

ВЫСОКИЕ ПОРЯДКИ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В. М. Вайнберг*, В. А. Гани†, А. Е. Кудрявцев‡

Государственный научный центр «Институт теоретической и экспериментальной физики»
117259, Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 мая 1997 г.

Рассматриваются состояния атома водорода с главным квантовым числом $n \leq 3$ в постоянном однородном магнитном поле \mathcal{H} . Получены коэффициенты разложения энергии этих состояний по степеням \mathcal{H}^2 до 75-го порядка. Ряды для энергии состояний и волновой функции просуммированы до значений \mathcal{H} порядка атомного магнитного поля. Обобщение метода моментов, послужившее основой этих вычислений, может быть использовано в других случаях возмущения атома водорода полиномиальным относительно координат потенциалом.

1. ВВЕДЕНИЕ

У задачи об атоме водорода в постоянных электрическом (\mathcal{E}) и магнитном (\mathcal{H}) внешних полях недавно был обнаружен новый аспект. Было замечено [1], что асимптотика ряда теории возмущений по \mathcal{E} существенно меняется при некоторых значениях \mathcal{H} . Это изменение связано с влиянием на асимптотику не учитывавшихся ранее комплексных решений классических уравнений движения. Взгляд на это явление с точки зрения разложения по \mathcal{H} мог бы быть полезен. Наша работа ориентирована именно в этом направлении — в ней предлагается эффективный способ построения ряда теории возмущений и обсуждается асимптотика этого ряда в эффекте Зеемана.

В работе [2] для вычисления высоких порядков теории возмущений был предложен метод моментов, который по сравнению с известными рекуррентными методами обладает дополнительными возможностями. Он был описан как средство исследования $1/n$ -разложения (dimensional expansion) в задаче, приводящей к эффективному изотропному ангармоническому осциллятору. Затем он применялся в $1/n$ -разложении для трех взаимодействующих тел [3], где эффективный ангармонический осциллятор анизотропен.

Мы обращаем внимание на то, что возмущение атома водорода потенциалом полиномиального вида также удобно исследовать методом моментов. К таким возмущениям относятся постоянные однородные электрическое и магнитное поля. Преимущества метода моментов наглядно видны в задаче об эффекте Зеемана. Высокие порядки теории возмущений для этой задачи исследовались в работах [4–6]; 36 коэффициентов разложения энергии основного состояния атома водорода по степеням \mathcal{H}^2 опубликованы в

* E-mail: wein@vitep5.itep.ru

† МИФИ, e-mail: gani@vitep5.itep.ru

‡ E-mail: kudryavtsev@vitep5.itep.ru

статье [6]. Для возбужденных состояний в работах [7–10] приведены зеемановские коэффициенты теории возмущений не старше третьего порядка по \mathcal{H}^2 . Переменные в уравнении Шредингера для эффекта Зеемана не разделяются, и это затрудняет вычисление высших порядков теории возмущений. Метод моментов не требует разделения переменных. Кроме того, как будет здесь показано, этот метод можно применять к вырожденным состояниям. Такая возможность, очевидно, важна для большинства состояний атома водорода.

Для рекуррентного вычисления коэффициентов теории возмущений чаще всего применялась, по-видимому, логарифмическая теория возмущений [11–15]. Благодаря своей простой алгебраической структуре логарифмическая теория возмущений позволила вычислить в некоторых случаях поправки наиболее высоких порядков. Например, для штарковского сдвига основного состояния атома водорода так было получено 160 порядков теории возмущений [16]. Однако логарифмическая теория возмущений не свободна от ограничений. Даже один узел волновой функции приводит к существенному усложнению схемы вычислений [17]. Значительно сложнее выглядит логарифмическая теория возмущений в тех случаях, когда переменные не разделяются. Без разделения переменных с ее помощью было вычислено только несколько начальных порядков теории возмущений для атома водорода в электрическом и магнитном полях [9, 10, 14].

Стоит напомнить здесь старый вариант теории возмущений, основанный на обобщенной теореме вириала и теореме Хеллмана–Фейнмана, который можно считать предшественником современного метода моментов. В работах [18, 19] для задач со сферической симметрией были написаны рекуррентные соотношения, позволяющие так же просто вычислять поправки к энергии состояний с узлами, как и безузельных. Однако введенные в этих работах моменты были диагональными, и это сузило область применимости метода. Например, восстановить волновую функцию с помощью диагональных моментов не удастся.

Направления теоретических исследований, связанных с поведением атома водорода в постоянных электрическом и магнитном полях, отражены в обзоре [20].

В настоящей работе получены рекуррентные соотношения метода моментов Адера для атома водорода в однородном магнитном поле. Два примера иллюстрируют способ их применения в случае невырожденного состояния и в том случае, когда имеется вырождение. Затем рассматривается асимптотика полученных численно коэффициентов разложения энергии уровней и приводятся результаты суммирования этих рядов теории возмущений. На примере основного состояния показано, как с помощью моментов получается волновая функция возмущенного атома водорода.

2. ОСНОВНОЕ РЕКУРРЕНТНОЕ СООТНОШЕНИЕ

Рассмотрим состояние атома водорода $|\psi_0\rangle = |n, l\rangle$ с главным квантовым числом n , моментом l и нулевой проекцией момента $m = 0$, возмущаемое сильным магнитным полем $\mathcal{H} = \mathcal{H}_z$. Напишем разложение энергии этого состояния и его волновой функции в виде

$$E = \sum_{k=0}^{\infty} E_k \gamma^{2k}, \quad \psi(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} \psi_k(\mathbf{r}) \gamma^{2k}, \quad (1)$$

$$\gamma = n^3 \mathcal{H} / \mathcal{H}_0, \quad \mathcal{H}_0 = e^3 m^2 c / \hbar^3 = 2.35 \cdot 10^9 \text{ Гс.}$$

Здесь ψ_k — поправка порядка k к кулоновской волновой функции, удовлетворяющая неоднородному уравнению

$$(\hat{H}_0 - E_0)\psi_k = -\hat{H}_1\psi_{k-1} + \sum_{j=1}^k E_j\psi_{k-j}, \quad (2)$$

где

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}, \quad \hat{H}_1 = \frac{1}{8}(r^2 - z^2).$$

(Мы используем атомные единицы.)

Чтобы перейти от дифференциального уравнения к алгебраическому, введем моменты порядка k

$$P_{\sigma\nu}^k = \langle \tilde{\psi}_0 | r^{\sigma-\nu} z^\nu | \psi_k \rangle, \quad (3)$$

где $|\tilde{\psi}_0\rangle = C \exp(-r/n)$, σ и ν — целые. В этом определении функция $|\tilde{\psi}_0\rangle$ содержит только экспоненциальный множитель невозмущенной волновой функции, несущий ее масштаб и не имеющий узлов. (Заметим, что общий нормировочный множитель всех моментов может быть произвольным.) Так же, как было сделано в работе [2], умножим уравнение (2) слева на $\langle \tilde{\psi}_0 | r^{\sigma-\nu} z^\nu$ и воспользуемся тем, что гамильтониан может действовать налево на известные в явном виде функции. В результате получается рекуррентное соотношение для моментов порядка k :

$$\frac{(\sigma - \nu)(\sigma + \nu + 1)}{2} P_{\sigma-2,\nu}^k + \frac{\nu(\nu - 1)}{2} P_{\sigma-2,\nu-2}^k - \frac{\sigma + 1 - n}{n} P_{\sigma-1,\nu}^k + P_{\sigma\nu}^0 E_k = R_{\sigma\nu}^{k-1}, \quad (4)$$

где

$$R_{\sigma\nu}^{k-1} \equiv \frac{1}{8} (P_{\sigma+2,\nu}^{k-1} - P_{\sigma+2,\nu+2}^{k-1}) - \sum_{j=1}^{k-1} E_j P_{\sigma\nu}^{k-j}.$$

Правая часть соотношения (4) содержит моменты только предшествующих порядков. Коэффициент E_k , который мы называем гипервосприимчивостью порядка k , также выражается через моменты предшествующих порядков. Это соотношение вытекает из (4) и будет написано ниже, отдельно для каждого из исследуемых случаев.

Аналогично можно рассмотреть другое возмущение того же состояния, если это возмущение имеет вид многочлена от r и z . Для этого достаточно только изменить правую часть в соотношении (4). Выражение в скобках в правой части, представляющее вклад магнитного поля, заменяется другой функцией моментов предыдущих порядков, порождаемой новым возмущением.

Последовательность опирающихся на соотношение (4) вычислений можно сделать более наглядной, если изобразить на плоскости решетку точек с целочисленными координатами столбцов σ и строк ν . Индексы моментов, необходимых для вычисления поправок к энергии и к волновой функции, расположены на этой решетке в секторе $\sigma \geq \nu - 1$, $\nu \geq 0$. В общем случае соотношение (4) связывает моменты порядка k ,

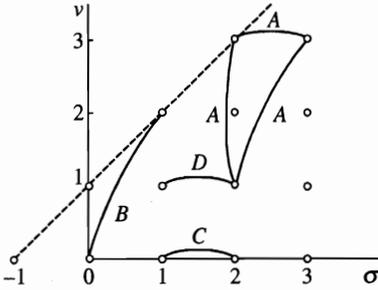


Рис. 1. Индексы моментов порядка k , связываемых основным рекуррентным соотношением. Каждая из линий A, B, C, D представляет один из характерных случаев

индексы которых находятся в вершинах треугольника (см. пример A на рис. 1). В результате поступательного перемещения этого треугольника по решетке по очереди возникают все заключенные в соотношении (4) связи между моментами. В левой части равенства (4) выпадает первое слагаемое, если подставить $\sigma = \nu$. При этом треугольник (пример A) вырождается в отрезок, начинающийся на штриховой линии $\sigma = \nu - 1$ и представляющий соотношение между двумя моментами из разных строк (пример B). Соотношение (4) связывает моменты попарно также вдоль каждой из строк с $\nu = 0$ и $\nu = 1$ (примеры C и D). В этих случаях из левой части (4) выпадает второе слагаемое. С последовательного заполнения слева направо строк с $\nu = 0$ и $\nu = 1$ начинается вычисление моментов в каждом порядке k . Начальный (левый) элемент третьей строки вычисляется с помощью соотношения (4) между парой моментов (см. пример B на рис. 1), а следующие элементы этой строки получают из «треугольного» соотношения (вида A на рис. 1) и т. д.

При $k = 0$, как показывает прямое интегрирование, среди моментов $\langle \bar{\psi}_0 | r^{\sigma-\nu} z^\nu | n, l \rangle$ равны нулю те, для которых $l - 1 \leq \sigma < n - 2$. Если возмущение четно, как в случае эффекта Зеемана, то все поправки к волновой функции имеют одинаковую четность. Поэтому во всех порядках теории возмущений обращаются в нуль те моменты, у которых нечетна сумма $\nu + l$.

3. ИЗОЛИРОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Магнитное поле не смешивает состояния с противоположной четностью, поэтому кроме основного состояния должны рассматриваться как невырожденные также $2s$ -, $2p$ - и $3p$ -состояния. Покажем, как работает метод моментов в последнем случае. Только моменты с нечетными значениями ν могут отличаться от нуля. В нулевом порядке

$$P_{\sigma, 2\kappa+1}^0 = -\frac{\sigma(\sigma+3)!}{18(2\kappa+3)} \left(\frac{3}{2}\right)^\sigma, \quad \kappa \text{ — целое.} \tag{5}$$

В следующих порядках накладывается дополнительное требование: поправки к функции $|\psi_0\rangle$ должны быть ей ортогональны: $\langle \psi_0 | \psi_k \rangle = \delta_{0,k}$. Это условие — стандартный элемент теории возмущений Бриллюэна–Вигнера (см., например, [21]). Оно применялось в работе [2]. В случае $3p$ -состояния оно принимает вид следующего дополнительного соотношения между моментами:

$$P_{11}^k - \frac{1}{6} P_{21}^k = \delta_{0,k}. \tag{6}$$

Чтобы получить формулу для E_k , подставим в рекуррентное соотношение (4) сначала $\nu = 1, \sigma = 1$, а затем $\nu = 1, \sigma = 2$. Решением полученной системы двух линейных уравнений служит

$$E_k = R_{11}^{k-1} - \frac{1}{6}R_{21}^{k-1} = \frac{1}{8}(P_{31}^{k-1} - P_{33}^{k-1}) - \frac{1}{48}(P_{41}^{k-1} - P_{43}^{k-1}), \quad (7)$$

$$P_{01}^k = 5R_{11}^{k-1} - \frac{1}{3}R_{21}^{k-1}. \quad (8)$$

Сумма, содержащая гипервосприимчивости предыдущих порядков, выпала из окончательного выражения для E_k благодаря условию ортогональности (6).

Равенства (4), (6) и (7) образуют замкнутую систему рекуррентных соотношений. В каждом порядке $k \geq 1$ вычисления происходят в такой последовательности. Сначала с помощью формулы (7) вычисляется E_k . На следующем шаге в рекуррентное соотношение (4) подставляются $\nu = 1$ и $\sigma = 3$. В таком виде оно вместе с условием ортогональности (6) образует систему уравнений, из которой получаются начальные элементы строки моментов с $\nu = 1$:

$$P_{11}^k = \frac{1}{3}(R_{31}^{k-1} - P_{31}^0 E_k) = \frac{1}{6}P_{21}^k.$$

Последовательно увеличивая σ на единицу, нетрудно с помощью соотношения (4) дойти до необходимого граничного момента этой строки. Подставив затем в (4) $\nu = 3$ и $\sigma = 3$, получим начальный момент следующей строки:

$$P_{33}^k = 3(3P_{11}^k - R_{33}^{k-1} + P_{33}^0 E_k)$$

и т. д.

Граничные моменты, т. е. моменты с максимальными в данном порядке k индексами σ и ν , определяются следующими условиями. Чтобы вычислить гипервосприимчивость высокого порядка K , потребуются моменты $P_{\sigma\nu}^1$ в области $\nu - 1 \leq \sigma \leq 3K, 0 \leq \nu \leq 2K$, моменты $P_{\sigma\nu}^2$ в области $\nu - 1 \leq \sigma \leq 3K - 3, 0 \leq \nu \leq 2K - 2$ и т. д.

Несколько проще происходит вычисление коэффициентов E_k для остальных изолированных состояний.

4. ВЫРОЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ В МЕТОДЕ МОМЕНТОВ

Рассмотрим в качестве примера пару состояний $|3s\rangle$ и $|3d\rangle$, расщепляемых магнитным полем. Учитывая вырождение, с помощью функций вида

$$|\psi_0\rangle = \cos \alpha |3s\rangle + \sin \alpha |3d\rangle, \quad |\tilde{\psi}_0\rangle \sim e^{-\tau/3},$$

нетрудно получить моменты нулевого порядка:

$$P_{\sigma,2\kappa}^0 = \frac{(\sigma + 2)!}{54(2\kappa + 1)} \left(\frac{3}{2}\right)^\sigma \left[\sigma(\sigma + 1) - \frac{\kappa(\sigma + 3)(\sigma + 4)}{2\kappa + 3} \xi \right], \quad (9)$$

где

$$\xi = \sqrt{2} \operatorname{tg} \alpha.$$

Во всех порядках теории возмущений равны нулю моменты в нечетных строках: $P_{\sigma, 2k+1}^k = 0$. Условие ортогональности поправок к волновой функции ее нулевому приближению эквивалентно следующему соотношению между моментами:

$$12P_{10}^k - \frac{1}{3}(4 + \xi)P_{20}^k + \xi P_{22}^k = 18P_{00}^k, \quad k \geq 1. \quad (10)$$

Гипервосприимчивость E_k можно выразить через моменты предшествующих порядков двумя независимыми способами.

а) Из соотношения (4) при $\nu = 0$ и $\sigma = 0$ получается момент $P_{-1,0}^k$, необходимый на следующем шаге для системы линейных уравнений. Заметим, что коэффициент E_k выпал из уравнения (4) в силу того, что $P_{00}^0 = 0$. Система уравнений, содержащая E_k , возникает, если в равенстве (4) положить сначала $\nu = 0$, $\sigma = 1$, а затем $\nu = 0$, $\sigma = 2$. Ее решение:

$$E_k^{(a)} = \frac{9}{2}R_{00}^{k-1} - 3R_{10}^{k-1} + \frac{1}{3}R_{20}^{k-1}, \quad (11a)$$

$$P_{00}^k = -9R_{00}^{k-1} + 6R_{10}^{k-1} - \frac{1}{3}R_{20}^{k-1}. \quad (12)$$

Полученный попутно момент P_{00}^k подставляется в правую часть условия ортогональности (10).

б) Подставив в соотношение (4) $\nu = 2$ и $\sigma = 2$, а также найденное значение P_{00}^k , получим второе независимое выражение для E_k :

$$E_k^{(b)} = \frac{1}{2}(9R_{00}^{k-1} - 6R_{10}^{k-1} + \frac{1}{3}R_{20}^{k-1} + R_{22}^{k-1}). \quad (11b)$$

Формулы (11a) и (11b) дают единое значение магнитной восприимчивости E_1 при двух значениях ξ :

$$\xi = \xi_{1,2} = \frac{-13 \pm 3\sqrt{41}}{10} \quad (13)$$

— это естественный результат, который в теории возмущений Рэлея–Шредингера следует из секулярного уравнения. В дальнейшем обозначение $3s$ сохраняется для состояния с небольшой примесью d -волны и $\xi = \xi_1 = (3\sqrt{41} - 13)/10$, а $3d$ обозначает ортогональную этому состоянию смесь s - и d -волн. В следующих приближениях условие однозначности, накладываемое на гипервосприимчивость $(k+1)$ -го порядка, $E_{k+1}^{(a)} = E_{k+1}^{(b)}$, эквивалентно соотношению, связывающему семь неизвестных моментов порядка k . Еще одна связь между моментами — это условие ортогональности (10). Чтобы получить замкнутую систему, к условиям ортогональности и однозначности необходимо добавить еще семь уравнений, которые следуют из рекуррентного соотношения (4). Из полученной системы девяти уравнений достаточно определить только два момента: P_{10}^k и P_{22}^k . Затем с помощью уже известных моментов и соотношения (4) нетрудно последовательно вычислить все необходимые моменты данного порядка, проходя построчно решетку индексов, как в случае $3p$ -состояния.

Аналогично можно провести расчет для состояния с произвольным значением n . Отметим лишь ключевые элементы этих вычислений. Невозмущенная волновая функция имеет определенную четность и содержит g вырожденных по энергии слагаемых. В

каждом порядке $k \geq 1$ имеются две группы моментов. Рекуррентное соотношение (4) связывает между собой моменты $P_{\sigma\nu}^k$ с $\sigma < n - 2$ и отдельно моменты с $\sigma \geq n - 2$. Моменты из разных групп связываются рекуррентным соотношением только через моменты предшествующих порядков. На промежуточном этапе получаются g независимых выражений для коэффициента E_{k+1} и условия его однозначности позволяют выразить моменты $P_{\sigma\nu}^k$ из области $\sigma \geq n - 2$ через моменты предшествующих порядков.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ

5.1. Уровни энергии

Для всех уровней с $n \leq 3$ методом моментов мы получили зеемановские гипервосприимчивости E_k до 75-го порядка (см. табл. 1). Вычисления выполнялись с 32 десятичными знаками. Наблюдается полное согласие с результатами работы [8] и работы [7], содержащей первые пять коэффициентов E_k для основного состояния и по 3 начальных коэффициента для $2s$ - и $2p$ -состояний в форме рациональных дробей. В [9] было замечено расхождение между полученной в ней формулой для коэффициента E_2 и его значением при $l = 1$ в работе [7]. Это расхождение подтверждается. Из формулы работы [9] следует $E_2^{(2p)} = -45.556$; наш результат $E_2^{(2p)} = -42$ согласуется с [7].

Уровни энергии $E(\gamma)$ шести состояний, полученные суммированием соответствующих рядов теории возмущений с помощью аппроксимант Паде $[L/L](\gamma^2)$ и $[L/L-1](\gamma^2)$, представлены на рис. 2. Рисунок дает также представление об области сходимости аппроксимант Паде. Без разложения по \mathcal{H}^2 , с помощью метода сплайнов — одной из модификаций вариационного метода — собственные значения энергий обсуждаемых состояний были вычислены для некоторых значений \mathcal{H} в работе [22], они также показаны на рис. 2. Работа [22] имеет наилучшую среди всех непertурбативных расчетов точность, обеспечивающую восемь десятичных знаков для уровней энергии возбужденных состояний, и содержит сравнение большого числа предыдущих вычислений. Точность суммирования рядов теории возмущений с помощью аппроксимант Паде достаточно высока. При $\gamma \approx 1$ для $2s$ - и $3p$ -состояний устанавливаются 3–4 значащие цифры энергии уровня и не меньше двух десятичных знаков для остальных состояний. Сходимость резко улучшается с уменьшением γ , так что при $\gamma \leq 0.3$ точность сумм рядов теории возмущений выше точности вариационных расчетов [22].

В работе [23] для расчета эффекта Зеемана была разработана модификация размерного скейлинга, в которой малым параметром служит $\lambda = [1 + |m|]^{-1}$. Этот полуклассический метод удобен тем, что применим в широкой области значений внешнего поля. Суммированием разложения по λ энергия основного состояния была получена в [23] с точностью $\sim 10^{-5}$ как при $\gamma = 0.1$, так и при $\gamma = 1$. Наши вычисления дают энергию основного состояния с точностью $\sim 10^{-13}$ при $\gamma = 0.1$ и $\sim 10^{-1}$ при $\gamma = 1$.

Коэффициенты теории возмущений E_k с ростом порядка приближаются к асимптотике, главный член которой для эффекта Зеемана имеет вид [4, 5]

$$\tilde{E}_k = (-1)^{k+1} \frac{D_{nl}}{\pi^{2n+1/2}} \left(\frac{n^2}{\pi}\right)^{2k} \Gamma\left(2k + 2n - 1 + \frac{(-1)^l}{2}\right). \quad (14)$$

Для обсуждаемых уровней

$$D_{1s} = 32, \quad D_{2s} = 128, \quad D_{2p} = 64,$$

Таблица 1

Гипервосприимчивости атома водорода в магнитном поле

k	E_k		
	1s-состояние	2s-состояние	2p-состояние
1	$+2.5000 \cdot 10^{-1}$	$+3.5000 \cdot 10^0$	$+1.5000 \cdot 10^0$
2	$-2.7604 \cdot 10^{-1}$	$-1.5933 \cdot 10^2$	$-4.2000 \cdot 10^1$
3	$+1.2112 \cdot 10^0$	$+2.2508 \cdot 10^4$	$+4.2400 \cdot 10^3$
4	$-9.7554 \cdot 10^0$	$-5.5166 \cdot 10^6$	$-7.4365 \cdot 10^5$
5	$+1.8630 \cdot 10^2$	$+1.8817 \cdot 10^9$	$+1.8710 \cdot 10^8$
6	$-1.9593 \cdot 10^3$	$-8.2044 \cdot 10^{11}$	$-6.2321 \cdot 10^{10}$
7	$+4.2749 \cdot 10^4$	$+4.3896 \cdot 10^{14}$	$+2.6362 \cdot 10^{13}$
8	$-1.1869 \cdot 10^6$	$-2.8169 \cdot 10^{17}$	$-1.3804 \cdot 10^{16}$
9	$+4.0973 \cdot 10^7$	$+2.1373 \cdot 10^{20}$	$+8.7878 \cdot 10^{18}$
10	$-1.7252 \cdot 10^9$	$-1.8979 \cdot 10^{23}$	$-6.7029 \cdot 10^{21}$
25	$+4.9366 \cdot 10^{40}$	$+5.3146 \cdot 10^{73}$	$+6.0276 \cdot 10^{71}$
50	$-3.1317 \cdot 10^{109}$	$-1.8694 \cdot 10^{173}$	$-9.9461 \cdot 10^{170}$
75	$+3.3150 \cdot 10^{189}$	$+5.8114 \cdot 10^{283}$	$+2.0188 \cdot 10^{281}$
	3s-состояние	3p-состояние	3d-состояние
1	$+1.9579 \cdot 10^1$	$+9.0000 \cdot 10^0$	$+5.1715 \cdot 10^0$
2	$-7.9926 \cdot 10^3$	$-3.5311 \cdot 10^3$	$-1.0174 \cdot 10^3$
3	$+9.8654 \cdot 10^6$	$+3.4481 \cdot 10^6$	$+6.4414 \cdot 10^5$
4	$-2.0927 \cdot 10^{10}$	$-5.4496 \cdot 10^9$	$-8.6478 \cdot 10^8$
5	$+5.8826 \cdot 10^{13}$	$+1.1757 \cdot 10^{13}$	$+1.6415 \cdot 10^{12}$
6	$-2.0349 \cdot 10^{17}$	$-3.1806 \cdot 10^{16}$	$-4.1602 \cdot 10^{15}$
7	$+8.3124 \cdot 10^{20}$	$+1.0348 \cdot 10^{20}$	$+1.3551 \cdot 10^{19}$
8	$-3.9194 \cdot 10^{24}$	$-3.9589 \cdot 10^{23}$	$-5.4574 \cdot 10^{22}$
9	$+2.1055 \cdot 10^{28}$	$+1.7580 \cdot 10^{27}$	$+2.6300 \cdot 10^{26}$
10	$-1.2786 \cdot 10^{32}$	$-8.9851 \cdot 10^{30}$	$-1.4785 \cdot 10^{30}$
25	$+1.3794 \cdot 10^{94}$	$+2.5255 \cdot 10^{92}$	$+1.0620 \cdot 10^{92}$
50	$-9.3229 \cdot 10^{211}$	$-7.3330 \cdot 10^{209}$	$-6.1021 \cdot 10^{209}$
75	$+2.8054 \cdot 10^{340}$	$+1.3961 \cdot 10^{338}$	$+1.7341 \cdot 10^{338}$

$$D_{3s} = \frac{2^{15}}{3^4} \left(\alpha_1 - \frac{\alpha_2}{2\sqrt{2}} \right)^2, \quad D_{3d} = \frac{2^{15}}{3^4} \left(\alpha_2 + \frac{\alpha_1}{2\sqrt{2}} \right)^2,$$

где

$$\alpha_1 = - \left(\frac{1}{2} + \frac{13}{6\sqrt{41}} \right)^{1/2}, \quad \alpha_2 = \left(\frac{1}{2} - \frac{13}{6\sqrt{41}} \right)^{1/2}.$$

Этот результат был получен методом, которым пользовались Бендер и Ву [24]. Сначала в квазиклассическом приближении вычислялась проникаемость барьера при мнимом значении магнитного поля, затем применялось дисперсионное соотношение по

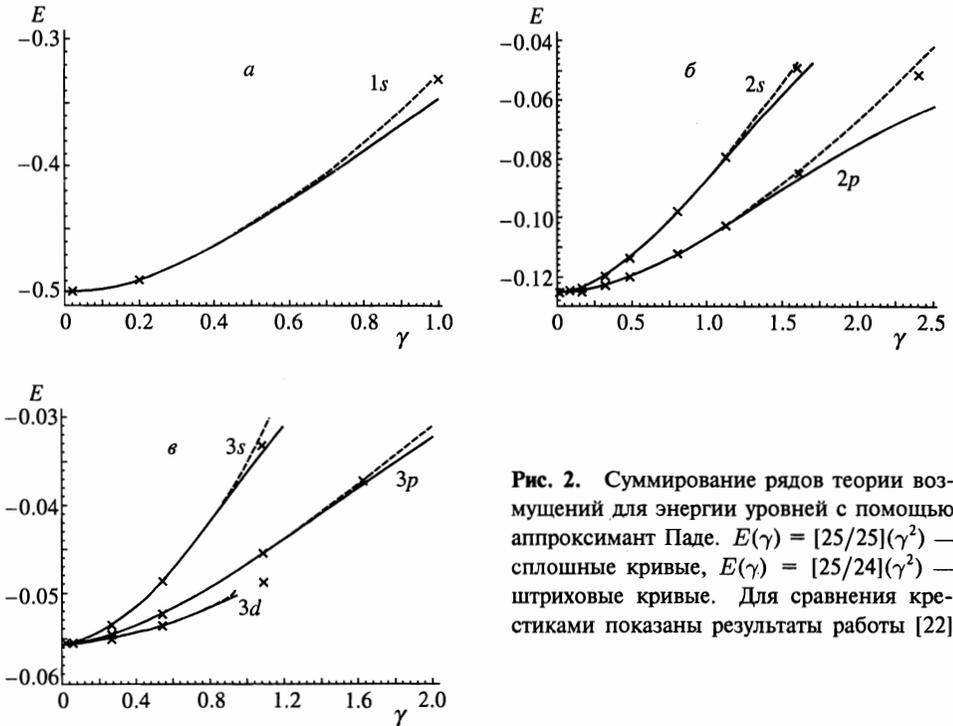


Рис. 2. Суммирование рядов теории возмущений для энергии уровней с помощью аппроксимант Паде. $E(\gamma) = [25/25](\gamma^2)$ — сплошные кривые, $E(\gamma) = [25/24](\gamma^2)$ — штриховые кривые. Для сравнения крестиками показаны результаты работы [22]

\mathcal{H}^2 . Строго говоря, по условиям работы [5], выражение (14) не относится к случаю $3p$ -состояния. Однако можно предположить, что формула (14) охватывает все шесть обсуждаемых здесь состояний, а коэффициент D_{3p} можно подобрать из сравнения E_k и \bar{E}_k высоких порядков. Это дает $D_{3p} = 2^{13}/3^3$. Выход точных коэффициентов E_k на асимптотику (14) иллюстрирует рис. 3.

В работах [4, 5] были получены также поправки к асимптотике \bar{E}_k для некоторых состояний, среди которых отсутствовали $2s$ -, $2p$ - и $3p$ -состояния. Написав поправки в виде

$$\frac{E_k}{\bar{E}_k} = c_0 + \frac{c_1}{2k} + \frac{c_2}{(2k)^2} + \dots, \tag{15}$$

нетрудно, следуя методу работы [24], найти коэффициенты c_i (см. табл. 2). Во всех рассмотренных случаях $|c_0 - 1| < 10^{-6}$. С увеличением количества вычисляемых в (15) поправок точность определения коэффициентов c_i увеличивается. Устойчивость значений степенных поправок при переходе к большему их числу подтверждает правильность определения главного члена асимптотики \bar{E}_k для $3p$ -состояния. Напомним, что благодаря дисперсионным соотношениям по \mathcal{H}^2 [5] коэффициенты c_i связаны с поправками к квазиклассическому приближению для проницаемости барьера при $\mathcal{H}^2 < 0$. Прямое вычисление квазиклассических поправок — достаточно трудоемкая задача.

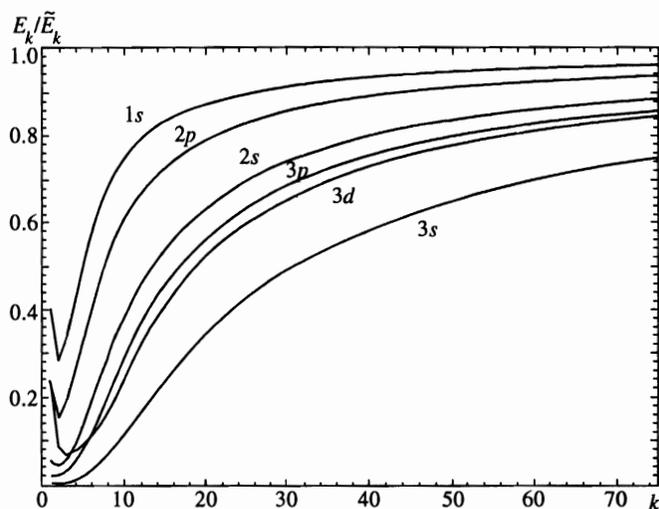


Рис. 3. Выход точных гипервосприимчивостей E_k на соответствующие асимптотики \bar{E}_k для шести состояний атома водорода

Таблица 2

Коэффициенты c_i степенных поправок к асимптотикам \bar{E}_k гипервосприимчивостей атома водорода

Состояние	c_1	c_2	c_3	c_4
1s	-2.61829	+1.282	-2.6	-11
2s	-8.938	+37.44	-121	+2.7 · 10 ²
2p	-4.6065	+8.24	-14.3	-4
3p	-11.227	+59.5	-239	+6 · 10 ²

5.2. Волновые функции

По аналогии с ангармоническим осциллятором [2], поправка $|\psi_k\rangle$ к кулоновской волновой функции имеет вид многочлена (от r и $\cos\theta$), умноженное на экспоненту $|\bar{\psi}_0\rangle$. Возмущение полиномиально, а оператор в левой части уравнения (2) не меняет указанную структуру функции $|\psi_k\rangle$. Для основного состояния

$$|\psi_k\rangle = \left(\sum_{j=0}^k \sum_{i=2j}^{3k} a_{ij}^{(k)} r^i \cos^{2j} \theta \right) |\bar{\psi}_0\rangle \equiv \left(\sum_{j=0}^k \sum_{i=2j}^{3k} a_{ij}^{(k)} r^{i-2j} z^{2j} \right) |\bar{\psi}_0\rangle. \quad (16)$$

Поясним происхождение пределов суммирования. Зависимость от угла θ вносит только входящее в \hat{H}_1 выражение $r^2 \cos^2 \theta$, поэтому минимальная степень радиуса во внутренней сумме соотношения (16) совпадает со степенью $\cos \theta$, а максимальная степень $\cos^2 \theta$ совпадает с порядком теории возмущений. С помощью уравнения (2) можно проверить,

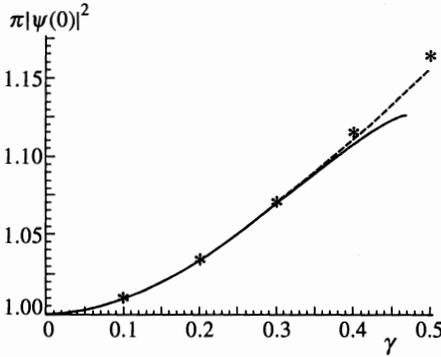


Рис. 4. Вычисление волновой функции основного состояния методом моментов. Сплошная кривая получена с помощью аппроксимант Паде [9/9](γ^2), штриховая – с помощью [9/8](γ^2). Звездочками отмечены результаты работы [25]

что максимальная степень радиуса в $|\psi_k\rangle$ на три единицы больше, чем в $|\psi_{k-1}\rangle$. Из соотношения (16) получается система линейных уравнений для коэффициентов $a_{ij}^{(k)}$:

$$\sum_{j=0}^k \sum_{i=2j}^{3k} P_{i+\alpha, j+\beta}^0 a_{ij}^{(k)} = P_{\alpha\beta}^k, \tag{17}$$

$$2\beta \leq \alpha \leq 3k, \quad 0 \leq \beta \leq k.$$

Вместо указанных здесь значений индексов α и β можно выбрать другой их набор, дающий $(2k + 1)(k + 1)$ независимых уравнений. Эта возможность полезна для контроля точности вычислений. Мы проверяли также ортогональность полученных поправок (16) к функции $|\psi_0\rangle$. В наших вычислениях ортогональность сохранялась с разумной точностью до 18-го порядка теории возмущений. До второго порядка теории возмущений поправки к волновым функциям приведены в работе [7]. При их сравнении с результатами наших вычислений было замечено единственное расхождение. Коэффициент при $r^3\gamma^2$ в [7] имеет ошибочный знак, и это порождает неортогональность поправки первого порядка к невозмущенной волновой функции в этой работе.

В методе моментов мы вычислили значения $|\psi(0)|^2$, просуммировав с помощью аппроксимант Паде ряды теории возмущений для нормировочного коэффициента и для самой волновой функции. Результаты представлены на рис. 4. Видно, что 18 порядков теории возмущений позволяют продвинуться до $\gamma \approx 0.4$. При этом сохраняется согласие с работой [25], где волновая функция основного состояния вычислялась другим методом с точностью $\sim 10^{-3}$ при интересующих нас значениях магнитного поля.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хорошее согласие между собственными значениями энергии, полученными суммированием рядов теории возмущений, и соответствующими результатами независимых расчетов вариационного типа, с одной стороны, подтверждает правильность вычисления самих коэффициентов теории возмущений, а с другой, говорит об отсутствии непертурбативных вкладов в энергию рассмотренных состояний (способ суммирования выбран правильно).

Изложенное здесь исследование демонстрирует высокую эффективность метода моментов Адера. Отметим особенности метода, которые позволили получить высокие порядки теории возмущений для эффекта Зеемана. Эти особенности могут быть полезны при решении других задач теории возмущений.

1) Достаточно простые рекуррентные соотношения получены без разделения переменных в исходном уравнении. С их помощью процедура вычисления поправок становится чисто алгебраической.

2) Узлы волновой функции в методе моментов явно не заметны и не усложняют вычисления. Это дает возможность рассматривать возбужденные состояния.

3) Вырождение уровней, как здесь впервые продемонстрировано, не мешает применению метода моментов, хотя и приводит к более громоздкой процедуре разрешения рекуррентных соотношений.

4) Кроме того, набор моментов, полученных при определении гипервосприимчивостей, содержит информацию о волновой функции. Поправки к кулоновской волновой функции, как и поправки к уровням энергии, получаются чисто алгебраически.

Мы ограничились здесь случаем $m = 0$. Очевидно, что у любого состояния с ненулевой проекцией момента парамагнитная часть возмущения $0.5\gamma\hat{L}_z$ вследствие ее диагональности просто сдвигает энергию на $(m/2)\gamma$ и не меняет волновую функцию. Влияние на это состояние диамагнитной части возмущения $\gamma^2\hat{H}_1$ можно вычислить методом моментов, опираясь на рекуррентное соотношение, аналогичное соотношению (4).

Как уже упоминалось, применение метода моментов к атому водорода не ограничивается эффектом Зеемана. Любое возмущение вида

$$V(r) = \sum b_{ij} r^{i-j} z^j$$

приводит к рекуррентному соотношению (4) с очевидным простым изменением правой части. Так можно, например, учесть совместное действие внешних электрического и магнитного полей, однородных или имеющих вид конечной суммы мультиполей.

В заключение мы хотели бы выразить глубокую благодарность В. С. Попову, прочитавшему рукопись и сделавшему ряд ценных замечаний, способствовавших ее улучшению. Мы также благодарны В. Г. Ксензову за полезные обсуждения и В. Д. Мухому и Б. М. Карнакову за интерес к работе. Один из авторов (В. А. Г.) признателен В. Л. Моргунову и А. А. Панфилову за обсуждения некоторых вопросов, относящихся к численным расчетам.

Литература

1. В. С. Попов, А. В. Сергеев, Письма в ЖЭТФ **63**, 398 (1996).
2. J. P. Ader, Phys. Lett. A **97**, 178 (1983).
3. D. Z. Goodson and D. R. Herschbach, Phys. Rev. Lett. **58**, 1628 (1987).
4. B. G. Adams, J. E. Avron, J. Čížek et al., Phys. Rev. A **21**, 1914 (1980).
5. J. E. Avron, Ann. Phys. **131**, 73 (1981).
6. J. Čížek and E. R. Vrscaj, Int. J. Quant. Chem. **21**, 27 (1982).
7. A. Galindo and P. Pascual, Nuovo Cimento B **34**, 155 (1976).
8. B. R. Johnson, K. F. Scheibner, and D. Farrelly, Phys. Rev. Lett. **51**, 2280 (1983).

9. A. V. Turbiner, Z. Phys. A **308**, 111 (1982).
10. А. В. Турбинер, ЖЭТФ **84**, 1329 (1983).
11. В. С. Поликанов, ЖЭТФ **52**, 1326 (1967).
12. В. С. Пекар, ТМФ **9**, 140 (1971).
13. A. D. Dolgov and V. S. Popov, Phys. Lett. B **86**, 185 (1979).
14. Y. Aharonov and C. K. Au, Phys. Rev. A **20**, 2245 (1979); **22**, 328 (1980).
15. V. Privman, Phys. Rev. A **22**, 1833 (1980).
16. В. Л. Елецкий, В. С. Попов, ДАН СССР **250**, 74 (1980). S. P. Alliluev, V. L. Eletsky, and V. S. Popov, Phys. Lett. A **73**, 103 (1979).
17. С. П. Аллилуев, В. М. Вайнберг, В. Л. Елецкий, В. С. Попов, ЖЭТФ **82**, 77 (1982).
18. R. J. Svenson and S. H. Danforth, J. Chem. Phys. **57**, 1734 (1972).
19. J. Killingbeck, Phys. Lett. A **65**, 87 (1978).
20. В. С. Лисица, УФН **153**, 379 (1987).
21. Дж. Займан, *Современная квантовая теория*, Мир, Москва (1971), гл. 3.
22. Jang-Huar Wang and Chen-Shiung Hsue, Phys. Rev. A **52**, 4508 (1995).
23. C. M. Bender, L. D. Mlodinov, and N. Papanicolaou, Phys. Rev. A **25**, 1305 (1982).
24. C. M. Bender and T. T. Wu, Phys. Rev. D **7**, 1620 (1973).
25. D. Cabib, E. Fabri, and G. Fiorio, Nuovo Cimento **10**, 185 (1972).

Примечание при корректуре (1 декабря 1997 г.). Более подробная таблица значений гипервосприимчивости E_k приведена нами в электронной публикации Physics/9708005.