, \\ 1, 2, 3, \dots, \aleph > 0, \end{cases} \quad \gamma = \left(\aleph^2 - Z^2 \alpha^2 \right)^{1/2}, \quad (3.34)$$

а вираз для енергії задається формулою

$$E = E_0 = \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n_r + \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} \right)^2} \right]^{-1/2}. \quad (3.35)$$

Добре видно, що (3.35) співпадає з формулою Дірака-Зоммерфельда [137], яка задає так звану тонку структуру рівнів енергії водневоподібного атома. Тобто, як і слід було чекати для кулонівського поля, квазікласична умова квантування (3.32) відтворює точний результат для енергії.

Перейдемо до обчислення ширини рівня $\Gamma = -2 \operatorname{Im} E_{n_j l m}$. Для цього домножимо перше рівняння системи (3.2) на G^* , а друге – на F . Додамо отримані в такий спосіб рівності і результат проінтегруємо по r в межах від 0 до ∞ . Тоді враховуючи початкові умови $F(0)=G(0)=0$ та умову нормування:

$$\int_0^{\infty} (F^2 + G^2) dr = 1 \quad (3.36)$$

і виділяючи уявну частину одержаного рівняння, приходимо в результаті до наступного виразу для Γ :

$$\Gamma = -2c \operatorname{Im} \left[G^* F \right]_{r \rightarrow \infty}. \quad (3.37)$$

Скориставшись явним виглядом (3.29) функцій F і G , зв'язком між сталими нормування в різних областях (3.30) і виразом для C_1^\pm (3.27), отримуємо ймовірність тунелювання:

$$\Gamma = \frac{1}{T} \exp \left[-2 \int_{r_-}^{r_+} \left(q - \frac{\aleph w}{qr} \right) dr \right]. \quad (3.38)$$

У нерелятивістському випадку зміст T^{-1} зрозумілий – це число ударів за одиницю часу частинки (локалізованої в ямі) об стінку потенціального бар'єру при $r = r_-$, а експонента відповідає ймовірності просочитися крізь бар'єр при кожному ударі. Врахування релятивізму і спіну електрона $s=1/2$ змінює вираз для періоду коливальних і дає у (3.38) додатковий множник, що залежить, зокрема, і від знаку \aleph .

3.5. Сферична модель ефекту Штарка в атомі водню

Розглянемо потенціал:

$$V(r) = -\frac{Z}{r} - Fr, \quad (3.39)$$

де F – напруженість електричного поля.

При $F > 0$ цей потенціал є сферичною моделлю ефекту Штарка. А при заміні $F \rightarrow -F$ потенціал (3.39) переходить у запираючий потенціал, що має тільки дискретний спектр і служить моделлю кваркового конфайменту.

Відмітимо також, що рівняння Дірака з потенціалом (3.39) при $F > 0$ може служити еталонним рівнянням для релятивістської теорії квазістаціонарних станів квантових об'єктів. Такі стани вводяться, як відомо, по аналогії із звичайними стаціонарними станами дискретної частини спектра власних значень гамільтоніана (див. підрозділ 3.1).

Застосуємо отримані вище квазікласичні формули для визначення положення та ширини квазістаціонарних рівнів у випадку потенціалу (3.39). Для малої напруженості поля F існує область відстаней від

водневоподібного іона, що набагато більше його розміру ($r \gg 2Z/\lambda^2$) і набагато менше значення F^{-1} . Тобто в цій області можна знехтувати проникністю потенціального бар'єра $r_- < r_1 < r_+$ і нормувати хвильову функцію на електрон, локалізований у широкій потенціальній ямі $r_0 < r < r_+$ багатозарядного іона (див. формулу (3.27)).

Для знаходження аналітичного вигляду сталої C_1^\pm необхідно розв'язати рівняння $p = 0$ (див. (3.25)). Враховуючи, що полем F в околі ядра можна знехтувати, відповідні точки повороту запишуться так:

$$r_0 \approx r_1^{(0)} = \frac{\epsilon Z - \nu}{\lambda^2}, \quad r_- \approx r_2^{(0)} = \frac{\epsilon Z + \nu}{\lambda^2}, \quad \nu = \sqrt{(\epsilon Z)^2 - (\lambda \gamma)^2}. \quad (3.40)$$

Враховуючи (3.37) і обчислюючи інтеграл у (3.36) приходимо до наступної формули для константи нормування:

$$\left(C_1^\pm\right)^2 = \frac{\lambda^3}{\pi Z}. \quad (3.41)$$

Зауважимо, що вираз $|C_1^\pm| = \pi^{-1/2} Z N^{-3/2}$ (де $N = Z/\lambda$) є релятивістським аналогом відповідної нерелятивістської формули для нормувальної сталої:

$$|a| = \pi^{-1/2} Z n^{-3/2},$$

де n – головне квантове число в задачі про атом водню для рівняння Шредінгера.

Існують і інші методи знаходження сталої C_1^\pm , наприклад, шляхом зшивання отриманого нами розв'язку з асимптотикою (1.39) розв'язків

системи Дірака для нормованих радіальних функцій F і G в кулонівському полі при $r \rightarrow \infty$.

Порівнявши асимптотичний вираз (2.39) із квазікласичними формулами (3.25), (3.27) в області зшивки $2Z/\lambda^2 \ll r \ll F^{-1}$, а також враховуючи співвідношення (3.30) між сталими в різних областях, знайдемо зв'язок між постійними C_1^\pm і A_{ac} (A_{ac} дорівнює коефіцієнтові A_1 з формули (2.39б), в якій у всіх величинах опущено індекс 1):

$$C_1^\pm = 2A_{ac} \lambda^{1/2} \left(\frac{\nu}{2\lambda^2 e} \right)^{\frac{\varepsilon Z}{\lambda}} \left(\frac{Z + \varkappa \lambda}{Z - \varkappa \lambda} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\varepsilon Z + \lambda \gamma}{\varepsilon Z - \lambda \gamma} \right)^{\frac{\gamma}{2}}, \quad e = 2.718... \quad (3.43)$$

Результати (3.41) і (3.43) відрізняються в межах похибки між формулою Стірлінга і $n!$.

Як видно з (3.31), (3.37), (3.43) ширина атомного рівня пропорційна $|A_{ac}|^2$. Це й не дивно, оскільки при $F \ll 1$ іонізація йде з “хвоста” атомної хвильової функції ψ , а бар'єр є широким.

Обчислимо положення квазістаціонарного рівня з точністю до $\mathcal{O}(F^2)$. Для цього точки повороту (3.40) потрібно визначити точніше, а також знайти інші два розв'язки рівняння $p = 0$:

$$r_{1,2} = r_{1,2}^{(0)} \left[1 + \frac{r_{1,2}^{(0)} F}{\lambda^2} \left(\varepsilon \mp \frac{Z}{\nu} \right) \right], \quad r_{3,4} = \frac{\mp c^2 - E}{F} + \frac{Z}{E \pm c^2}, \quad (3.44)$$

де $r_0 = r_1, r_- = r_2, r_+ = r_4$.

Положення ближніх (“атомних”) точок повороту $r_{1,2}$ від поля F залежить слабо і визначається в основному кулонівським полем ядра. Дальні від атома точки повороту $r_{3,4}$ залежать більше від поля, але їх

значення “підправляється” на величину $\frac{Z}{E \pm c^2} \sim 1$, обумовлену кулонівською далекодією. При виконанні умови $F \ll 1$ (границя слабкого поля) виконуються також умови $\{r_3, r_4\} \gg \{r_1, r_2\}$. Це дозволяє в області $r_1 \leq r \leq r_2$ розкласти квазіімпульс p за додатними степенями напруженості поля:

$$\begin{aligned} p(r) &= \alpha F \frac{\sqrt{(r-r_1)(r-r_2)(r-r_3)(r-r_4)}}{r} \approx \\ &\approx \alpha F \sqrt{-r_3 r_4} \frac{\sqrt{(r-r_1)(r_2-r)}}{r} \left[1 - \frac{r_3+r_4}{2r_3 r_4} r \right]. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Враховуючи (3.44), (3.45) і обчислюючи всі інтеграли в (3.32), отримуємо:

$$E = E_0 + \frac{F}{2Z} \left[\aleph - \varepsilon_0 \left(\frac{3Z^2}{\lambda_0^2} - \aleph^2 \right) \right], \quad (3.46)$$

де $\lambda_0 = c\sqrt{1-\varepsilon_0^2}$, $\varepsilon_0 = E_0/c^2$, а E_0 визначається формулою (3.35).

Зауважимо, що для визначення ε при $F \ll 1$ можна також скористатися методом теорії збурень, яка, на відміну від квазікласики, не має обмежень на квантові числа. Розрахунки дають той самий результат (3.46).

Для того, щоб оцінити вклад релятивістських ефектів в положення квазістаціонарного рівня, на рис. 3.2 зображено відношення

$$Q(Z) = E_{bin} / E_{bin}^{(n)}$$

між релятивістським $E_{bin} = (E^2 - c^2)^4 / (2c^2)$ (див. (3.47))

і нерелятивістським

$$E_{bin}^n = -\frac{Z^2}{2n^2} + \frac{F}{4Z}(\aleph^2 + \aleph - 3n^2) \quad (3.47)$$

виразами для енергії для поля напруженістю $F = 0.003$ (оскільки відношення $Q3$ слабо залежить від F , то тут досліджується тільки залежність від Z). Видно, що із зростанням заряду ядра Z роль релятивістських ефектів зростає.

Обчислимо за допомогою формули (3.38) ширину Γ . Запишемо величину q , що входить в підінтегральний вираз у вигляді:

$$q(r) = \alpha F \frac{\sqrt{(r-r_1)(r-r_2)(r-r_3)(r_4-r)}}{r}. \quad (3.48)$$

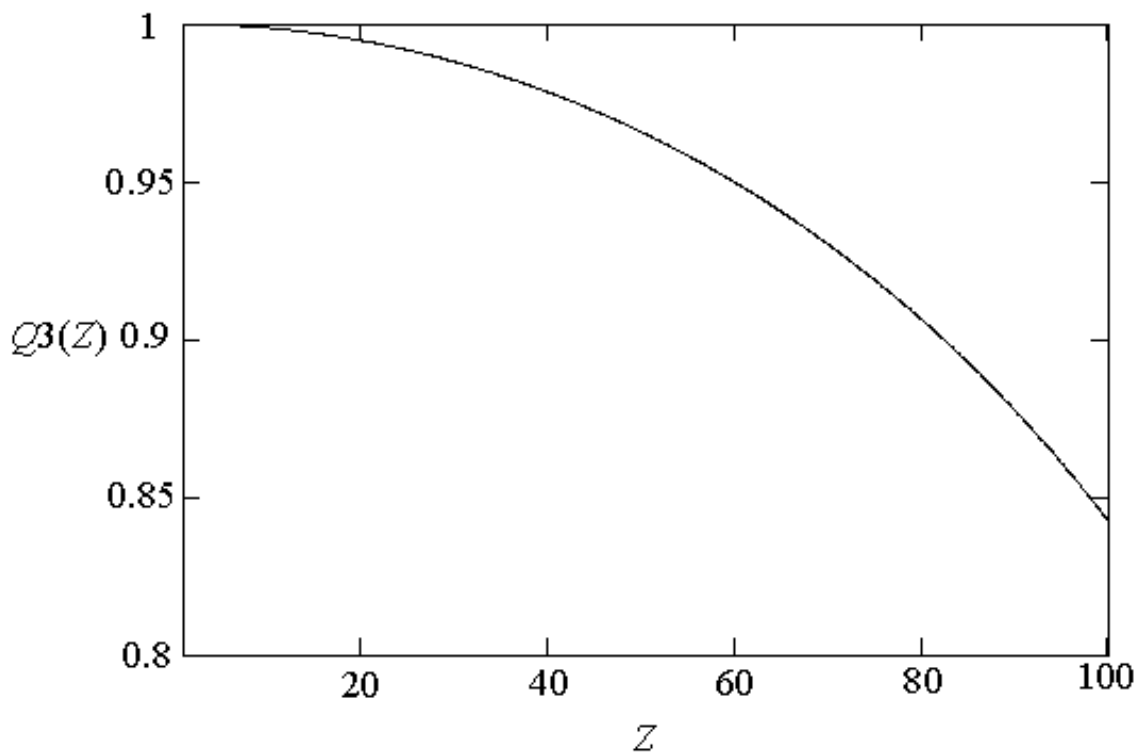


Рис. 3.2. Відносний вклад $Q3(Z) = E_{bin} / E_{bin}^{(n)}$ релятивістських ефектів в положення рівня для стану $2S_{1/2}$.

Так само, як і квазіімпульс p , розкладемо її за додатними степенями напруженості поля. Практично розклад здійснюється наступним чином. Розбиваємо область інтегрування $r_2 \ll r \ll r_4$ на дві області, вводячи точку $r'_0 \sim F^{-1/2}$, що задовольняє умову: $r_2 \ll r'_0 \ll r_4$.

У першій з цих областей ($r_2 \leq r \leq r'_0$) переважає кулонівська взаємодія, а взаємодію електрона з електричним полем можна розглядати як збурення. Розкладаючи величину $q(r)$ в цій області по малому параметру – збуренню, отримаємо для неї асимптотичне представлення:

$$q(r) \approx \alpha F \sqrt{-r_3 r_4} \frac{\sqrt{(r-r_1)(r-r_2)}}{r} \left[1 - \frac{r_3 + r_4}{2r_3 r_4} r \right]. \quad (3.49)$$

В області $r'_0 \leq r \leq r_4$ – навпаки, домінуючим є потенціал електричного поля, а кулонівське поле ядра можна розглядати як збурення:

$$q(r) \approx \alpha F \sqrt{(r-r_3)(r_4-r)} \left[1 - \frac{r_1 + r_2}{2r} \right]. \quad (3.50)$$

Обчислюючи ряд табличних інтегралів у (3.38) та враховуючи (3.43), отримуємо:

$$\Gamma = 2\lambda_0 |A_{ac}|^2 \left(\frac{2\lambda_0^2}{F} \right)^{\frac{2\varepsilon_0 Z}{\lambda_0}} \exp \left[-\frac{\Phi(\varepsilon_0)}{\alpha^3 F} + 2Z\alpha \arccos \varepsilon_0 \right], \quad (3.51)$$

$$\Phi(\varepsilon_0) = \arccos \varepsilon_0 - \varepsilon_0 \sqrt{1 - \varepsilon_0^2}. \quad (3.52)$$

Розглянемо деякі граничні випадки отриманого виразу:

А) Почнемо з іонізації s-рівня, зв'язаного короткодіючими силами ($Z = 0$). В цьому випадку формула (3.51) зображатиметься у вигляді:

$$\Gamma = 2\lambda_0 |A_{ac}|^2 \exp\left(-\frac{\Phi(\varepsilon_0)}{\alpha^3 F}\right), \quad (3.53)$$

що з точністю до передекспоненційного множника збігається з результатами робіт [97, 98], для штарківської іонізації s-рівня від'ємних іонів (типу H, Na⁻ і т.д.).

Б) При наявності кулонівського поля доцільно розглянути різні граничні випадки для величин, що фігурують у формулі (3.51):

$$\arccos \varepsilon_0 = \begin{cases} (1 - \varepsilon_0^2)^{1/2} + \frac{(1 - \varepsilon_0^2)^{3/2}}{6} + \dots, & \varepsilon_0 \rightarrow 1, \\ \frac{\pi}{2} - \varepsilon_0 - \frac{\varepsilon_0^3}{6} + \dots, & \varepsilon_0 \rightarrow 0, \\ \pi - (1 - \varepsilon_0^2)^{1/2} - \frac{(1 - \varepsilon_0^2)^{3/2}}{6} + \dots, & \varepsilon_0 \rightarrow -1. \end{cases} \quad (3.54)$$

$$\Phi(\varepsilon_0) = \begin{cases} \frac{2^{5/2}}{3} (1 - \varepsilon_0)^{3/2} \left[1 - \frac{3}{20} (1 - \varepsilon_0) + \dots \right], & \varepsilon_0 \rightarrow 1, \\ \frac{\pi}{2} - 2\varepsilon_0 + \frac{1}{3} \varepsilon_0^3 + \dots, & \varepsilon_0 \rightarrow 0, \\ \pi - \frac{2^{5/2}}{3} (1 + \varepsilon_0)^{3/2} + \dots, & \varepsilon_0 \rightarrow -1. \end{cases} \quad (3.55)$$

У нерелятивістській границі ($\varepsilon_0 \rightarrow 1$, $\alpha \rightarrow 0$) формула (3.51) переходить у вираз:

$$\Gamma_{\text{нер}} = 2\lambda_{\text{нер}} \cdot a_{\text{нер}}^2 \left(\frac{2\lambda_{\text{нер}}^2}{F} \right)^{2Z/\lambda_{\text{нер}}} \exp\left(-\frac{2\lambda_{\text{нер}}^3}{3F} \right), \quad (3.56)$$

де $\lambda_{\text{нер}} = Z/n$, n – головне квантове число. З метою оцінки вкладу релятивістських ефектів у величину Γ на рис. 3.3 побудовано відношення $Q4(Z, F) = \Gamma/\Gamma_{\text{нер}}$ для стану $2S_{1/2}$. З рисунка видно, що із збільшенням заряду Z , а також із зменшенням напруженості електричного поля F , вплив релятивістських ефектів різко зростає.

При $\varepsilon_0 \rightarrow -1$, тобто для рівня, що опустився до межі нижнього континуума, експоненційний множник стає рівним $\exp\left(-\frac{\pi}{\alpha^3 F} \right)$, що співпадає з відповідним множником у формулі Швінгера [151] для ймовірності народження електрон-позитронних пар з вакууму в постійному електричному полі, отриманої в рамках квантової теорії поля.

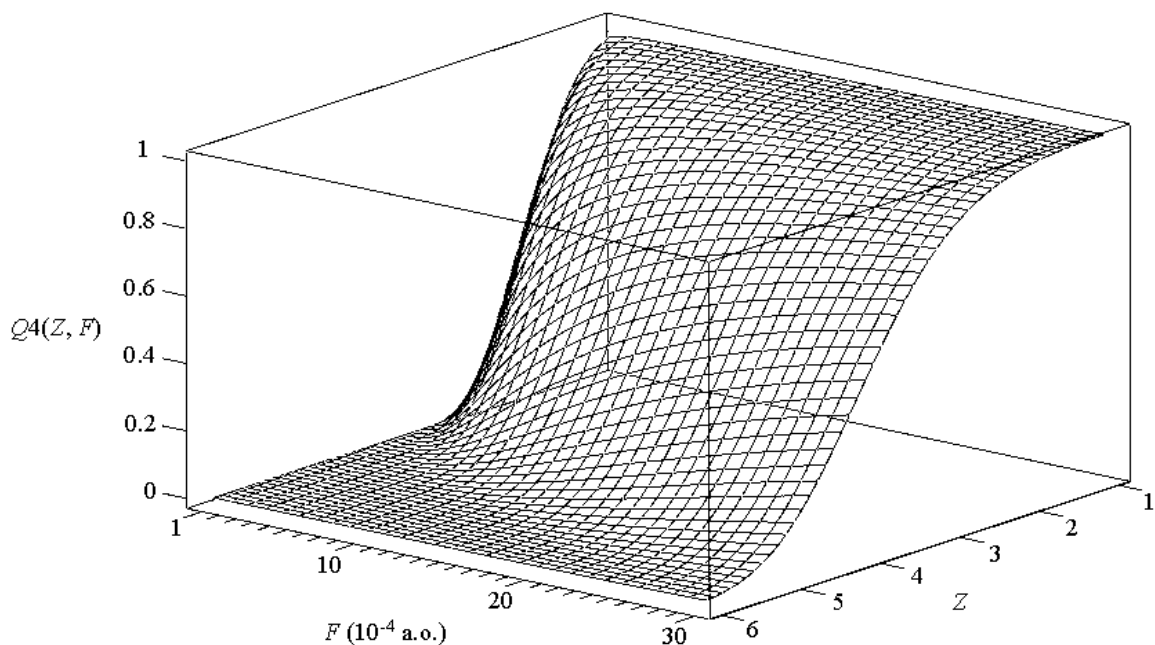


Рис. 3.3. Відносний вклад $Q4(Z, F) = \Gamma/\Gamma_{\text{нер}}$ релятивістських ефектів в ширину рівня для стану $2S_{1/2}$.

3.6. (2+1)-вимірний ефект Штарка в атомі водню

Як буде показано в розділі 4 система радіальних рівнянь Дірака в (2+1)-вимірному просторі відрізняється від аналогічної системи в (3+1)-вимірному просторі замінами $G \rightarrow -G$ та $\aleph \rightarrow -(I+1/2)$. Таким чином, вирази для положення і ширини рівня в двовимірному випадку можуть бути отримані з формул (3.47), (3.51) за допомогою заміни $\aleph \rightarrow -(I+1/2)$. Для того, щоб оцінити вплив двовимірності на величину ймовірності штарківської іонізації було побудовано відношення $Q5(\varepsilon, F) = \Gamma_{2+1}/\Gamma_{3+1}$. Оскільки залежність $\varepsilon(Z)$ є різною для (2+1)- та (3+1)-вимірної моделі, то досліджувалась залежність $\Gamma_{2+1}/\Gamma_{3+1}$ від ε , а не від Z . Діапазон енергій на рис. 3.4 $\varepsilon = 0.98 \div 0.9$ відповідає значенням зарядів $Z_{2+1} = 39 \div 68$ для двовимірної моделі та $Z_{3+1} = 53 \div 107$ для тривимірної моделі. З рисунку видно, що вплив двовимірності на ширину Γ є надзвичайно великим і зростає із зменшенням енергії E та напруженості електричного поля F .

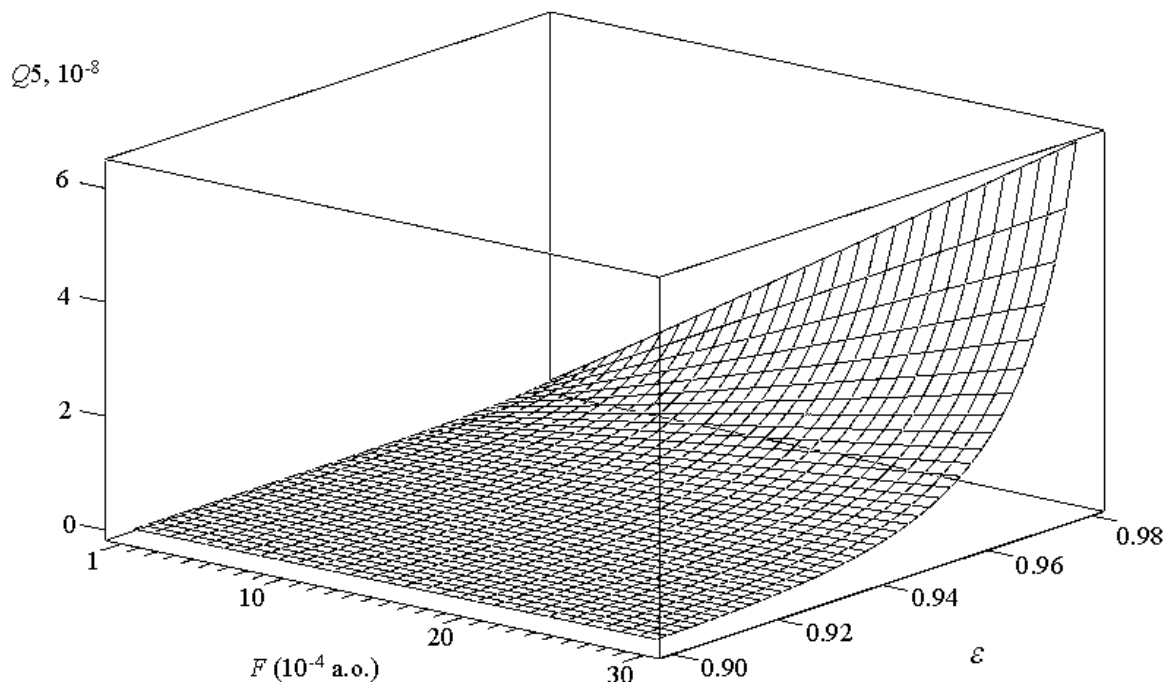


Рис. 3.4. Відношення $Q5(\varepsilon, F) = \Gamma_{2+1}/\Gamma_{3+1}$ для стану $2S_{1/2}$.

3.7. Висновки до розділу 3

В третьому розділі розвинуто послідовну схему ВКБ-наближення для (2+1)-вимірному та (3+1)-вимірному рівняння Дірака в сферично-симетричному полі. Знайдено вигляд хвильових функцій в класично дозволених та заборонених областях і отримано правила їх зшивки при переході через точки повороту. Розроблений квазікласичний підхід виявився вельми ефективним інструментом для описання релятивістської теорії квазістаціонарних станів квантових об'єктів. 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 $F \ll 1$ для положення E та ширини Γ рівнів тонкої структури двовимірному і тривимірному водневоподібного атома отримано відносно прості аналітичні формули. Одержані формули охоплюють, в якості граничних випадків, як теорію іонізації нерелятивістських зв'язаних систем (атоми, іони), так і випадок релятивістських енергій зв'язку (рівень на межі нижнього континууму $E = -mc^2$). Хоча сферична модель ефекту Штарка не враховує реальний вигляд потенціалу, вона дозволяє отримати вираз для Γ , який в граничних випадках відтворює (з експоненційною точністю) одержані в рамках інших підходів результати, а також якісно правильно описати особливості тунельної іонізації водневоподібного атома слабким електричним полем.

Досліджено в даному розділі вплив релятивістських ефектів та просторової розмірності на положення і ширину квазістаціонарних рівнів. Аналіз отриманих результатів показує, що вклад релятивістських ефектів в досліджувані величини зростає з ростом заряду ядра Z . Особливо відчутний цей вклад в ймовірність штарківської іонізації водневоподібного атома (іона) при малих значеннях напруженості електричного поля F : при

$F = 0.003$ (в атомних одиницях) вклад релятивістських ефектів складає $\sim 50\%$ вже при $Z = 4$ і з зменшенням напруженості F різко зростає. Вплив двовимірності на ширину Γ є також вельми істотним і, як показують розрахунки, зростає із зменшенням як енергії E , так і напруженості електричного поля F .

РОЗДІЛ 4

РІВНЯННЯ ДІРАКА В СИЛЬНОМУ КУЛОНІВСЬКОМУ ПОЛІ В 2+1 ВИМІРАХ

4.1. Вступні зауваження

Ще П. Еренфестом було показано (див. [152]), що узагальнення фізичних теорій на випадок просторів різних розмірностей часто приводить до нового і несподіваного погляду на сутність розглядуваної проблеми. Проте важливість цих поглядів для квантової теорії поля (КТП) у належній мірі була усвідомлена лише після того, як на межі 70-х і 80-х років у фізиці низьковимірних явищ було зроблено ряд фундаментальних відкриттів, котрі до цього часу підігривають підвищений інтерес до моделей КТП у просторах зниженої розмірності. По суті (1+1)- і (2+1)-вимірні версії квантової електродинаміки (КЕД) і квантової хромодинаміки (КХД) стали свого роду “полігонами” для перевірки різних теоретичних гіпотез і часом для пошуку та розробки вельми нетривіальних математичних підходів, що переносяться згодом на реальний чотиривимірний випадок. (Певний підсумок подібним дослідженням до 1987 року підведено в монографії [153]). Не будучи повноцінно реалістичними для квантовопольових задач, ці формальні моделі малорозмірних теорій виявились доволі ефективними (в якості технічних засобів, а не тільки на рівні інтерпретації) при вивченні ряду квазіодновимірних і квазідвовимірних середовищ. Так, наприклад, в 1979 р. з’явилась робота Су, Шріффера і Хігера [154], в якій досліджувалися лінійні полімери. Як виявилось, континуальна модель поліацетилена і деяких подібних йому речовин (пайерлсівських

діелектриків) в основних рисах збігається з уже вивченими раніше (1+1)-вимірними моделями КТП. Таким чином, експерименти [154], які проводяться з лінійними полімерами – це, по суті, експерименти, що опосередковано підтверджують незвичні передбачення одновимірних польових моделей. Невдовзі належне місце в теорії планарних структур [155] і, в першу чергу, в теорії надзвичайно цікавої сукупності низькорозмірних ефектів під загальною назвою “квантовий холл-ефект” [156] зайняли і (2+1)-вимірні моделі КТП. Початок цим дослідженням було покладено в 1980 році у відомій праці фон Клітцинга, Дорди і Пеппера [157], після появи якої виник “бум”, що легко пояснюється красою і фундаментальністю спостережуваних закономірностей. Дійсно, відкритий в [157] цілочисельний квантовий холл-ефект може бути пояснений у рамках одночастинкової моделі двовимірних електронів (2d-електронів), які взаємодіють із зовнішнім електромагнітним полем [158]. Холлівський опір виявився при цьому квантованим, що стало вкрай незвичним результатом для, здавалося б, вже добре вивченого явища.

Таким чином, малорозмірні версії КТП займають вельми своєрідне положення серед фізичних теорій. З одного боку, вони прояснюють логічні основи фізики низькотемпературних явищ, розширяючи наші уявлення щодо властивостей квазіодновимірних та квазідвовимірних середовищ, і тим самим представляють прямий інтерес для цієї цілком нової та далекої від КТП області дослідження. З іншого боку, шляхом пошуку і дослідження властивостей нових фундаментальних структур вони відкривають подальші перспективи розвитку і для фізики елементарних частинок. Так, в непарновимірних калібрувальних теоріях (одна часова координата і парна кількість просторових координат) є можливість ввести в лагранжіан так званий черн-саймонівський топологічний член, який відповідає за генерацію маси калібрувального поля. Піонерською з масивних калібрувальних полів в (2+1)-вимірному просторі-часі була

опублікована в 1982 р. праця Дезера, Джаківа і Темплтона [159], а також роком раніше видана стаття [160]. Подальший структурний аналіз (див., наприклад, [161, 162] і цитовану там літературу) виявив у таких теоріях низку цікавих рис, що роблять їх вельми привабливими з огляду на їх зв'язок з топологічними властивостями (3+1)-вимірної КТП. Звідси випливає і зворотній вплив топологічних структур (2+1)-вимірних калібрувальних масивних теорій на формування фізичних представлень квантової теорії поля в реальному чотиривимірному просторі-часі, де останнім часом обговорюється можливість виникнення структур, подібних до черн-саймонівського члена.

Звичайно, перерахованими вище прикладами не вичерпується все коло застосувань малорозмірних польових моделей. Ряд нетривіальних ефектів, експериментально виявлених у фізиці конденсованих середовищ, вказує на існування квантових систем ферміонів із спектром енергій, що визначається гамільтоніаном рівняння Дірака в 2+1 вимірах [57, 163, 164]. Наприклад, вироджений плоский напівпровідник з низькоенергетичною динамікою електронів можна добре описати за допомогою (2+1)-вимірної теорії релятивістського електрона [57]. Інший приклад, наведений в монографії [164], пов'язаний з поведінкою електронів в надсильному однорідному магнітному полі напруженості $B > B_{cr} \equiv m^2/|e|$. Область руху електрона у перпендикулярній до такого поля площині має лінійний розмір порядку так званої “магнітної довжини” $a = \sqrt{2/|eB|}$, що значно менше комптонівської довжини хвилі електрона [164]. Таке “виморожування” двох просторових степенів вільності дозволяє звести низку задач КЕД₃₊₁ до задач КЕД₁₊₁.

Властивості квантових (2+1)-вимірних систем ферміонів викликають і чисто теоретичний інтерес з огляду на їх причетність до широкого кола фізичних проблем КТП, таких, зокрема, як порушення парності, теорія

Черна-Саймонса, теорія аніонів – частинок, що підкоряються дробовій статистиці, порушення симетрії ароматів (див. про це більш докладно в [165]).

На даний час у зв'язку з розширенням експериментальних можливостей поновився інтерес до процесів утворення пар сильними полями, основні стани яких характеризуються так званим зарядженим вакуумом. Такі стани виникають, коли одна з частинок народженої полем пари виявляється сильно зв'язаною полем, а її античастинка йде на нескінченність [22, 27, 28, 74, 109, 166, 167]. В зв'язку з великим числом праць з даної проблематики тут наведено лише основні посилання. Більш детальні вказівки на бібліографію подано в оглядах [27, 73] та в підрозділі 1.3 даної дисертаційної роботи.

Ефект спонтанного народження позитронів кулонівським полем надважкого ядра, передбачений для (3+1)-вимірному випадку в праці [74], при зниженні розмірності простору набуває ряд привабливих особливостей. Серед них особливої уваги заслуговує та обставина, що величина критичного заряду Z_{cr} (при якому основний рівень енергії електрона опускається до межі нижнього континуума) в 2+1 вимірах істотно менше його значення для тієї ж моделі (розподілу електричного заряду всередині ядра) в 3+1 вимірах. Відмічений факт був виявлений в праці [60], в якій обговорювалися точні розв'язки рівняння Дірака і ефект народження пар заряджених ферміонів з вакууму сильним кулонівським полем протяжного джерела в двох просторових вимірах. Однак, властивості станів дискретного спектра при $137 < 2Z < 2Z_{cr}$ залишилися при цьому не вивченими. Крім того, внаслідок нетривіальності обчислень випало з розгляду і важливе питання про квазістаціонарні стани, що лежать в нижньому (від'ємному) континуумі розв'язків рівняння Дірака.

Метою даного розділу є дослідження невивчених раніше принципових аспектів релятивістської двовимірної кулонівської задачі. Зокрема,

розглядаються наступні питання: визначення величини критичного заряду ядра Z_{cr} ; дискретний спектр рівняння Дірака при $137 < 2Z < 2Z_{cr}$; ефективний розмір зв'язаного стану при $2Z > 137$; спектр квазістаціонарних рівнів (їх положення і ширина) в нижньому діраківському континуумі; обчислення ймовірності спонтанного народження позитронів кулонівським полем ядра з зарядом $Z > Z_{cr}$ в 2+1 вимірах.

Зупинимося коротко на методах розв'язання окреслених вище задач. Дослідження релятивістської двовимірної кулонівської задачі у всій області значень Z і ε (від $Z=0$, $\varepsilon=1$ і до $Z=Z_{cr}$, $\varepsilon=-1$; $\varepsilon = E/mc^2$ – енергія рівня в одиницях mc^2) ми будемо проводити методом точних розв'язків рівняння Дірака. Вважається [22, 27, 28, 74, 109, 166-168], що метод релятивістських хвильових рівнянь (у зовнішньому полі) добре працює в задачах КЕД, які можуть бути розв'язані в рамках одночастинкової теорії. Крім того, успішне застосування розвинутої в розділі 3 релятивістської версії методу ВКБ до сферичної моделі ефекту Штарка в двох і трьох просторових вимірах спонукало нас до використання цього ж методу аналізу і при описанні фізичних явищ в закритичній області ($Z > Z_{cr}$, $\varepsilon < -1$) в (2+1)-вимірах. Це дозволило повністю розв'язати питання про дійсну та уявну частини енергії квазістаціонарних рівнів в нижньому (від'ємному) континуумі розв'язків рівняння Дірака.

Маючи на увазі зміст даного розділу, варто нагадати, що в середині 70-х років в GSI (Дармштадт, ФРН) на прискорювачі UNILAC було розпочато програму експериментальних досліджень з перевірки фундаментальних аспектів квантової електродинаміки в області надсильних полів, джерелом яких слугують ядра важких елементів, що приймають участь у зіткненні. Огляд сучасного стану експериментів із

спостереження вузьких позитронних ліній та електрон-позитронних пар в діапазоні ефективних мас $1.6-1.8 \text{ MeV}/c^2$ при енергії зіткнення нижче кулонівського бар'єра докладно проведено в підрозділі 1.3, а тут лише зауважимо, що ні одне з багатьох запропонованих до цього часу теоретичних пояснень, починаючи від варіантів опису в рамках стандартної (3+1)-вимірної КЕД і аж до вельми екзотичних теорій, що включають гіпотетичні нові частинки і сили, нову фазу КЕД, тощо, не дало повного опису спостережуваних в GSI явищ.

В даному розділі ми не претендуємо на пояснення “дармштадтського ефекту”, а переслідуюмо більш скромну мету – на прикладі релятивістської кулонівської задачі вивчити питання про вплив двовимірності простору на властивості станів дискретного спектра в докритичній ($Z < Z_{cr}$) і квазістаціонарних станів в закритичній ($Z > Z_{cr}$) областях. За відсутності адекватного опису спостережуваних в GSI явищ було б необачним нехтувати новими можливостями, які відкриваються на шляху дослідження (2+1)-вимірних теорій. Отримувані при цьому висновки можуть виявитися корисними і повчальними при співставленні їх з загальними висновками відомої (3+1)-вимірної теорії спонтанного народження позитронів [22, 27-29, 74, 109, 166, 167].

4.2. Точний розв'язок рівняння Дірака для кулонівського поля точкового ядра в 2+1 вимірах

Мета даного підрозділу полягає в тому, щоб, по-перше, проілюструвати вельми істотні відмінності в спектрах енергій електрона в кулонівському полі точкового ядра в двох і трьох просторових вимірах, і, по-друге, підготувати підґрунтя для розгляду фізики явищ, що проходять в закритичній області $Z > Z_{cr}$ (тут під критичним зарядом ядра Z_{cr} мається

на увазі те значення Z , при якому рівень дискретного спектра опускається до межі нижнього континууму $\varepsilon = -1$ [18, 22, 76]).

Релятивістське хвильове рівняння електрона у заданому зовнішньому полі в 2+1 вимірах можна отримати так само, як це робиться в релятивістській (3+1)-вимірній квантовій теорії [137]. При цьому потрібно мати на увазі (див., наприклад, [58]), що в 2+1 вимірах алгебра матриць Дірака може бути виражена в термінах матриць Паулі як $\gamma^0 = \sigma^3$, $\gamma^k = i\sigma^k$. Тоді шукане рівняння Дірака для електрона заряду $-e < 0$ ($e > 0$), взаємодія якого із зовнішнім полем задовольняє принципу “мінімальності” в двох просторових вимірах, можна записати у вигляді

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_D \right) \Psi = 0, \quad (4.1)$$

де відповідний цьому рівнянню гамільтоніан

$$H_D = \vec{\alpha} \vec{p} + \beta - eA^0 I = \sigma^1 p_2 - \sigma^2 p_1 + \sigma^3 - eA^0 I, \quad (4.2)$$

а $p_\mu = i\partial_\mu + eA_\mu$ – оператор узагальненого імпульсу електрона, A_μ – вектор-потенціал зовнішнього електромагнітного поля, $\partial_\mu = \partial/\partial x^\mu$ – оператор диференціювання по координатам $x^\mu = (t, \vec{x})$. При цьому повний момент імпульсу електрона має тільки одну компоненту $J_z = L_z + S_z$, де $L_z = -i\partial/\partial\varphi$ і $S_z = \sigma^3/2$. Надалі ми не будемо вписувати явно дворядкову одиничну матрицю I , вважаючи її присутньою при величинах, які не є матрицями (як, наприклад, $-eA^0$).

Застосуємо рівняння Дірака (4.1), (4.2) до вивчення двовимірного водневоподібного іона із зарядом ядра $eZ \gg 1$. Строго кажучи, послідовна

теорія навіть таких простих релятивістських систем повинна ґрунтуватися на двочастинкових рівняннях типу Бете-Солпітера, точні розв'язки яких не вдається отримати у аналітичному вигляді. Тому як вихідне наближення при описанні іонів з одним електроном природно використовувати рівняння Дірака.

В цьому підрозділі ми розглянемо дану задачу в тому наближенні, в якому можна нехтувати розмірами та структурою ядра, і вважатимемо, що вектор-потенціал поля в декартових координатах визначається як кулонівський

$$A^0(r) = -Ze/r, \quad A^x = A^y = 0 \quad (4.3)$$

при всіх значеннях $0 \leq r < \infty$.

Враховуючи центральну симетрію потенціальної енергії електрона в полі (4.3), розв'язок рівняння Дірака (4.1), (4.2) будемо шукати в полярних координатах r, φ у мультиплікативній формі

$$\Psi(t, \vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\varepsilon t + il\varphi) \psi(r, \varphi), \quad (4.4)$$

де ε – повна енергія стаціонарного стану, яка включає і енергію спокою mc^2 , l – ціле число, а $\psi(r, \varphi)$ – двокомпонентний вектор-стовпець (спіно́р):

$$\psi(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{r}} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r)e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Зазначимо, що хвильова функція (4.4) є спільною власною функцією операторів Гамільтона H_D і повного моменту J_z , які відповідають власним значенням ε і $l+1/2$.

Підставляючи вирази (4.4) і (4.5) в рівняння (4.1) та враховуючи рівність

$$p_x \pm ip_y = -ie^{\pm i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial r} \pm \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

отримаємо наступну систему рівнянь для радіальних функцій

$$\left. \begin{aligned} \frac{dF}{dr} - \frac{l+1/2}{r} F + (\varepsilon + 1 - V(r))G &= 0 \\ \frac{dG}{dr} + \frac{l+1/2}{r} G - (\varepsilon - 1 - V(r))F &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (4.6)$$

де $V(r) = -Z\alpha/r$ – потенціальна енергія електрона в полі (4.3), а $\alpha = e^2 \approx 1/137$ – стала тонкої структури.

Знаходження точного розв'язку рівняння Дірака і можливих значень енергії $0 < \varepsilon < 1$ можна провести у повній аналогії з розрахунками, проведеними в тривимірному випадку [137], що вже було зроблено в працях [60, 134]. Але для повноти викладу ми коротко прослідкуємо схему розв'язання (деякі її елементи будуть використані нами в подальшому) і обговоримо кінцеві результати.

У відповідності з характером поведінки радіальних функцій F і G в асимптотичній області великих r і на малих відстанях ($r \rightarrow 0$) будемо шукати розв'язок системи (4.6) для кулонівського потенціалу $V(r) = -Z\alpha/r$ у вигляді

$$\begin{aligned} F &= \sqrt{1+\varepsilon} e^{-\rho/2} \rho^\gamma (Q_1 + Q_2), \\ G &= \sqrt{1-\varepsilon} e^{-\rho/2} \rho^\gamma (Q_1 - Q_2), \end{aligned} \quad (4.7)$$

де введено позначення

$$\rho = 2\lambda r, \quad \lambda = \sqrt{1-\varepsilon^2}, \quad \gamma = \sqrt{(l+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}.$$

Розв'язок системи (4.6), скінчений при $\rho \rightarrow 0$, виражається через вироджені гіпергеометричні функції $F(a; b; z)$ зображеннями (4.7) і наступними рівностями:

$$Q_1 = AF(-n_r, 2\gamma+1; \rho), \quad Q_2 = BF(-n_r+1, 2\gamma+1; \rho). \quad (4.8)$$

Поклавши в будь-якому з рівнянь для функцій $Q_1(\rho)$ та $Q_2(\rho)$ $\rho=0$, знайдемо зв'язок між сталими A і B :

$$B = \frac{\gamma - \varepsilon Z\alpha/\lambda}{l+1/2 + Z\alpha/\lambda} A.$$

З умови обмеженості функцій $Q_1(\rho)$ та $Q_2(\rho)$ на нескінченності (при $\rho \rightarrow \infty$) випливає, що аргумент $\gamma - \varepsilon Z\alpha/\lambda$ повинен бути від'ємним цілим числом чи нулем, тобто

$$\gamma - \varepsilon Z\alpha/\lambda = -n_r, \quad (4.9)$$

причому $n_r = 0, 1, 2, \dots$ при $l \geq 0$ і $n_r = 1, 2, 3, \dots$ при $l < 0$.

Для зв'язаних станів ($\varepsilon < 1$) хвильова функція $\Psi(t, \vec{x})$ повинна бути нормована умовою $\int |\Psi|^2 d^3x = 1$; звідси випливає умова нормування для радіальних функцій $F(r)$ і $G(r)$:

$$\int_0^{\infty} (F^2 + G^2) dr = 1.$$

Виконавши інтегрування, отримуємо з точністю до фазового множника формулу для спільної сталої нормування A :

$$A = \frac{1}{\Gamma(2\gamma + 1)} \left\{ \frac{\lambda [Z\alpha + \lambda(I + 1/2)] \Gamma(2\gamma + n_r + 1)}{2Z\alpha \cdot n_r!} \right\}^{1/2}.$$

Зібравши разом отримані формули, випишемо кінцеві вирази для нормованих радіальних хвильових функцій:

$$\left. \begin{aligned} F(r) \\ G(r) \end{aligned} \right\} = \frac{1}{\Gamma(2\gamma + 1)} \left[\frac{2\lambda(1 \pm \varepsilon) \Gamma(2\gamma + n_r + 1)}{4Z\alpha/\lambda (Z\alpha/\lambda + I + 1/2) n_r!} \right]^{1/2} (2\lambda r)^\gamma e^{-\lambda r} \times \\ \times \left\{ \left(\frac{Z\alpha}{\lambda} + I + \frac{1}{2} \right) F \left(-n_r, 2\gamma + 1; 2\lambda r \right) \mp n_r F \left(1 - n_r, 2\gamma + 1; 2\lambda r \right) \right\} \quad (4.10)$$

(верхні знаки відповідають F , нижні – G).

Розв'язуючи рівняння (4.9) відносно ε , знаходимо наступний вираз для дискретних рівнів енергії [60]:

$$\varepsilon = \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(n_r + \sqrt{(l+1/2)^2 - (Z\alpha)^2} \right)^2} \right]^{-1/2}. \quad (4.11)$$

Формула (4.11) задає так звану тонку структуру рівнів енергії двомірного водневоподібного атома і в цьому сенсі є узагальненням відомої формули Дірака-Зоммерфельда [137] на випадок (2+1)-вимірної релятивістської квантової теорії.

Для класифікації станів релятивістського двовимірного водневоподібного атома, за аналогією з (3+1)-вимірним випадком, уведемо головне квантове число $n = n_r + j + 1/2$; квантовому числу j тут відповідає величина $|l + 1/2|$. Таким чином, квантовий стан частинки в розглядуваному випадку доцільно позначати символом “ $n|l_j$ ”. Отже, як і в тривимірному атомі водню, тут можливі стани

$$\begin{aligned} &1s_{1/2}; \\ &\overbrace{2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}}; \\ &\overbrace{3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{3/2}} , \overbrace{3d_{5/2}} \text{ і т. д.} \end{aligned}$$

Згідно виразу (4.11), виділені дужками стани з однаковими j мають однакову енергію, тобто є виродженими.

Спектр енергій (4.11) схожий на спектр безспінової зарядженої частинки в кулонівському полі в трьох просторових вимірах [137]. Це означає, що в (2+1)-вимірній квантовій теорії електрон фактично поводитья як безспіновий ферміон. Проте між спектрами справжнього

бозона і безспінового електрона є істотна відмінність. Зокрема, енергія електрона в основному стані ($l = n_r = 0$) дорівнює

$$\varepsilon_0 = \sqrt{1 - (2Z\alpha)^2}. \quad (4.12)$$

Як видно з (4.12), із зростанням Z енергія нижнього рівня $\varepsilon_0(Z)$ зменшується і обертається в нуль при $Z\alpha = 1/2$, тоді як в тривимірному випадку енергія ферміона $\varepsilon_0 = 0$ при $Z\alpha = 1$, а енергія безспінової зарядженої частинки на найнижчому рівні при $Z\alpha = 1/2$ дорівнює $1/\sqrt{2}$.

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 джерела втрачає зміст, коли $\varepsilon_0(Z)$ обертається в нуль. Продовження формули (4.12) на область $2Z > 137$ привело б до комплексних значень енергії ε , що відповідає падінню на центр. Поява цієї трудності пов'язана з ідеалізацією задачі, а саме, з нехтуванням скінчених розмірів ядра. При малих Z ядро можна вважати точковим, тобто врахування його радіуса r_N дає дуже малі (як буде показано пізніше) поправки до енергії рівнів. Однак, коли $2Z$ прямує до 137, ситуація змінюється.

Врахування скінчених розмірів ядра знімає відмічену вище аномалію. Першими це помітили Померанчук і Смородінський [74] в 1945 р. Увівши в розгляд скінчений радіус ядра r_N , ці автори показали, що в (3+1)-вимірному випадку розв'язок рівняння Дірака для обрізаного (на малих відстанях) кулонівського потенціалу існує у всій області від $Z = 0$, $\varepsilon = 1$ до $Z = Z_{cr}(r_N)$, $\varepsilon = -1$, і оцінили величину критичного заряду $Z_{cr}(r_N)$. Причому виявилось, що зі зростанням Z в області $Z > 137$ рівні енергії стають від'ємними і продовжують опускатися аж до межі нижнього

континуума $\varepsilon = -1$. Аналогічна поведінка рівнів енергії електрона (це ми покажемо в наступному підрозділі) спостерігається і в розглядуваному тут (2+1)-вимірному випадку при $2Z > 137$, однак перетин межі нижнього континуума $\varepsilon = -1$ відбувається при значно менших значеннях Z_{cr} [60]. Подальше обговорення питань, пов'язаних з рухом рівнів поблизу $\varepsilon = -1$ і в області $\varepsilon < -1$, а також розгляд методів визначення величини критичного заряду Z_{cr} в (2+1)-вимірному випадку, ми відкладемо до наступних підрозділів.

До цих пір розглядувався тільки випадок дискретного спектра. Хвильові функції неперервного спектра в кулонівському полі точкового заряду в 2+1 вимірах отримуються з функцій дискретного спектра замінами

$$\sqrt{1-\varepsilon} \rightarrow -i\sqrt{\varepsilon-1}, \quad \lambda \rightarrow -ip, \quad n_r \rightarrow \frac{iZ\alpha\varepsilon}{p}.$$

Зробивши в (4.10) вказану заміну і заново віднормувавши функції $F(r)$ і $G(r)$ за “шкалою імпульсів” (необхідні обчислення повністю аналогічні проведеним в [137]), приведемо тут тільки кінцеві вирази для радіальних хвильових функцій неперервного спектра:

$$\left. \begin{array}{l} r^{-1/2} F(r) \\ r^{-1/2} G(r) \end{array} \right\} = 2^{3/2} \sqrt{\frac{1 \pm \varepsilon}{\varepsilon}} e^{\pi\nu/2} \frac{|\Gamma(\gamma + 1 + i\nu)|}{\Gamma(2\gamma + 1)} \frac{(2pr)^\gamma}{\sqrt{r}} \times \\ \times \frac{\text{Im}}{\text{Re}} \left\{ e^{i(pr+\xi)} F\left(\gamma - i\nu, 2\gamma + 1; 2ipr\right) \right\}, \quad (4.13)$$

де введено наступні позначення:

$$\nu = \frac{Z\alpha\varepsilon}{p}, \quad e^{-2i\xi} = -\frac{\gamma - i\nu}{1 + 1/2 + i\nu/\varepsilon}$$

(величина ξ дійсна, оскільки $\gamma^2 + (Z\alpha\varepsilon/p)^2 = (1 + 1/2)^2 + (Z\alpha)^2$).

Перейдемо тепер до розгляду ефектів, пов'язаних із скінченністю розмірів ядра, яке створює кулонівський потенціал.

4.3. Дискретний спектр при $2Z > 137$

Для знаходження енергетичного спектра електрона в кулонівському полі ядра з $Z\alpha > 1/2$ в 2+1 вимірах необхідно поставити деяку граничну умову в нулі (що еквівалентно визначенню самоспряженого розширення оператора енергії [141]); лише після цього задача стає математично коректною [142, 143]. Фізично постановка граничної умови в нулі означає обрізування кулонівського потенціалу на малих відстанях, тобто врахування скінчених розмірів ядра. Розглянемо, як проявляється цей ефект в релятивістській кулонівській задачі з зарядом $Z \geq 137/2$ у випадку двох просторових вимірів.

Перейдемо до описання процедури розв'язування системи рівнянь Дірака (4.6) при $Z \geq 137/2$. Як і в підрозділі 2.7, ми використовуємо обрізаний кулонівський потенціал:

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z\alpha}{r}, & r > r_N, \\ -\frac{Z\alpha}{r_N} f\left(\frac{r}{r_N}\right), & 0 \leq r \leq r_N. \end{cases} \quad (4.14)$$

Тут $f(x)$ – функція обрізування (див. формулу (2.52) та пояснення до неї), яка враховує скінчені розміри ядра. Як і в підрозділі 2.7, обмежимося

моделлю I, в якій $f(x)=1$. Більш реалістичний вибір форми потенціалу всередині ядра зводиться в основному до зменшення на $\sim 30\%$ параметра r_N , що мало відбивається на кінцевих результатах (див., наприклад, (3+1)-вимірний випадок [22]).

Виключаючи із системи (4.6) функцію $G(r)$, отримуємо рівняння для визначення $F(r)$:

$$\frac{d^2 F(r)}{dr^2} - \frac{l^2 - 1/4}{r^2} F(r) + \left[\left(\varepsilon + \frac{Z\alpha}{r_N} \right)^2 - 1 \right] F(r) = 0, \quad r < r_N$$

(тут враховано, що $V(r) = \text{const}$ у всій внутрішній області: $0 \leq r < r_N$).

Загальний розв'язок цього рівняння має вигляд

$$F(r) = \sqrt{r} \left[A_1 J_{|l|}(kr) + B_1 N_{|l|}(kr) \right], \quad r < r_N,$$

де $J_n(x)$ і $N_n(x)$ – функції Бесселя і Неймана цілочислового порядку n , а $k = \sqrt{(\varepsilon + Z\alpha/r_N)^2 - 1}$. Виразивши $G(r)$ через $F(r)$ за допомогою (4.6) та використавши рекурентні співвідношення для функцій $J_n(x)$ і $N_n(x)$, отримаємо відповідний вираз для нижньої компоненти:

$$G(r) = \text{sgn} \left(1 + \frac{1}{2} \right) \frac{k\sqrt{r}}{\varepsilon + Z\alpha/r_N + 1} \left[A_1 J_{|l+1|}(kr) + B_1 N_{|l+1|}(kr) \right], \quad r < r_N.$$

З умови скінченності $F(r)$ при $r=0$ випливає, що $B_1=0$. Тоді кінцеві формули для радіальних функцій у внутрішній області $0 < r < r_N$ приймають (з точністю до сталої нормування) більш простий вигляд:

$$F(r) = A\sqrt{r}J_{|l|}(kr), \quad G(r) = A \operatorname{sgn}\left(l + \frac{1}{2}\right) \frac{k\sqrt{r}}{\varepsilon + Z\alpha/r_N + 1} J_{|l+1|}(kr). \quad (4.15)$$

У зовнішній області $r > r_N$ потенціал $V(r)$ збігається з кулонівським і розв'язок системи Дірака (4.6), експоненційно згасаючий на нескінченності, визначається виразами типу (4.7), а функції Q_1 та Q_2 виражаються через вироджені гіпергеометричні функції аналогічно (4.8). Однак тепер необхідно враховувати обидва знаки величини $\gamma = \sqrt{(l+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}$. Тому замість (4.8) маємо представлення

$$Q_j = C_j \Psi(\chi_j, 2\gamma + 1; \rho), \quad j=1, 2, \quad (4.16)$$

$$\chi_1 = -\varepsilon Z/\lambda + \gamma, \quad \chi_2 = \chi_1 + 1, \quad \rho = 2\lambda r, \quad (4.17)$$

де C_1 і C_2 – деякі сталі, $\Psi(a; b; z)$ – іррегулярний розв'язок виродженого гіпергеометричного рівняння; регулярний $F(a; b; z)$ розв'язок цього рівняння тут неприйнятний внаслідок його зростання на нескінченності. Підставляючи (4.7), (4.16), (4.17) в (4.6) та використовуючи рекурентні співвідношення між виродженими гіпергеометричними функціями [145], знаходимо зв'язок між сталими C_1 і C_2 :

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{Z\alpha}{\lambda} - l - \frac{1}{2}.$$

Зв'язок між сталими A і C_1 (або C_2) встановлюємо шляхом зшивання внутрішнього і зовнішнього розв'язків в точці $r = r_N$:

$$B = \frac{A}{C_1} = \frac{1}{J_{|\lambda|}(Z\alpha)} \sqrt{\frac{1+\varepsilon}{r_N}} \left[\frac{\Gamma(-2\gamma)}{\Gamma(\chi_2 - 2\gamma)} \left(\frac{C_2}{C_1} + \chi_1 - 2\gamma \right) (2\lambda r_N)^\gamma + \frac{\Gamma(2\gamma)}{\Gamma(\chi_2)} \left(\frac{C_2}{C_1} + \chi_1 \right) (2\lambda r_N)^{-\gamma} \right]. \quad (4.18)$$

Сталу C_1 знайдемо (з точністю до фазового множника) з умови нормування:

$$\int_0^\infty (F^2 + G^2) dr = 1.$$

Математичні деталі обчислення даного інтегралу наведено в Додатку, а тут випишемо тільки остаточний результат для $|C_1|$:

$$|C_1| = (B^2 I_{<}^0 + I_{>}^0)^{-1/2}, \quad (4.19)$$

в якому величини $I_{<}^0$ і $I_{>}^0$ визначаються рівностями:

$$I_{<}^0 = r_N^2 \left[J_{|\lambda|}^2(Z\alpha) - \frac{|2I+1|}{Z\alpha} J_{|\lambda|}(Z\alpha) J_{|I+1|}(Z\alpha) + J_{|I+1|}^2(Z\alpha) \right],$$

$$I_{>}^0 = \frac{2\Gamma(-2\gamma)\Gamma(2\gamma+1)}{\lambda\Gamma(\chi_2-2\gamma)\Gamma(\chi_2)} \left\{ \left(\frac{Z\alpha}{\lambda} - I - \frac{1}{2} \right) \left[\frac{Z\alpha}{\lambda} (\psi(\chi_2 - 2\gamma) - \psi(\chi_2)) - 2\varepsilon\gamma \right] - \gamma \right\}.$$

Зшивання внутрішнього та зовнішнього розв'язків на краю ядра (при $r = r_N$) дає рівняння

$$\frac{\sqrt{1-\varepsilon}}{\sqrt{1+\varepsilon}} \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1 + Q_2} \Big|_{r=r_N} = A_l, \quad (4.20)$$

яке визначає спектр рівняння Дірака в області $-1 \leq \varepsilon < 1$. Тут A_l – відношення $G/F|_{r=r_N}$ функцій (4.15), що описують електрон всередині ядра

$$A_l = \left(\frac{G(r)}{F(r)} \right)_{r=r_N-0} = \operatorname{sgn}(l+1/2) \frac{k}{\varepsilon + Z\alpha/r_N + 1} \frac{J_{|l+1/2|}(kr)}{J_{|l/2|}(kr)}. \quad (4.21)$$

За допомогою рекурентного співвідношення [145]

$$\frac{d\Psi(a, b; z)}{dz} = \frac{a}{z} [(a - b + 1)\Psi(a + 1, b; z) - \Psi(a, b; z)]$$

перетворимо рівняння (4.18) до більш компактного вигляду:

$$x \frac{d}{dx} \ln \Psi(\gamma - \varepsilon Z\alpha/\lambda, 2\gamma + 1; x) = \frac{1 - \beta A_l}{1 + \beta A_l} \left(\frac{Z\alpha}{\lambda} + l + \frac{1}{2} \right) + \frac{\varepsilon Z\alpha}{\lambda} - \gamma, \quad (4.22)$$

де $x = 2\lambda r_N$, $\beta = \sqrt{(1+\varepsilon)/(1-\varepsilon)}$.

Отримане точне рівняння (4.22) для енергії рівнів має вельми нетривіальну аналітичну структуру і для прямих розрахунків воно навряд чи придатне. Тому доцільно спробувати по можливості спростити громіздкий вираз (4.22), принаймні в деяких граничних випадках. Як впливає з розгляду значно більш повно вивченої (3+1)-вимірної релятивістської кулонівської задачі [22], спрощення можливі при використанні наближення гранично малого радіуса обрізування

кулонівського поля. Подивимось, як працює це наближення у випадку рівняння (4.22).

Оскільки радіус ядра r_N малий у порівнянні з комптонівською довжиною хвилі електрона (наприклад, для реальних ядер $r_N \approx 1.1 \cdot (2.5Z)^{1/3}$ фермі і при $Z=137$ $r_N \approx 0.02$ в одиницях $\hbar/m_e c$), то можна вважати $k \approx Z\alpha/r_N$. При цьому у виразі (4.21) зникає залежність від енергії ε і воно приймає більш просту форму

$$A_l = \operatorname{sgn}(l+1/2) \frac{J_{|l+1/2|}(Z\alpha)}{J_{|l|}(Z\alpha)}.$$

Виражаючи в (4.22) функцію $\Psi(a; b; z)$ через $F(a; b; z)$ і обмежуючись в розкладі для $F(a; b; z)$ за малим параметром z (який пропорційний r_N) тільки головним членом, одержуємо спрощене трансцендентне рівняння відносно ε :

$$\gamma \frac{D^+ + D^-}{D^+ - D^-} = B_l, \quad (4.23a)$$

$$D^\pm = x^{\pm\gamma} \frac{\Gamma(-\varepsilon Z\alpha/\lambda \pm \gamma)}{\Gamma(1 \pm 2\gamma)}, \quad B_l = \frac{l+1/2 - Z\alpha A_l + \beta[Z\alpha - (l+1/2)A_l]}{1 + \beta A_l}. \quad (4.23b)$$

Для подальшого аналізу рівняння (4.23) розіб'ємо дискретний спектр електрона на дві ділянки:

1) $Z\alpha < |l+1/2|$. У цьому випадку величина $\gamma = \sqrt{(l+1/2)^2 - (Z\alpha)^2}$ є дійсною, і рівняння (4.23) приймає вигляд:

$$\frac{\varepsilon Z\alpha}{\lambda} = n_r + \gamma + W, \quad (4.24a)$$

$$W = \frac{(-1)^{n_r}}{\pi} \arcsin \left\{ \frac{\pi(2\lambda r_N)^{2\gamma}}{2\gamma\Gamma^2(2\gamma)} \frac{\sin[\pi(\varepsilon Z\alpha/\lambda + \gamma)]}{\sin(2\pi\gamma)} \frac{\Gamma(\varepsilon Z\alpha/\lambda + \gamma + 1)}{\Gamma(\varepsilon Z\alpha/\lambda - \gamma + 1)} \frac{B_l - \gamma}{B_l + \gamma} \right\}. \quad (4.24б)$$

Легко побачити, що при $r_N \rightarrow 0$ величина $W \rightarrow 0$ і, отже, вираз (4.24а) переходить у вказаній границі в (2+1)-вимірний аналог формули Дірака-Зоммерфельда (4.11).

2) $Z\alpha \geq |l+1/2|$. Тут $\gamma = i\theta$ стає чисто уявною, а $\theta = \sqrt{(Z\alpha)^2 - (l+1/2)^2}$ – дійсна величина. Рівні енергії ε є розв'язками трансцендентного рівняння:

$$\Phi - \operatorname{arctg} \frac{B_l}{\theta} = \pi \left(n_r + \frac{\operatorname{sgn}(l+1/2)}{2} \right), \quad (4.25а)$$

$$\Phi = \operatorname{arg} \frac{\Gamma(1 + 2i\theta)}{\Gamma(-\varepsilon Z\alpha/\lambda + i\theta)} - \theta \ln(2\lambda r_N). \quad (4.25б)$$

Формули (4.23)-(4.26) описують дискретний спектр енергій діраківського електрона в області $-1 \leq \varepsilon \leq 1$. Залежність $\varepsilon(Z)$ для трьох найнижчих рівнів буде наведено на рис. 4.2.

4.4. Критичний заряд ядра. Ефективний розмір системи при $Z > 137/2$

Розглянемо розв'язки системи рівнянь Дірака (4.6) в області $\varepsilon = -1$ і визначимо відповідні значення критичного заряду Z_{cr} . Виключаючи з системи (4.6) функцію $G(r)$, отримуємо при $\varepsilon = -1$

$$\frac{d^2 F}{dr^2} - \frac{V'(r)}{V(r)} \frac{dF}{dr} + \left[\frac{l+1/2}{r} \left(\frac{V'(r)}{V(r)} - \frac{l-1/2}{r} \right) + V(r)(2 + V(r)) \right] F(r) = 0. \quad (4.26)$$

В області $r < r_N$ (для моделі I функції обрізування потенціалу (4.14)) рівняння (4.26) має скінчений при $r = 0$ розв'язок (з точністю до сталої)

$$F(r) = \sqrt{r} J_{|l|}(kr), \quad k = \sqrt{\frac{Z\alpha}{r_N} \left(\frac{Z\alpha}{r_N} - 2 \right)}. \quad (4.27)$$

В області $r > r_N$ рівняння (4.26) набуває вигляду

$$\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dF}{dr} + \left[\frac{(Z\alpha)^2 - (l+1/2)^2}{r^2} - \frac{2Z\alpha}{r} \right] F(r) = 0. \quad (4.28)$$

Розв'язок збіжний на нескінченності виражається (з точністю до константи) через функцію Макдональда уявного індексу [145]:

$$F(r) = K_{2i\theta}(\sqrt{8Z\alpha r}), \quad \theta = \sqrt{(Z\alpha)^2 - (l+1/2)^2}. \quad (4.29)$$

Розв'язок для $G(r)$ знаходяться з рівності:

$$G(r) = \frac{1}{V(r)} \left[\frac{dF}{dr} - \frac{l+1/2}{r} F \right]. \quad (4.30)$$

Легко показати, що розв'язки (4.27), (4.29), (4.30) отримуються із загальних формул (4.15)-(4.17) граничною процедурою $\varepsilon \rightarrow -1$. Для знаходження Z_{cr} необхідно зшити функції (4.27), (4.29), (4.30) в точці $r = r_N$:

$$\left(\frac{G(r)}{F(r)}\right)_{r=r_N-0} = \left(\frac{G(r)}{F(r)}\right)_{r=r_N+0}.$$

Звідси отримуємо трансцендентне рівняння, яке визначає (при фіксованому r_N) критичний заряд:

$$|\lambda| + \frac{1}{2} - \sqrt{2Z_{cr}\alpha r_N} \frac{K'_{2i\theta}(x)}{K_{2i\theta}(x)} = kr_N \frac{J_{|\lambda|+1}(kr_N)}{J_{|\lambda|}(kr_N)}, \quad (4.31)$$

де $x = \sqrt{2Z_{cr}\alpha r_N}$.

Вважаючи, що параметр r_N малий порівняно з комптонівською довжиною хвилі електрона, використаємо зображення для функції Макдональда при малих значеннях аргументу у вигляді:

$$K_\mu(z) = \frac{\pi}{2 \sin(\pi\mu)} [I_{-\mu}(z) - I_\mu(z)], \quad I_\mu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(\mu + k + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\mu+2k}.$$

Далі, після нескладних перетворень неважко отримати наступну формулу

$$K_{2i\theta}(\sqrt{8Z_{cr}\alpha r_N}) = \sqrt{\frac{2\pi\theta}{sh(2\pi\theta)}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2Z_{cr}\alpha r_N)^k}{k! \sqrt{4\theta^2(4\theta^2 + 1) \dots (4\theta^2 + k^2)}} \sin P_k(r_N),$$

$$P_k(r_N) = \arg \Gamma(k + 1 + 2i\theta) - \theta \ln(2Z_{cr}\alpha r_N).$$

З врахуванням тільки головних членів в розкладі функції Макдональда та її похідної і в наближенні $k \approx Z\alpha/r_N$ рівняння (4.33) набуває вигляду:

$$Z_{cr}\alpha \frac{J_{|l|+1}(Z_{cr}\alpha)}{J_{|l|}(Z_{cr}\alpha)} = |l| + \frac{1}{2} + \theta \operatorname{ctg} P_0(r_N)$$

або еквівалентно

$$P_0(r_N) - \operatorname{arctg} \left(\frac{|l| + \frac{1}{2} - Z_{cr}\alpha \frac{J_{|l|+1}(Z_{cr}\alpha)}{J_{|l|}(Z_{cr}\alpha)}}{\theta} \right) = \pi \left(n_r + \frac{\operatorname{sgn}(l + 1/2)}{2} \right). \quad (4.32)$$

Легко показати, що вираз (4.32) можна отримати і з формули (4.25), в якій величини Φ і B_l при $\varepsilon \rightarrow -1$ мають вигляд:

$$\Phi = \operatorname{arg} \Gamma(1 + 2i\theta) - \theta \ln(2Z\alpha r_N), \quad B_l = l + 1/2 - Z\alpha A_l.$$

Числове розв'язання рівняння (4.32), наприклад, для станів $1s_{1/2}$ та $2s_{1/2}$ дає значення критичного заряду $Z_{cr} \approx 107$ та 188 , відповідно. Нагадаємо, що в (3+1)-вимірному випадку значення Z_{cr} для аналогічної моделі значно більші [28]: для станів $1s_{1/2}$ та $2s_{1/2}$ $Z_{cr} \approx 173$ та 236 , відповідно. Це означає, що вакуум (2+1)-вимірної квантової електродинаміки в сильному кулонівському полі повинен проявляти нестійкість по відношенню до утворенню до утворення електрон-позитронних пар при суттєво менших значеннях критичного заряду, ніж в КЕД₃₊₁.

Цікавим також є питання про локалізацію електрона при $\varepsilon \rightarrow -1$ в 2+1 вимірах. В рамках стандартної (3+1)-вимірної КЕД Герштейном і Зельдовичем [22] було висунуто припущення про те, що при $Z \rightarrow Z_{cr}$ відбувається делокалізація поляризації вакууму, тобто поляризаційний заряд йде на як завгодно великі відстані від ядра. Основним аргументом

при цьому було те, що при $r \rightarrow \infty$ хвильова функція зв'язаного стану $F(r) \sim e^{-\lambda r}$, і тому при $\varepsilon \rightarrow -1$ електронна хмара, здавалося б, делокалізується. Наш аналіз показує, що це, як і в (3+1)-вимірах, не так: як видно з (4.29) $F(r) \sim \exp(-\sqrt{8Z\alpha} r)$ при $r \rightarrow \infty$ і $\varepsilon = -1$. Причиною настільки різкої відмінності в поведінці хвильової функції електрона при $\varepsilon = \pm 1$ є залежність ефективного потенціалу

$$U(r, \varepsilon) = \varepsilon V - V^2/2 + (l+1/2)^2/2r^2 \quad (4.33)$$

від знаку ε . Потенціал (4.33) в релятивістській кулонівській задачі веде себе як $-\varepsilon Z\alpha/r$ при $r \rightarrow \infty$, тобто є (при $Z\alpha > 0$) потенціалом притягання для $\varepsilon > 0$ і відштовхування для $\varepsilon < 0$ (на достатньо великих відстанях від ядра).

Якщо не враховувати цей факт, то природнім є висновок про перебудову поляризації вакууму в кулонівському полі при наближенні заряду Z до Z_{cr} , зроблений для (3+1)-вимірного випадку в праці [74]. Оскільки, однак, стан електрона при $\varepsilon \rightarrow -1$ залишається зв'язаним і не "розбухає", то відпадають і висунуті в [74] аргументи на користь делокалізації поляризації вакууму. З огляду на складність питання про розміри зв'язаного стану при $Z > 137/2$ в двовимірному випадку розглянемо його з кількісного боку. Обчислимо середній радіус системи:

$$\bar{r} = \int_0^{\infty} (F^2 + G^2) r dr. \quad (4.34)$$

Інтеграл (4.34) обчислено в Додатку (див. формули (3)-(5), (9)-(12)), і він має вигляд:

$$\bar{r} = C_1^2 (B^2 I_{<}^1 + I_{>}^1), \quad (4.35)$$

де введено позначення:

$$I_{<}^1 = \frac{r_N^3}{2} [I_{|l|} + I_{|l+1|}],$$

$$I_n = \frac{1}{(n!)^2 (n+3/2)} \left(\frac{Z\alpha}{2} \right)^{2n} {}_2F_3 \left(n + \frac{1}{2}, n + \frac{3}{2}; n+1, 2n+1, n + \frac{5}{2}; - (Z\alpha)^2 \right),$$

$$I_{>}^1 = - \frac{\Gamma(-2\gamma) \mathcal{H}(\gamma+1)}{\lambda^2 \Gamma(\chi_2 - 2\gamma) \Gamma(\chi_2)} \left(\frac{Z\alpha}{\lambda} - I - \frac{1}{2} \right) \left[\frac{4Z\alpha}{\lambda} + \frac{2\varepsilon Z\alpha/\lambda + 1}{Z\alpha/\lambda - I - 1/2} + \varepsilon \left(\frac{2\varepsilon Z\alpha}{\lambda} + 1 \right) + \frac{1}{\gamma} \left(\frac{3\varepsilon Z^2 \alpha^2}{\lambda^2} - \varepsilon \left(I + \frac{1}{2} \right)^2 + I + \frac{1}{2} \right) (\psi(\chi_2 - 2\gamma) - \psi(\chi_2)) \right],$$

а сталі B і C_1 визначаються виразами (4.18) і (4.19), відповідно.

Побудовану за формулою (4.35) залежність \bar{r} від заряду для основного стану зображено на рис. 4.1. При $Z \rightarrow Z_{cr}$, що відповідає $\varepsilon \rightarrow -1$, середній радіус залишається скінченим:

$$\bar{r} = \frac{2\theta^2 + 1/2}{5Z\alpha} \cdot \frac{3Z^2\alpha^2 + 2(I+1/2)^2 + 5(I+1/2) + 1}{4Z^2\alpha^2 + 2(I+1/2)^2 + 3(I+1/2) + 1} \quad (4.36)$$

(для основного стану маємо $Z_{cr} = 107$, $\bar{r} = 0.45$), тобто, як вже відмічалось вище, зв'язаний стан не делокалізується.

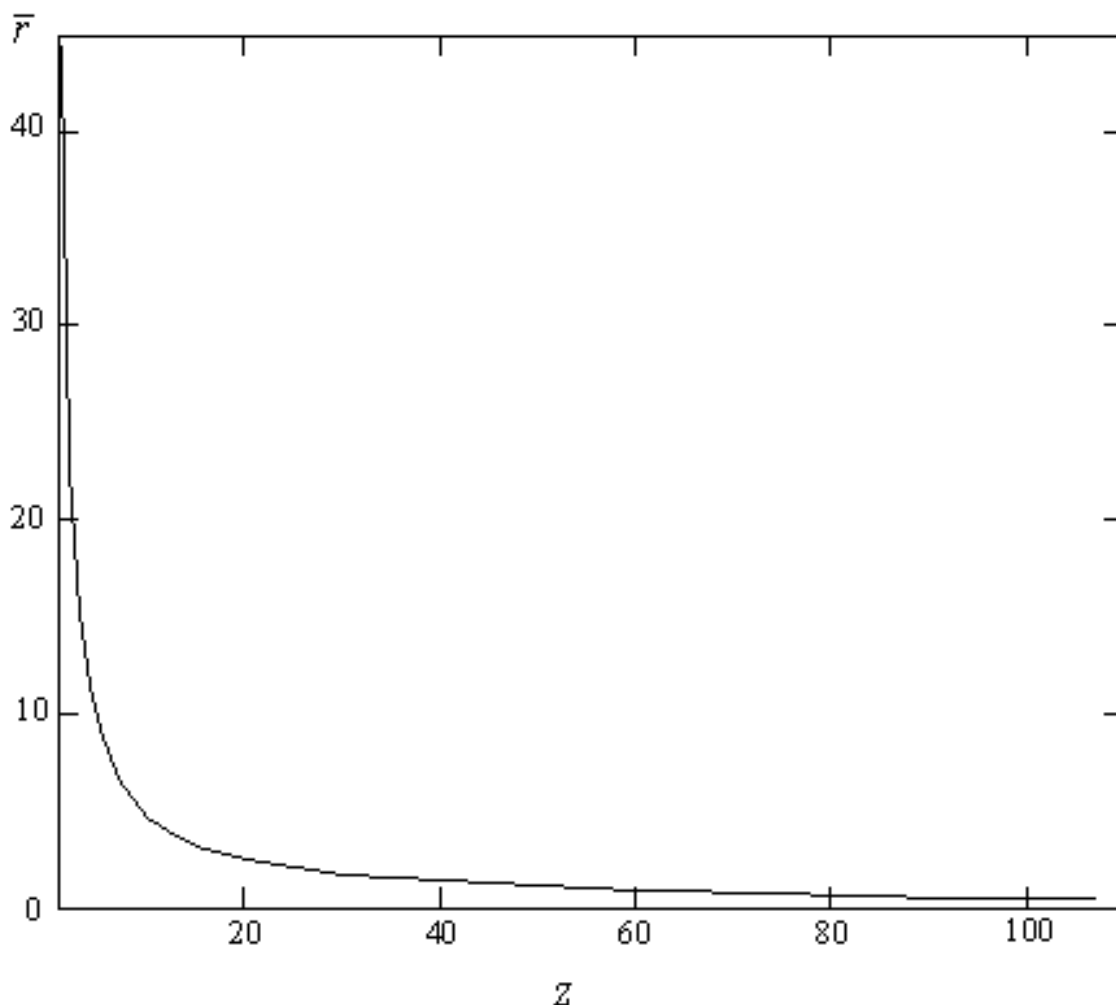


Рис. 4.1. Середній радіус основного стану як функція Z .

4.5. Метод ВКБ для двовимірного рівняння Дірака в нижньому енергетичному континуумі

Легко помітити, що система рівнянь (4.6) для радіальних хвильових функцій F і G в (2+1)-вимірному випадку відрізняється від аналогічної системи (2.2) в 3+1 вимірах замінами $G \rightarrow -G$ та $\aleph \rightarrow -(I+1/2)$. Тому для відшукування розв'язків системи рівнянь Дірака (4.6) в закритичній області $Z > Z_{cr}$ скористаємось розробленою в розділі 3 послідовною схемою отримання ВКБ-розкладів хвильової функції діраківського електрона в сильному зовнішньому полі. Не повторюючи всіх математичних викладок, коротко опишемо дану схему розв'язування.

Розклад за степенями \hbar у вихідній системі (4.6) для радіальних хвильових функцій F і G приводить до ланцюжка матричних диференціальних рівнянь, які послідовно розв'язуються за допомогою техніки лівих і правих власних векторів однорідної системи, що обчислюються в явному вигляді. Наведемо кінцеві формули для хвильової функції квазістаціонарного стану з енергією $\varepsilon < -1$ в 2+1 вимірах.

У випадку потенціалу (4.14) при $\varepsilon < -1$ ефективний потенціал (4.33) відповідає притяганню на малих відстанях від ядра $r < r_-$ (при $Z\alpha > |\aleph|$) і відштовхуванню при $r > r_+$ і має вигляд, зображений на рис. 4.2. Хвильова функція квазістаціонарного стану має різний вигляд в трьох областях: I) $r_0 < r < r_-$; II) $r_- < r < r_+$; III) $r > r_+$. Тут r_0 , r_- і r_+ – точки повороту, в яких квазікласичний імпульс

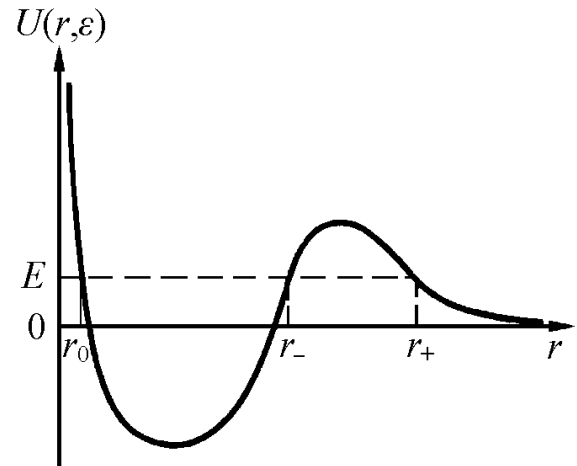


Рис. 4.2. Ефективний потенціал $U(r, \varepsilon)$ при $\varepsilon \leq -1$, $E = (\varepsilon^2 - 1)/2$ – енергія зв'язку електрона.

$$p(r) = \sqrt{(\varepsilon - V)^2 - 1 - \frac{(l + 1/2)^2}{r^2}} \quad (4.37)$$

обертається в нуль (див. рис. 4.2). При $r_0 < r < r_-$ маємо:

$$G = C_1^\pm \left(\frac{\varepsilon - V + 1}{p} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \Theta_1, \quad F = C_1^\pm \operatorname{sgn} \aleph \left(\frac{\varepsilon - V - 1}{p} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \Theta_2. \quad (4.38a)$$

$$\Theta_i = \int_{r_i}^r \left(p - \frac{(l+1/2)w_i}{pr} \right) dr + \frac{\pi}{4}, \quad (4.38б)$$

$$w_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{V'}{1+\varepsilon-V} - \frac{1}{r} \right), \quad w_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{V'}{1-\varepsilon+V} + \frac{1}{r} \right). \quad (4.38в)$$

Якщо ширина рівня $\Gamma \ll 1$ (що підтверджується відповіддю), то слід покласти:

$$\int_{r_0}^{r_+} (F^2 + G^2) dr = 1, \quad |C_1^\pm| = \left\{ \int_{r_0}^{r_+} \frac{\varepsilon - V(r)}{p(r)} dr \right\}^{-1/2} = \left(\frac{2}{T} \right)^{1/2}, \quad (4.39)$$

де T – період коливань класичної частинки, локалізованої в області I. В підбар'єрній області розв'язок, відповідний згасаючій експоненті, при $l+1/2 > 0$

$$\psi = \frac{C_2^+}{\sqrt{qQ}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(-q - \frac{V'(r)}{2qQ} \right) dr \right] \begin{pmatrix} -Q \\ \varepsilon - 1 - V(r) \end{pmatrix}, \quad (4.40а)$$

а для станів з $l+1/2 < 0$

$$\psi = \frac{C_2^-}{\sqrt{qQ}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(-q + \frac{V'(r)}{2qQ} \right) dr \right] \begin{pmatrix} \varepsilon - V(r) + 1 \\ Q \end{pmatrix}. \quad (4.40б)$$

Тут $q = |p(r)|$, $Q = q + |l+1/2|/r$. При $r > r_+$ квазістаціонарному стану відповідає розбіжна хвиля (вилітний позитрон); формули для хвильових функцій при $l+1/2 > 0$ мають вигляд:

$$\psi = \frac{C_3^+}{\sqrt{pP}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(ip + \frac{V(r)}{2pP} \right) dr \right] \begin{pmatrix} iP \\ \varepsilon - 1 - V(r) \end{pmatrix}, \quad (4.41a)$$

для $l+1/2 < 0$

$$\psi = \frac{C_3^-}{\sqrt{pP}} \exp \left[\int_{r_+}^r \left(ip - \frac{V(r)}{2pP} \right) dr \right] \begin{pmatrix} \varepsilon - V(r) + 1 \\ -iP \end{pmatrix}, \quad (4.41b)$$

де $P = p + i|l+1/2|/r$. Для обходу точок повороту r_- та r_+ можна використати метод Цваана [1,3], що дозволяє зшити розв'язки і встановлює зв'язок між нормованими сталими:

$$C_2^\pm = -iC_3^\pm = \pm \frac{C_1^\pm}{2} \left[\frac{|l+1/2|}{(r_-^2 + (l+1/2)^2)^{1/2} + r_-} \right]^{\pm 1/2} \exp \left[- \int_{r_-}^{r_+} \left(q \mp \frac{V(r)}{2qQ} \right) dr \right]. \quad (4.42)$$

На завершення вкажемо положення точок повороту для потенціалу (4.14). При $r_N < r_-$ точки r_\pm лежать за межами ядра і не залежать від моделі обрізування:

$$r_\pm = \frac{-\varepsilon Z\alpha \pm \mu}{k^2}, \quad k = (\varepsilon^2 - 1)^{1/2}, \quad \mu = \sqrt{(\varepsilon Z\alpha)^2 - (k\theta)^2}.$$

Оскільки, як зазначалося вище, радіус ядра атома r_N є малим, то для того, щоб знайти r_0 , припустимо, що $|\varepsilon| \ll Z\alpha/r_N$. Тоді r_0 визначається з рівняння $f(x) - \rho_0/x = 0$, де $x = r/r_N$, $\rho_0 = |l+1/2|/Z\alpha$. Звідси для моделі обрізування I $x_0 = \rho_0$, а у випадку моделі II

$$x_0 = 2 \sin\left(\frac{1}{3} \arcsin \rho_0\right).$$

Для потенціалу (4.14) при $r > r_N$

$$p(r) = \frac{\theta}{r} \left[\left(1 - \frac{r}{r_-}\right) \left(1 - \frac{r}{r_+}\right) \right]^{1/2}.$$

Тому умова застосовності квазікласики набуває вигляду

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{p} \right) = \theta^{-1} \left(1 - \frac{r}{r_m}\right) \left[\left(1 - \frac{r}{r_-}\right) \left(1 - \frac{r}{r_+}\right) \right]^{-3/2} \ll 1, \quad r_m^{-1} = (r_+^{-1} + r_-^{-1})/2$$

і виконується при $\theta \gg 1$. Тут r_m – точка максимуму ефективного потенціалу $U(r, \varepsilon)$. Фактично метод ВКБ застосовний аж до $\theta \sim 1$, в чому можна переконатися, порівнюючи квазікласичні формули з точними розрахунками. Таке порівняння було проведено для тривимірного випадку [20, 150] для Z_{cr} та N , де $N = \mathcal{N}(Z)$ – число рівні дискретного спектра, що опустилися в нижній континуум.

4.6. Положення і ширина квазістаціонарних рівнів в нижньому енергетичному континуумі

Отримані в підрозділі 4.5 квазікласичні формули для хвильових функцій дозволяють розв'язувати широке коло задач в теорії двовимірних надкритичних атомів. Так, із (4.38) випливає правило квантування:

$$\int_{r_0}^{r_1} \left(p - \frac{(l+1/2)w_1}{pr} \right) dr = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.43)$$

яке визначає положення квазістаціонарних рівнів, які є продовженням рівнів дискретного спектра в закритичну область $Z > Z_{cr}$, $\varepsilon < -1$. Як і у випадку трьох просторових змінних легко показати, що для кулонівського поля $V(r) = -Z\alpha/r$ при $0 < \varepsilon < 1$ умова (4.43) відтворює точний вираз для енергії (4.11), де $n_r = n + 1/2 + \text{sgn}(l + 1/2)$.

Обчислюючи інтеграли в (4.43) для потенціалу (4.14) і враховуючи, що $|\varepsilon| \ll Z\alpha/r_N$, отримуємо трансцендентне рівняння для ε :

$$\frac{\varepsilon Z\alpha}{2k} \ln \frac{|\varepsilon| Z\alpha + k\theta}{|\varepsilon| Z\alpha - k\theta} - \theta \ln \frac{r_N e \mu}{2\theta^2} + \sigma \arccos \frac{\theta^2 - \varepsilon \aleph^2}{Z\alpha \mu} + I = \pi(n_r + \sigma), \quad (4.44)$$

де $e = 2.718\dots$, $\sigma = \text{sgn}(l + 1/2)/2$,

$$I = Z\alpha \int_{x_0}^1 \left[\sqrt{f^2(x) - \frac{\rho_0^2}{x^2}} - \frac{l+1/2}{2(Z\alpha)^2} \left(\frac{f'(x)}{f(x)} + \frac{1}{x} \right) \frac{1}{\sqrt{x^2 f^2(x) - \rho_0^2}} \right] dx. \quad (4.45)$$

Розглянемо, як і в попередніх підрозділах 2.7, 4.2 і 4.3, модель I, для якої функція обрізування $f(x)=1$. В цьому випадку інтеграл (4.45) обчислюється в аналітичному вигляді:

$$I = \theta + (\sigma - |\aleph|) \arccos \frac{|l+1/2|}{Z\alpha}.$$

На рис. 4.2 подано числові розв'язки трансцендентних рівнянь (4.15)-(4.17), а також рівняння (4.58) для трьох найнижчих станів $1s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ та $2s_{1/2}$. Проаналізуємо рух енергетичних рівнів (в залежності від заряду Z) в області спектра $\varepsilon < 1$ на прикладі основного стану $1s_{1/2}$. Починаючи з $Z=0$, $\varepsilon=1$ рівень енергії $\varepsilon_0(Z)$ опускається до $Z \approx 137/2$, де розв'язки рівняння Дірака для точкового ядра втрачають зміст (пунктирна лінія). Енергетичний рівень електрона у водневоподібному атомі із скінченими розмірами ядра перетинає поріг $\varepsilon=0$ при $Z \approx 83$ (суцільна лінія) і при $Z_{cr} \approx 107$ опускається в нижній континуум, де стає квазістаціонарним.

Для глибоких рівнів $1 \ll |\varepsilon| \ll Z\alpha/r_N$ рівняння (4.44) розв'язується в явному вигляді:

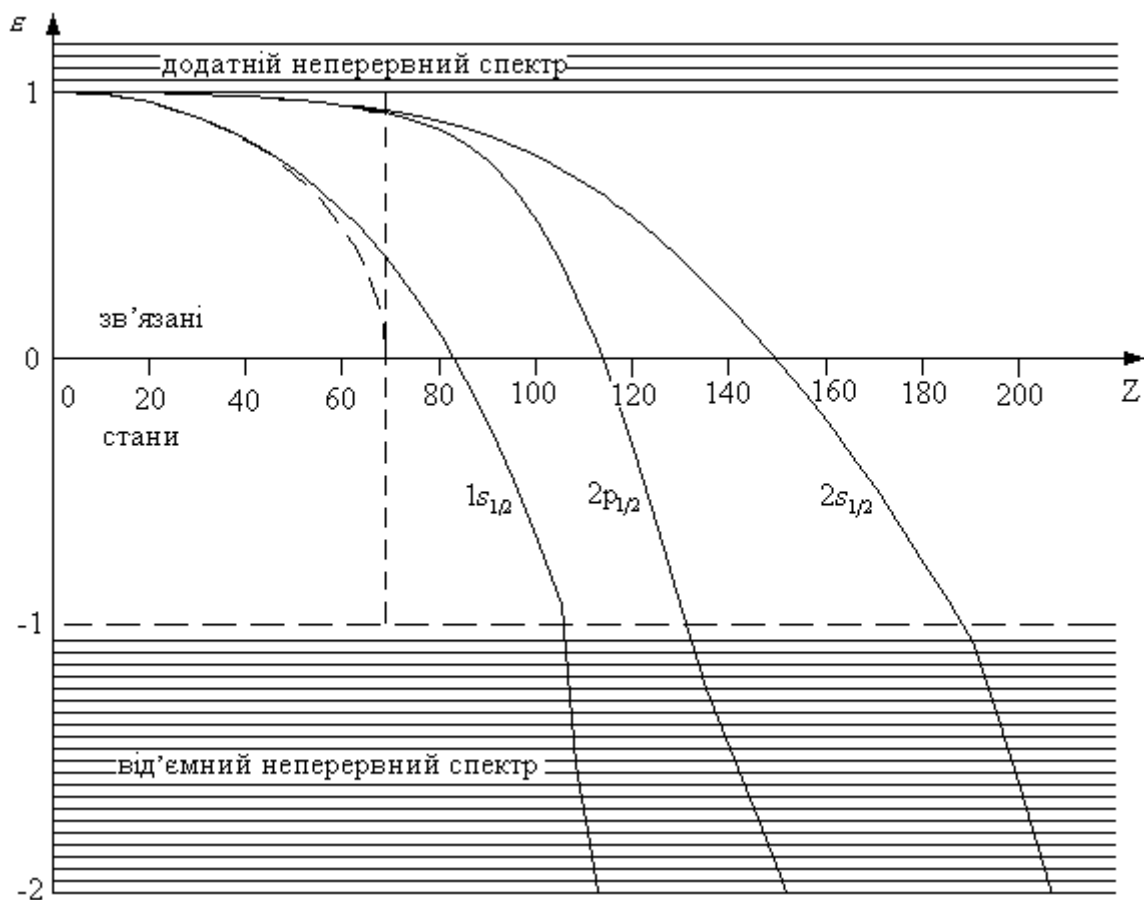


Рис. 4.3. Хід енергетичних рівнів $\varepsilon(Z)$ для трьох найнижчих станів $1s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ та $2s_{1/2}$.

$$\varepsilon = -\frac{2\theta^2}{|I+1/2|r_N} \left(\frac{|I+1/2|}{Z\alpha - \theta} \right)^{-\frac{Z\alpha}{\theta}} \exp \left\{ \frac{I}{\theta} - 1 - \frac{\pi}{\theta} \left[n + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2\sigma \arccos \rho_0}{\pi} \right) \right] \right\}.$$

Перейдемо до обчислення ширини рівня $\Gamma = -2 \operatorname{Im} \varepsilon_{nl}$, яка співпадає з ймовірністю спонтанного народження позитронів. Обчислюючи потік частинок при $r \rightarrow \infty$ з хвильовими функціями (4.41), знаходимо

$$\Gamma = \frac{1}{T} \exp \left[-2 \int_{r_-}^{r_+} \left(q + \frac{(I+1/2)w_1}{qr} \right) dr \right]. \quad (4.46)$$

У випадку кулонівського поля всі інтеграли в (4.46) беруться точно, і ми отримуємо

$$\Gamma = \Gamma_0 \exp \left\{ -2\pi Z\alpha \left[\sqrt{1+1/k^2} - \sqrt{1-\rho_0^2} \right] \right\}, \quad (4.47a)$$

$$T = \frac{1}{\Gamma_0} = -\frac{2}{k^2} \left[\varepsilon\theta + \frac{Z\alpha}{2k} \ln \left(\frac{|\varepsilon|Z\alpha + k\theta}{|\varepsilon|Z\alpha - k\theta} \right) \right]. \quad (4.47b)$$

Для того, щоб оцінити вплив двовимірності на величину ймовірності спонтанного народження позитронів було побудовано відношення $Q_6(\varepsilon) = \Gamma_{2+1}/\Gamma_{3+1}$. Оскільки залежність $\varepsilon(Z)$ є різною для (2+1)-вимірної та (3+1)-вимірної моделей, то досліджувалась залежність $\Gamma_{2+1}/\Gamma_{3+1}$ від ε , а не від Z . Діапазон енергій на рис. 4.4 $|\varepsilon|=1 \div 6$ відповідає значенням зарядів $Z_{2+1} = 188 \div 257$ для двовимірної моделі та $Z_{3+1} = 241 \div 345$ для тривимірної моделі; Q_6 відкладено у логарифмічній шкалі. З рисунку видно, що ширина Γ у випадку двовимірного простору значно більша, ніж в (3+1)-вимірах, і ця різниця різко зростає із зменшенням Z .

Аналогічним чином можна визначити і інші фізичні величини при $\varepsilon \leq -1$. Так, обчислення середнього радіуса (4.35) за допомогою (4.38) дає

$$\bar{r} = \frac{\left(\frac{3\varepsilon^2}{2} - 1\right) Z\alpha\theta - \frac{|\varepsilon|}{4k} \left[\frac{3Z^2\alpha^2}{k^2} + \left(1 + \frac{1}{2}\right)^2 \right] \ln\left(\frac{|\varepsilon|Z\alpha + k\theta}{|\varepsilon|Z\alpha - k\theta}\right)}{|\varepsilon|\theta - \frac{Z\alpha}{2k} \ln\left(\frac{|\varepsilon|Z\alpha + k\theta}{|\varepsilon|Z\alpha - k\theta}\right)}. \quad (4.48)$$

В границі $\varepsilon \rightarrow -1$ формула (4.48) переходить у вираз

$$\bar{r} = \frac{\theta^2(3 + 2\rho_0^2)}{5Z\alpha(2 + \rho_0^2)}, \quad (4.49)$$

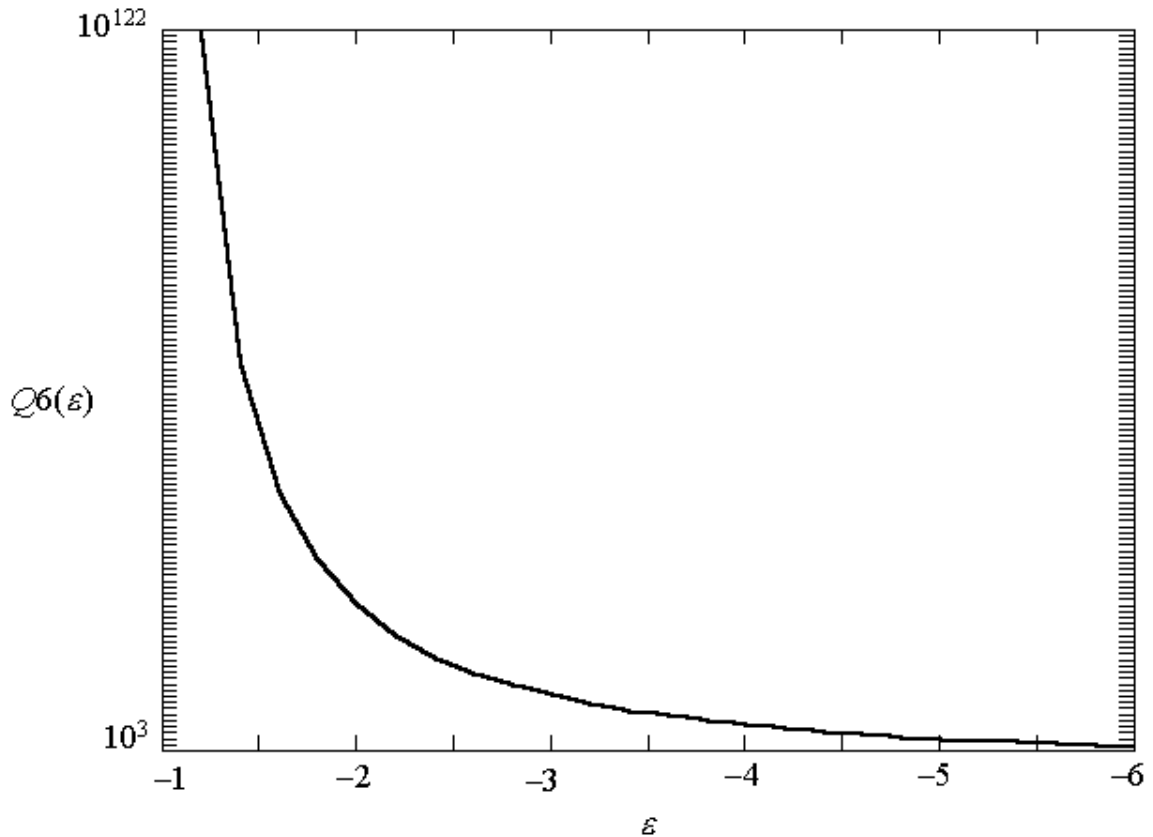


Рис. 4.4. Відношення $Q_6(\varepsilon) = \Gamma_{2+1}/\Gamma_{3+1}$ для стану $2S_{1/2}$.

що співпадає (з точністю до заміни $\aleph \rightarrow -(I+1/2)$) з виразом для середнього радіуса системи, отриманим Поповим [21] в тривимірному випадку. Легко переконатися, що середній радіус (4.36), отриманий з точних розв'язків системи рівнянь Дірака (4.6) з обрізаним кулонівським потенціалом при $Z \rightarrow Z_{cr}$ збігається з квазікласичним виразом (4.49) при умові $|I| \gg 1$.

4.7. Висновки до розділу 4

В даному розділі досліджуються деякі невивчені раніше ефекти, пов'язані з поведінкою релятивістських заряджених ферміонів в присутності сильного кулонівського поля в 2+1 вимірах. Зокрема, тут розв'язано наступні питання: визначення величини критичного заряду ядра Z_{cr} ; дискретний спектр рівняння Дірака при $137 < 2Z < 2Z_{cr}$; ефективний розмір зв'язаного стану при $2Z > 137$; спектр квазістаціонарних рівнів (їх положення і ширина) в нижньому діраківському континуумі; обчислення ймовірності спонтанного народження позитронів кулонівським полем ядра з зарядом $Z > Z_{cr}$ в 2+1 вимірах. З цією метою коротко проаналізовано особливості руху релятивістського електрона в кулонівському полі точкового джерела в 2+1 вимірах. Такий аналіз показує, що енергія основного стану 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 $\varepsilon_0(Z)$ обертається в нуль. Продовження формули для $\varepsilon_0(Z)$ на область $2Z > 137$ приводить до комплексних значень енергії ε , що відповідає “падінню на центр”.

Проведене в підрозділі 4.3 врахування скінчених розмірів ядра призводить, як і в (3+1)-вимірному випадку, до регуляризації кулонівського потенціалу при $r \rightarrow 0$ і дозволяє пройти точку $2Z = 137$ аж до “критичного” значення Z_{cr} , при якому енергія основного стану досягає межі нижнього континуума. Зокрема, для однієї простої моделі протяжного джерела (ядра) отримано точні нормовані розв’язки двовимірного рівняння Дірака, а також трансцендентне рівняння, яке визначає рівні основного та збуджених електронних станів в області $Z < Z_{cr}$. Детально розглянуто випадок $\varepsilon = -1$ та одержано трансцендентне рівняння для визначення критичного заряду, з числових розв’язків якого видно, що в основному стані критичний заряд рівний 107, тоді як в (3+1)-вимірній КЕД $Z_{cr} = 173$. Таким чином, діраківський вакуум 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.

Обчислено середній радіус двовимірної системи і показано, що при $Z \rightarrow Z_{cr}$ стан електрона, що лежить на межі нижнього енергетичного континууму ($\varepsilon \rightarrow -1$) залишається локалізованим (на відміну від станів з $\varepsilon \rightarrow +1$). 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 $Z > Z_{cr}$, знайдено (підрозділ 4.5) явний вигляд радіальних хвильових функцій в класично дозволених та заборонених областях, отримано умови їх зшивання при переході через точки повороту. Це дало можливість отримати рівняння для енергії (положення та ширини) квазістаціонарних рівнів, що належать нижньому континууму ($\varepsilon < -1$)

розв'язків рівняння Дірака в $2+1$ вимірах. Вивчено вплив двовимірності простору на ширину квазістаціонарного рівня і показано, що для одного й того ж рівня енергії в нижньому континуумі ймовірність спонтанного народження позитронів у $2+1$ вимірах значно більша за її значення в $3+1$ вимірах і різниця між ними різко зростає із зменшенням заряду Z (або збільшенням енергії ε).

ВИСНОВКИ

Основні результати роботи пов'язані з розвиненням запропонованих раніше і формулюванням нових версій квазікласичного наближення (методу ВКБ) для рівняння Дірака в сильних зовнішніх полях та їх застосуванням до вивчення особливостей в енергетичних спектрах трьох релятивістських квантово-механічних систем, що мають для атомної фізики характер фундаментальних еталонних задач: 1) квантово-механічної задачі двох центрів для рівняння Дірака; 2) сферичної моделі ефекту Штарка в релятивістському водневоподібному атомі (іоні) в двох і трьох просторових вимірах; 3) релятивістської кулонівської задачі протяжного ядра в просторах зниженої розмірності. Дослідження цих трьох задач в дисертаційній роботі проводилося методом точних або асимптотично точних розв'язків рівняння Дірака в зовнішньому полі. В останньому випадку розв'язок задачі представляється як правило старшими членами асимптотичного розкладу за малим параметром, а точність обчислень контролюється наступними членами розкладу і визначається величиною використовуваного асимптотичного параметра.

Нижче сформульовано підсумки проведеного дослідження і основні положення, які висуваються автором на захист.

1. В рамках параксіального наближення Фока-Леонтовича розроблено новий метод розрахунку хвильових функцій діраківського електрона в підбар'єрній області для тривимірних аксіально-симетричних задач, що не допускають повного відокремлення змінних.
2. За допомогою розвинутого квазікласичного методу докладно вивчено дискретний спектр релятивістської задачі двох центрів при $R \rightarrow \infty$. Обчислено перші два члени асимптотичного (за великими міжцентровими відстанями) розкладу величини обмінного розщеплення адіабатичних термів в релятивістській задачі двох кулонівських центрів.

3. В рамках теорії збурень для оператора енергії отримано асимптотичні розклади для енергії системи $Z_1 e Z_2$ при великих між'ядерних відстанях ($R \gg 1$) і в границі об'єднаного атома для випадків однакових і різних зарядів Z_1, Z_2 . Вивчено вклад релятивістських ефектів у розклад за мультиполями енергії електростатичної взаємодії релятивістського атома з віддаленим точковим зарядом Z_2 . Знайдені асимптотичні розклади для енергії системи $Z_1 e Z_2$ є основним технічним засобом 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 діраківського 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). 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 $Z \rightarrow Z_{cr}$ стан електрона, який лежить на межі нижнього континууму, залишається локалізованим (на відміну від станів з $\varepsilon \rightarrow +1$).

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 $Z > Z_{cr}$. Проведено порівняльне вивчення спектрів (2+1)- і (3+1)-вимірних рівнянь Дірака в кулонівському полі протяжного джерела в докритичній $Z < Z_{cr}$ і закритичній $Z > Z_{cr}$ областях.

Наприкінці дисертаційної роботи хочу висловити щире подяку науковому керівнику проф. Лазуру В.Ю. за постановку цікавих задач, а також консультативну допомогу при написанні дисертації.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука, 1974. – 760 с.
2. Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории. – М.: Наука, 1975. – 312 с.
3. Хединг Дж. Введение в метод фазовых интегралов (метод ВКБ). – М.: Мир, 1965. – 354 с.
4. Фрёман Н., Фрёман П.У. ВКБ-приближение. – М.: Мир, 1967. – 168 с.
5. Смирнов Б.М., Чибисов М.И. Разрушение атомных частиц электрическим полем и электронным ударом // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1965. – Т. 49, вып. 3. – С. 841-851.
6. Переломов А.М., Попов В.С., Терентьев М.В. Ионизация атомов в переменном электрическом поле. I // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1966. – Т. 50, вып. 5. – С. 1393-1409.
7. Переломов А.М., Попов В.С., Терентьев М.В. Ионизация атомов в переменном электрическом поле. II // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1966. – Т. 51, вып. 1(7). – С. 309-325.
8. Никишов А.И., Ритус В.И. Ионизация систем, связанных короткодействующими силами, полем электромагнитной волны // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1966. - Т. 50, вып. 1. – С. 255-270.
9. Yamabe Y., Tachibana A., Silverstone H.J. Theory of the ionization of the hydrogen atom by an external electrostatic field // Phys. Rev. A. – 1977. – Vol. 16, Issue 3. – P. 877-890.
10. Ридберговские состояния атомов и молекул: Пер. с англ./ Под ред. Р. Стебингса и Ф. Даннинга. – М.: Мир, 1985. – 496 с.
11. Мур В.Д., Попов В.С. Метод ВКБ для резонансов // Жур. Эксп. Теор. Физики. – 1993. - Т. 104, вып. (1)7. – С. 2293-2313.

12. Герштейн С.С., Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. Квазиклассическое приближение в задаче двух центров // Жур. Эксп. Теор. Физики. – 1965. – Т. 48, вып. 2. – С. 633–643.
13. Комаров Й.В., Пономарев Л.Й., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. – М.: Наука, 1976. – 319 с.
14. Карнаков Б.М., Крайнов В.П. Квазиклассическое приближение в квантовой механике. – М.: изд-во МИФИ, 1992. – 424 с.
15. Паули В. Общие принципы волновой механики. – М.: Гостехиздат, 1947. – 473 с.
16. Rubinov S.I., Keller J.B. Asymptotic Solution of the Dirac Equation // Phys. Rev. – 1963. – Vol. 131, Issue 6. – P. 2789-2796.
17. Stachel J., Plebansky J. Classical particles with spin 1. The WKBJ approximation // J. Math. Phys. – 1977. – Vol. 18. – P. 2368-2374.
18. Попов В.С. Об уровнях энергии электрона при $Z > 137$ // Пис. Жур. Эксп. и Теор. Физ. – 1970. – Т. 11, вып. 3. – С. 254-256.
19. Крайнов В.П. ВКБ-метод для сильного кулоновского поля // Пис. Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1971. – Т. 13, вып. 7. – С. 359-362.
20. Маринов М.С., Попов В.С. Об одном варианте метода ВКБ и вычислении критического заряда ядра // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1974. – Т. 67, вып. 4(10). – С. 1250-1262.
21. Попов В.С., Воскресенский Д.Н., Елецкий В.Л., Мур В.Д. Метод ВКБ при $Z > 137$ и его приложения к теории сверхкритических атомов // Журн. эксп. и теор. физ. – 1979. – Т. 76, вып. 2. – С. 431-459.
22. Зельдович Я.Б., Попов В.С. Электронная структура сверхтяжелых атомов // Усп. Физ. Наук. – 1971. – Т. 105, вып. 3. – С. 403-440.
23. Mukherjee S., Chandel S.S. Relativistic electron scattering from a two center potential // J. Phys. A. – 1978. – Vol. 11, No. 7. – P. 1257-1277.

24. Mur V.D., Popov V.S., Simonov Yu. A., Yurov V.P. Description of relativistic heavy-light quark-antiquark systems via Dirac equation // J. Exp. Theor. Phys. – 1994. – Vol. 105, No. 1. – P. 3-27.
25. Dobrovolska I.V., Tutik R.S. A new approach to perturbation theory for a Dirac particle in a central field // Phys. Lett. A. – 1999. – Vol. 260. – P. 10-16.
26. Haysak I., Lengyel V., Shpenik A. Fine splitting in a model incorporating relativistic kinematics // J. Phys. Stud. – 1996. – Vol. 1, No. 1. – P. 42-45.
27. Müller-Nehler U., Soff G. Electron excitations in superheavy quasimolecules // Phys. Rep. – 1994. – Vol. 246, No3&4. – P. 101-250.
28. Мигдал А.Б. Фермионы и бозоны в сильных полях. – М.: Наука, 1978. – 272 с.
29. Гриб А.А., Мамаев С.Г., Мостапенко В.М. Вакуумные квантовые эффекты в сильных полях. – М.: Энергоатомиздат, 1988. – 285 с.
30. Запрягаев С.А., Манаков Н.Л., Пальчиков В.Г. Теория многозарядных одно- и двухэлектронных ионов. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 144 с.
31. Ринг Р., Расмуссен Дж., Массман Г. Проблемы проницаемости неоднородных барьеров // Элем. Част. Ат. Ядра. – 1976. – Т. 7, вып. 4. – С. 916-951.
32. Галицкий В.М., Никитин Е.Е., Смирнов Б.М. Теория столкновений атомных частиц. – М.: Наука, 1981. – 254 с.
33. Никитин Е.Е., Смирнов Б.М. Атомно-молекулярные процессы в задачах с решениями. – М.: Наука, 1988. – 304 с.
34. Никитин Е.Е., Смирнов Б.М. Медленные атомные столкновения. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 256 с.
35. Горват П.П., Лазур В.Ю., Мигалина С.И., Шуба Й.М., Янев Р.К. Расщепление термов в квантово-механической задаче двух центров для уравнения Дирака. // Теор. Мат. Фіз. – 1996. – Т. 109, № 2. – С. 232 – 249.

- 36.Халилов В.Р. Электроны в сильном магнитном поле. – М.: Энергоатомиздат, 1988. – 208 с.
- 37.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.
- 38.Катернога А.В., Лазур В.Ю., Рейтій О.К. Асимптотичні методи в релятивістських задачах з невідокремлювальними змінними // Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія “Фізика”. – 2000. – №7. – С. 70-76.
- 39.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.
- 40.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.
- 41.Reity O.K., Lazur V.Yu. The relativistic two-Coulomb-centre problem at small and large inter-centre separations // Ukr. Phys. Jour. – 2002. – Т. 47, №3. – С. 280-287.
- 42.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.
- 43.Лазур В.Ю., Рейтій О.К., Мигалина С.І. Квазікласичні розв’язки релятивістської задачі двох кулонівських центрів // Зб. тез. міжрег. наук.-прак. конф. “Фізика конденсованих систем”. – Ужгород. – 1998. – С. 53-54.
- 44.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.

45. 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.
46. 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.
47. Горват А.А. (мол.), Лазур В.Ю., Рейтій О.К. Релятивістська сферична модель ефекту Штарка у водневоподібному іоні // Наук. вісн. Ужг. ун-ту. Серія “Фізика”. – 2000. – №6. – С. 48-60.
48. Horvat A., Lazur V., Reity O. Semiclassical Approach for the Dirac Equation with a Spherically Symmetric Potential // Tudományos Üléseinek Előadás – Összefoglalói. Szabolcs – Szatmár – Bereg Megyei Tudományos Testülete. – Nyiregyháza. – 2000. – P. 35.
49. Рейтій О.К., Лазур В.Ю. Релятивістський водневоподібний атом в 2+1 вимірах // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія “Фізика”. – 2001. – №9. – С. 94-109.
50. 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.
51. Рейтій О.К., Лазур В.Ю. Рівняння Дірака в сильному кулонівському полі в 2+1 вимірах // Зб. тез Всеукр. конф. мол. наук. з теор. та експ. фізики “ЕВРІКА-2002”. – Львів. – 2002. – С. 152-153.
52. 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.
53. 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. 75-78.
- 54.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. 78-82.
- 55.Wilczek F. Fractional Statistics and Anyon Superconductivity. – Singapore: World Scientific, 1990. – 434 p.
- 56.The Quantum Hall Effect. 2nd ed. Eds Prange R.E., Girvin S.M. – New York: Springer-Verlag, 1990. – 467 p.
- 57.Schakel A.M.J., Semenoff G.W. Quantized magnetic susceptibility in (2+1)-dimensional gapless semiconductors // Phys. Rev. Lett. – 1991. – Vol.66, Issue 20. – P.2653-2656.
- 58.Neagu A., Schakel A.M.J. Induced quantum numbers in the (2+1)-dimensional electron gas // Phys.Rev. D. – 1993. – Vol. 48, Issue 4. – P. 1785-1791.
- 59.Khalilov V.R., Ho.C.L. Dirac electron in a Coulomb Field in 2+1 Dimensions // Mod. Phys. Lett. A. – 1998. – Vol. 13. – P. 615-625.
- 60.Халилов В.Р. Рождение пар фермионов сильным кулоновским полем в 2+1 измерениях // Теор. Мат. Физ. – 1998. – Т. 116, №2. – С. 277-287.
- 61.Криве И.В., Рожавский А.С. Дробный заряд в квантовой теории поля и физике твердого тела // Усп. Физ. Наук. – 1987. – Т. 152, вып. 1. – С. 33-74.
- 62.Pauli W. Über das Modell des Wasserstoffmolekülions // Ann. Phys. – 1922. – Vol. 68. – P. 177-240.
- 63.Janev R.K., Presnyakov L.P., Shevelko V.P. Physics of Highly Charged Ions. – Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1985. – 332 p.

64. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. – М.: Наука, 1976. – 319 с.
65. Luke S.K., Hunter G., McFachran R.P., Cohen M. Relativistic theory of H_2^+ // J. Chem. Phys. – 1969. – Vol. 50, Issue 4. – P. 1644-1650.
66. Маринов М.С., Попов В.С. Критическое расстояние при столкновении тяжелых ионов // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1975. – Т. 68, вып. 2. – С. 421-431.
67. Маринов М.С., Попов В.С., Столин В.Л. Вариационный расчет критического расстояния между ядрами // Пис. Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1974. – Т. 19, вып. 1. – С. 76-80.
68. Rafelski J. and Muller B. The critical distance in collisions of heavy ions // Phys. Lett. B. – 1976. – Vol. 65, Issue 3. – P. 205-208.
69. Люлька В.А. Квантово-механическая задача двух центров для уравнения Дирака // Теор. Мат. Физ. – 1976. – Т. 28, №2. – С. 212-222.
70. Wietschorke K.-H., Schlüter P., Soff G., Rumrich K., Greiner W. Relativistic two-center continuum // Phys. Rev. A. – 1987. – Vol. 36, Issue 1. – P. 377-380
71. Chauhan H.K. and Raina P.K. Numerical results for high-energy electron scattering cross sections from two-centre potentials // J. Phys. B. – 1996. – Vol.29, No. 23. – P. 5889-5899.
72. Gould H. and Munger C.T. Tests of QED in few-electron very high Z ions // Phys. Rev. – 1987. – Vol.36, Issue 2. – P. 476-480.
73. Покотилковский Ю.Н. “Дармштатский эффект” и связанные с ним вопросы // Элем. Част. Ат. Ядра. – 1993. – Т. 24, вып. 1. – С. 5-80.
74. Герштейн С.С., Зельдович Я.Б. Рождение позитронов при сближении тяжелых ядер и поляризация вакуума // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1969. – Т. 57, вып. 2. – С. 654-659.

75. Попов В.С. “Падение на центр” при $Z > 137$ и критический заряд ядра // Ядер. Физ. – 1970. – Т. 12, вып. 2. – С. 429-446.
76. Попов В.С. Рождение позитронов кулоновским полем при $Z > 137$ // Жур. Эксп. и Теор. Физики.– 1970. – Т. 59, вып. 3 – С. 965-984.
77. Попов В.С. О свойствах дискретного спектра при Z близких к 137 // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1971. – Т. 60, вып. 4. – С. 1228-1244.
78. Попов В.С. К вопросу о критическом заряде ядра // Ядер. Физ. – 1971. – Т. 14, вып. 2. – С. 458-468.
79. Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К. Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 200 с.
80. Лазур В.Ю., Горват П.П., Мигалина С.И., Шуба Й.М., Янев Р.К. Асимптотичний підхід до проблеми розщеплення термів у релятивістській задачі двох центрів // Укр. Фіз. Жур. – 1996. – Т. 41, №5-6. – С. 605-626.
81. Schuch R. Collision physics with highly stripped slow ions.// Invited papers. XIV ICPEAC. – Stanford (USA). – 1985. – P.507-515.
82. Маринов М.С., Попов В.С. Фазовый переход для уравнения Дирака вычисление критического заряда ядра // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1973. – Т. 65, вып. 6(12). – С. 2141-2154.
83. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. – М.: Физматиздат, 1960. – 586 с.
84. Смирнов Б.М. Физика атома и иона. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 216 с.
85. Oppenheimer J.R. Three Notes on the Quantum Theory of Aperiodic Effects // Phys. Rev. – 1928, Issue 1. – Vol. 31. – P.66-81.
86. Дамбург Р.Я., Колосов В.В. Теоретическое исследование поведения водородных ридберговских атомов в электрических полях. – Рига: Саласпилс, 1980. – 431 с.

87. Silverstrone H.J. Perturbation theory of the Stark effect in hydrogen to arbitrarily high order // *Phys. Rev. A.* – 1978, Issue 5. – Vol. 18. – P.1853-1864.
88. Silverstrone H.J. Stark Effect in Hydrogen: Dispersion Relation, Asymptotic Formulas, and Calculation of the Ionization Rate via High-Order Perturbation Theory // *Phys. Rev. Lett.* – 1979. – Vol. 43, Issue 20. – P. 1498-1501.
89. Franceschini V., Grecchi V., Silverstrone H.J. Complex energies from real perturbation series for the LoSurdo-Stark effect in hydrogen by Borel-Padé approximants // *Phys. Rev. A.* – 1985. – Vol. 32, Issue 3. – P. 1338-1340.
90. Вайнберг В.М., Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В. Эффект Штарка в сильном поле // *Письма Жур. Эксп. Теор. Физ.* – 1986. – Т. 44, вып. 1. – С. 9-12.
91. Вайнберг В.М., Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В. Эффект Штарка для ридберговских состояний атома водорода // *Письма Жур. Эксп. Теор. Физ.* – 1987. - Т. 46, вып. 5. – С. 178-182.
92. Вайнберг В.М., Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В. Атом водорода в сильном электрическом поле // *Жур. Эксп. Теор. Физ.* – 1987. – Т. 93, вып. 2(8). – С. 450-462.
93. Fernandez F.M. Direct calculation of Stark resonances in hydrogen // *Phys. Rev. A.* – 1996. – Vol. 54, Issue 2. – P. 1206-1209.
94. Смирнов Б.М. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. – М: Атомиздат, 1968. – 363 с.
95. Демков Н.Н., Друкарев Г.Ф. Распад и поляризуемость отрицательного иона в электрическом поле. // *Жур. Эксп. Теор. Физ.* – 1964. – Т. 47, вып. 3. – С. 918-924.
96. Демков Н.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. – Л: Изд-во Лен. у-та, 1975. – 240 с.

97. Попов В.С., Карнаков Б.М., Мур В.Д. Ионизация атомов в электрическом и магнитных полях и метод мнимого времени // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1998. – Т. 113, вып. 5. – С. 1579-1605.
98. Попов В.С., Сергеев А.В. Ионизация атомов в слабых полях и асимптотика высших порядков теории возмущений. // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1998. – Т. 113, вып. 6. – С. 2047-2055.
99. В.С. Попов, А.В. Сергеев, А.В. Щерблыкин. О структуре высших порядков $1/n$ -разложения // ЖЭТФ. – 1992. – Т. 102, вып. 5. – С. 1453-1463.
100. Bartlett M.L., Power E.A. Relativistic corrections to S_{-2} for atomic hydrogen. – J. Phys. A. – 1969. – Vol. 2, No. 2. – P. 419-426.
101. Зон Б.А., Манаков Н.Л., Рапопорт Л.П. Кулоновская функция Грина в x -представлении и релятивистская поляризуемость водородоподобного атома. – Ядер. Физ. – 1972. – т. 15, вып. 3. – с. 508-517.
102. Лабзовский Л.Н. Многозарядные ионы во внешнем электрическом поле. Вестн. ЛГУ. – 1973. – т. 10, №2. – с. 19-26.
103. Kulkarni R.C., Swamy N.V., Chaffin E. First-order Stark shifts for low electric fields. – Phys. Rev. A. – 1973. – Vol. 7, Issue 1. – P. 27-33.
104. Запрягаев С.А. Эффект Штарка уровней тонкой структуры водородоподобного атома. – Оптика и спектроскопия. – 1978. – Т. 44, вып. 5. – С. 892-899.
105. Запрягаев С.А., Манаков Н.Л. Кулоновская функция Грина уравнения Дирака и расчеты по стационарной теории возмущений. – Ядер. Физ. – 1976. – Т. 23, вып. 6. – С. 917-925.
106. Дирак П. Принципы квантовой механики: Пер. с англ. – М.: Наука, 1979. – 356 с.

107. Воронков В.В., Колесников Н.Н. Электронные уровни атомов сверхтяжелых элементов // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1960. – Т. 39, вып. 1(7). – С. 189-191.
108. Werner F.G., Wheeler J.A. Superheavy Nuclei // Phys. Rev. – 1958. – Vol. 109, Issue 1. – P. 126-144.
109. Greiner W., Muller B., Rafelski J. Quantum Electrodynamics of Strong Fields. – Berlin-Heidelberg-New York: Springer-Verlag, 1985. – 594 p.
110. Muller B., Peitz H, Rafelski J, Greiner W. Solution of the Dirac Equation for Strong External Fields // Phys. Rev. Lett. – 1972. – Vol. 28, Issue 19. – P. 1235-1238.
111. Muller B., Rafelski J., Greiner W. Electrons in strong external fields // Z. Phys. – 1972. – Vol. 257. – P. 62-78.
112. Schweppe S. et al. Observation of a Peak Structure in Positron Spectra from U+Cm Collisions // Phys. Rev. Lett. – 1983. – Vol. 51, Issue 25. – P. 2261-2264.
113. Treatise on Heavy Ion Science / Ed. Bromley D.A. – New York: Plenum Press, 1985. – Vol. 5. – p. 537.
114. Rhein M. et al. Electron positron coincidence experiment at the TORISpectrometer // Proc. 9th Moriond Workshop: Tests of Fundamental Laws (Particle Physics, Astrophysics, Atomic Physics. – Les Arcs. – 1989. – P. 24-45.
115. Clemente M. et al. Narrow positron lines from U-U and U-Th collisions // Phys. Lett. B. – 1984. – Vol. 137. – P. 41-46.
116. Tsertos H. et al. On the scattering angle dependence of the monochromatic positron emission from U+U and U+Th collisions // Phys. Lett. B. – 1985. – Vol. 162. – P. 273-276.
117. Koenig W. et al. Positron lines from subcritical heavy ion atom collisions // Z. Phys. A. – 1987. – Vol. 328. – P. 129-145.

118. Cowan T. et al. Anomalous Positron Peaks from Supercritical Collision Systems // *Phys. Rev. Lett.* – 1985. – Vol. 54, Issue 16. – P. 1761-1764.
119. Cowan T. et al. Observation of correlated narrow-peak structures in positron and electron spectra from superheavy collision systems // *Phys. Rev. Lett.* – 1986. – Vol. 56, Issue 5. – P. 444-447.
120. Tsertos H. et al. Multiple positron structures observed from U-U collisions at 5.6-MeV/U and 5.9-MeV/U // *Z. Phys. A.* – 1987. – Vol. 326. – P. 235-236.
121. Chodos A., Wijewardhana L.C.R. Production mechanisms for a new neutral particle below 2 MeV // *Phys. Rev. Lett.* – 1990. – Vol. 56, Issue 4. – P. 302-305.
122. Cherry T.M. Uniform asymptotics formulae for functions with transition points // *Trans. Amer. Math. Soc.* – 1950. – Vol. 68, No. 4. – P. 224-257.
123. Славянов С.Ю. Асимптотика сингулярных задач Штурма-Лиувилля по большому параметру в случае близких точек перехода // *Диф. уравнения.* – 1969. – Т. 5, №2. – С. 313-325.
124. Grozdanov T.P., Janev R.K., Lazur V.Yu. Asymptotic theory of the strongly asymmetric two-Coulomb-center problem // *Phys. Rev. A.* – 1985. – Vol. 32, No. 6. – P. 3425-3433.
125. Abramov D.I., Slavyanov S.Yu. The two Coulomb centres problem at small inter-centre separations // *J. Phys. B.* – Vol. 11, No. 13. – P. 2229-2241.
126. Додонов В.В, Манько В.И. Инварианты и эволюция нестационарных квантовых систем. Труды ФИАН. Т. 183. – М.: Наука, 1987. – 288 с.
127. Смирнов Б.М. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. – М.: Атомиздат, 1973. – 296 с.
128. Бабич В. М., Булдырев В. С. Асимптотические методы в задачах дифракции коротких волн. – М.: Наука, 1972. – 372 с.

129. Леонтович М. А., Фок В. А. Решение задачи о распространении электромагнитных волн вдоль поверхности земли по методу параболического уравнения // Журн. Эксп. Теор. Физ. – 1946. – т. 16, вып. 7. – С. 557-573.
130. Сумецкий М.Ю., Дубровский Г.В. Распад связанного состояния во внешнем поле в квазиклассическом приближении // ДАН СССР. – 1979. – Т. 245. – С. 74-77.
131. Сумецкий М.Ю. Вероятность туннелирования через неоднородные потенциальные барьеры. // Теор. Мат. Физ. – 1980. – Т. 45, №1. – С. 64-75.
132. Сумецкий М.Ю. Локализованные квазиклассические состояния в теории электронно-атомного взаимодействия // Методы атомных расчетов. – 1983. – С. 202-228.
133. Дубровский Г.В., Сумецкий М.Ю. Метод параболического уравнения в квантовой механике // Труды VIII Всесоюзной конференции по физике электронных и атомных столкновений. – Ленинград. – 1982. – С.169-171.
134. Халилов В.Р. Фермион в кулоновском и магнитном полях в 2+1 измерениях // Теор. Мат. Физ. – 1999. – Т. 119, №1. – С. 105-118.
135. Халилов В.Р. Поляризация вакуума (2+1)-мерной квантовой электродинамики с ненулевой плотностью фермионов внешним магнитным полем // Теор. Мат. Физ. – 2000. – Т. 125, №1. – С. 132-151.
136. Маслов В.П. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. – М.: Наука, 1977. – 346 с.
137. Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика. – М.: Наука, 1989. – 728 с.
138. Фирсов О.Б. Резонансная перезарядка ионов при медленных столкновениях // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1951. – Т. 21, вып. 3. – С. 1001 - 1008.

139. Demkov Yu.N. The physics of electronic and atomic collisions. // *Inv. Lect. Progr. Rep. VIII ICPEAC.* – Belgrad (Yugoslavia). – 1973. – P. 26.
140. Chibisov M.I. and Janev R.K. Asymptotic exchange interaction in ion-atom systems // *Phys. Rep.* – 1988. – Vol. 166, No. 1. – P. 1-87.
141. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяния, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. – М.: Наука, 1971. – 302 с.
142. Case K.M. Singular Potentials // *Phys. Rev.* – 1950. – Vol. 80, Issue 5. – P. 797-806.
143. Переломов А.М., Попов В.С. “Падение на центр” в квантовой механике // *Теор. Мат. Физ.* – 1970. – Т. 4, №1. – С. 48-65.
144. А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика. – М.: Наука, 1981. – 432 с.
145. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции: Пер. с англ. В 2 т. – М.: Наука, 1973. – Т. 1. – 295 с.
146. Кадышевский В.Г., Кравцова Г.А., Родионов В.Н. Распад квазистационарных состояний нерелятивистских квантовых систем в интенсивном электромагнитном поле // *Теор. Мат. Физ.* – 2002. – Т. 130, №2. – С. 275-286.
147. Брейт Г. Теория резонансных ядерных реакций: Пер. с англ.. – М.: ИЛ, 1961. – 463 с.
148. Рапопорт Л.П., Зон Б.А., Манаков Н.П. Теория многофотонных процессов в атомах. – М.: Атомиздат, 1978. – 182 с.
149. Елецкий В.Л., Воскресенский Д.Н., Попов В.С. Квазиклассическое приближение и метод Томаса-Ферми при $Z > 137$ // *Ядер. Физ.* – 1977. – Т. 26, вып. 5. – С. 994-1004.
150. Мур В.Д., Попов В.С. Квазиклассическое приближение для уравнения Дирака в сильных полях. // *Ядер. физ.* – 1978. – Т. 28, вып. 3. – С. 837-849.

151. Schwinger J. On Gauge Invariance and Vacuum Polarization // *Phys. Rev.* – 1951. – Vol. 82, Issue 5. – P. 664-679.
152. Горелик Г.Е. Размерность пространства. – М.: Изд-во МГУ, 1983. – 197 с.
153. Владимиров Ю.С. Размерность физического пространства-времени и объединение взаимодействий. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 237 с.
154. Su W.P., Schrieffer J.R., Heeger A.J. Solitons in Polyacetylene // *Phys. Rev. Lett.* – 1979. – Vol. 42, Issue 25. – P. 1698-1701.
155. Панкратов О.А. Типы неоднородных структур, пограничные электронные состояния и киральная аномалия в полупроводниках с дираковскими зонами // *Пис. Жур. Эксп. Теор. Физ.* – 1987. – Т. 45, вып. 2. – ст. 82-85.
156. Шикин В.Б., Монарха Ю.П. Двумерные заряженные системы в гелии. – М.: Наука, 1989. – 160 с.
157. Von Klitzing K., Dorda G., Pepper M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance // *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – Vol. 45, Issue 6. – P. 494-497.
158. Niemi A., Semenoff G. Axial-Anomaly-Induced Fermion Fractionization and Effective Gauge-Theory Actions in Odd-Dimensional Space-Times // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – Vol. 51, Issue 23. – P. 2077-2080.
159. Deser S., Jackiw R., Templeton S. Topologically massive gauge theories // *Ann. Phys.* – 1982. – Vol. 140. – P. 372-411.
160. Jackiw R., Templeton S. How super-renormalizable interactions cure their infrared divergences // *Phys. Rev. D.* – 1981. – Vol. 23, Issue 10. – P. 2291-2304.
161. Жуковский В.И., Песков И.А. Вакуумные эффекты в (2+1)-мерной калибровочной теории с топологическим массовым членом // *Ядер. Физ.* – 2001. – Т. 64, вып. 8. – С. 1607-1616.

162. Жуковский В.И., Песков И.А. Афиногенов А.Ю. Радиационный сдвиг энергии кварка в (2+1)-мерной модели КХД с вакуумным конденсатом // Ядер. Физ. – 1998. – Т. 61, вып8. – С. 1514-1525.
163. Schakel A.M.J. Relativistic quantum Hall effect // Phys. Rev. D. – 1991. – Vol. 43, Issue 4. – P. 1428-1431.
164. Khalilov V.R. Electrons in Strong Electromagnetic Fields: an Advanced Classical and Quantum Treatment. – Amsterdam: Gordon&Beach Sci. Publ., 1996. – 408 p.
165. Халилов В. Р. Нейтральный фермион, обладающий электрическим и магнитным моментами во внешнем электромагнитном поле // Теор. Мат. Физ. – 2001. – Т. 129, №1. – С. 55-67.
166. Никишов А.И. Интерпретация волновой функции сильносвязанного ($p_0 < 0$) уровня // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1986. – Т. 91, вып. 5(11). – С. 1565-1572.
167. Никишов А.И. Проблемы квантовой электродинамики интенсивного поля. Труды ФИАН. Т. 168. – М.: Наука, 1986. – 264 с.
168. Артимович Г.К., Ритус В.И. Поведение релятивистских частиц в поле глубокой потенциальной ямы // Жур. Эксп. Теор. Физ. – 1993. – Т. 104, вып. 3 (9). – С. 2912-2936.

ДОДАТОК

Для того, щоб віднормувати радіальні хвильові функції F та G (див. розділ 2), а також знайти середній радіус системи в (2+1)-вимірному просторі (див. розділ 4), необхідно обчислити інтеграл:

$$I^\mu = \int_0^\infty (F^2 + G^2) r^\mu dr, \quad \mu = 0, 1. \quad (1)$$

Оскільки функції F і G мають різний вигляд в областях $r < r_N$ і $r \geq r_N$, то інтеграл I^μ буде складатися з двох частин:

$$I^\mu = A^2 I_{<}^\mu + C_1^2 I_{>}^\mu, \quad (2a)$$

$$I_{<}^\mu = A^{-2} \int_0^{r_N} (F^2 + G^2) r^\mu dr, \quad I_{>}^\mu = C_1^{-2} \int_{r_N}^\infty (F^2 + G^2) r^\mu dr. \quad (2б)$$

Підставляючи (2.54) в $I_{<}^\mu$, обчислюючи всі інтеграли і враховуючи що $r_N \ll 1$, отримуємо:

$$I_{<}^\mu = \frac{r_N^{\mu+2}}{2} \left[I_{|\mathbb{S}+1/2|}^\mu(Z\alpha) + I_{|\mathbb{S}-1/2|}^\mu(Z\alpha) \right], \quad (3a)$$

$$I_n^\mu(x) = \frac{1}{(n!)^2 \nu} \left(\frac{x}{2} \right)^{2n} {}_2F_3 \left(n + \frac{1}{2}, \nu; n+1, 2n+1, \nu+1; -x^2 \right), \quad (3б)$$

де $\nu = \mu/2 + n + 1$, ${}_2F_3$ – гіпергеометрична функція Гауса. Зауважимо, що для випадку $\mu = 0$ формули (3) спрощуються:

$$I_{<}^0 = r_N^2 \left[J_{|\mathbb{S}^{+1/2}|}^2(Z\alpha) - \frac{2|\mathbb{S}|}{Z\alpha} J_{|\mathbb{S}^{+1/2}|}(Z\alpha) J_{|\mathbb{S}^{-1/2}|}(Z\alpha) + J_{|\mathbb{S}^{-1/2}|}^2(Z\alpha) \right], \quad (4)$$

Перейдемо тепер до обчислення інтегралу:

$$I_{>}^\mu = \frac{2}{(2\lambda)^{\mu+1}} \left[X^\mu(\chi_1, \chi_1) + C^2 X^\mu(\chi_2, \chi_2) + 2\epsilon C X^\mu(\chi_1, \chi_2) \right], \quad (5)$$

$$X^\mu(a, b) = \int_{\rho_N}^{\infty} \Psi(a, 2\gamma + 1; \rho) \Psi(b, 2\gamma + 1; \rho) \rho^{2\gamma+\mu} e^{-\rho} d\rho, \quad \rho_N = 2\lambda r_N. \quad (6)$$

Для обчислення інтегралу (6) замінимо кожен з гіпергеометричних функцій інтегральним представленням [145]:

$$\Psi(a, c, \rho) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^{\infty} e^{-\rho t} t^{a-1} (1+t)^{c-a-1} dt.$$

Тоді інтегрування по ρ зводиться до наступного інтегралу:

$$\int_{\rho_N}^{\infty} \rho^{2\gamma+\mu} e^{-\rho(t+t'+1)} d\rho = \frac{\Gamma(\xi)}{(t+t'+1)^\xi} - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t-t'-1)^n \rho_N^{\xi+n}}{n!(\xi+n)}, \quad (7)$$

де t і t' – змінні інтегрування, $\xi = 2\gamma + \mu + 1$. Враховуючи (7), інтегрування по t дасть дві гіпергеометрії: ${}_2F_1\left(2\gamma + \mu + 1, a, a + \mu + 1; \frac{t'}{1+t'}\right)$ і (під знаком суми) ${}_2F_1\left(-n, a, a - 2\gamma - n; \frac{t'}{1+t'}\right)$. Розкладаючи їх в ряд і інтегруючи почленно, отримуємо гіпергеометричні функції вищого порядку ${}_3F_2$:

$$\begin{aligned}
X^\mu(a, b) = & \frac{\Gamma^2(\mu+1)\Gamma(\xi)}{\Gamma(a+\mu+1)\Gamma(b+\mu+1)} {}_3F_2(a, b, \xi; a+\mu+1, b+\mu+1; 1) - \\
& - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \rho_N^{\xi+n}}{n!(\xi+n)} \frac{\Gamma^2(-2\gamma-n)}{\Gamma(a-2\gamma-n)\Gamma(b-2\gamma-n)} \times \\
& \times {}_3F_2(a, b, -n; a-2\gamma-n, b-2\gamma-n; 1). \quad (8)
\end{aligned}$$

Оскільки $\rho_N = 2\lambda r_N \ll 1$, то в формулі (8) можна знехтувати останнім доданком. Крім того, для частинних випадків $\mu = 0, 1$ та $a, b = \chi_{1,2}$ формула (8) допускає деякі спрощення:

$$X^0(\chi_1, \chi_1) = \frac{\Gamma(2\gamma+1)\Gamma(-2\gamma)}{\Gamma(\chi_1)\Gamma(\chi_1-2\gamma)} [\psi(\chi_1-2\gamma) - \psi(\chi_1)], \quad (9)$$

$$X^0(\chi_1, \chi_2) = \frac{\Gamma(2\gamma+1)\Gamma(1-2\gamma)}{\Gamma(\chi_2)\Gamma(\chi_2-2\gamma)}, \quad (10)$$

$$X^1(\chi_1, \chi_1) = \frac{\Gamma(2\gamma+1)\Gamma(-2\gamma)}{\Gamma(\chi_1)\Gamma(\chi_1-2\gamma)} \{(2\gamma-2\chi_1+1)[\psi(\chi_1-2\gamma) - \psi(\chi_1)] - 4\gamma\}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
X^1(\chi_1, \chi_2) = & \frac{\Gamma(2\gamma+1)\Gamma(-2\gamma)}{\Gamma(\chi_2)\Gamma(\chi_2-2\gamma)} \{-\gamma(2\gamma-2\chi_1+1) + \\
& \chi_1(\chi_1-2\gamma)[\psi(\chi_2-2\gamma) - \psi(\chi_2)]\}, \quad (12)
\end{aligned}$$

де $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$. $X^\mu(\chi_2, \chi_2)$ отримується з $X^\mu(\chi_1, \chi_1)$ заміною $\chi_1 \rightarrow \chi_2$.