

О СПЕКТРЕ АТОМА ВОДОРОДА В СВЕРХСИЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В. С. Попов^a, Б. М. Карнаков^{b}*

^a *Институт теоретической и экспериментальной физики
117218, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 апреля 2011 г.

Рассмотрены различные подходы к вычислению энергий основного и возбужденных уровней атома водорода, находящегося в сверхсильном магнитном поле B , намного превышающем поле $B_a = m_e^2 e^3 c / \hbar^3 \sim 10^9$ Гс. Обсуждается влияние поляризации вакуума и аномального магнитного момента электрона на положение атомных уровней. Эффекты поляризации вакуума пренебрежимо малы при $B < 10^{15}$ Гс, однако становятся существенными в полях $B \gg 10^{16}$ Гс и приводят к качественному изменению атомного спектра в этой области. Обсуждается различие в поведении четных и нечетных уровней при $B \gg B_a$, сделаны уточнения формул для энергии нечетных уровней в зависимости от поля B .

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовомеханическая задача о спектре атома водорода в магнитном поле $B \gg B_a$, где $B_a = m_e^2 e^3 c / \hbar^3 \sim 10^9$ Гс, представляет большой интерес для астрофизики нейтронных звезд: пульсаров с полями $B \sim 10^{11}$ – 10^{13} Гс [1, 2] и магнитаров — специального класса нейтронных звезд, в которых магнитные поля могут достигать рекордных значений вплоть до 10^{15} Гс [3]. Эта задача рассматривалась многими авторами [4–17], начиная с пионерской работы Шиффа и Снайдера [4], в которой было введено адиабатическое приближение, использованное всеми последующими авторами. Поскольку переменные в уравнении Шредингера не разделяются, применялись различные численные методы (см. работы [6–13] и указанные в них ссылки); имеются также аналитические формулы [5, 13–17] для энергии уровней. Возникает вопрос о точности различных приближений и об области их применимости, слабо освещенный в литературе, что и является предметом данной работы. Мы обсудим также влияние поляризации вакуума и аномального магнитного момента электрона на положение атомных уровней и недавно обнаруженный [18–20] эффект «замерзания» энергий четных уровней в сверхсиль-

ных полях $B \gg 10^{16}$ Гс. Получены более точные асимптотические разложения для энергии нечетных уровней атома водорода, обсуждается качественное различие в ходе четных и нечетных уровней с ростом магнитного поля.

В дальнейшем, как правило, $\hbar = c = 1$, m_e — масса электрона, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — магнитное квантовое число (проекция орбитального момента электрона на направление магнитного поля), $B_a = m_e^2 e^3 = 2.35 \cdot 10^9$ Гс — атомная единица напряженности магнитного поля, $\mathcal{H} = B/B_a$ — безразмерное приведенное поле, $B_{cr} = \alpha^{-2} B_a = 4.41 \cdot 10^{13}$ Гс — критическое, или швингеровское поле в КЭД [21–23], $a_B = 1/m_e e^2$ — радиус Бора, $a_H = (eB)^{-1/2}$ — магнитная длина, или радиус Ландау, $\omega_L = eB/m_e$ — ларморовская, или циклотронная частота, $\alpha = e^2 = 1/137$ (гауссова система единиц). При этом

$$a_H = \frac{a_B}{\sqrt{\mathcal{H}}} = \begin{cases} a_B, & B = B_a, \\ \alpha a_B, & B = B_{cr}, \end{cases} \quad (1.1)$$

$$\omega_L = m_e e^4 \mathcal{H} = \begin{cases} m_e e^4 = 2Ry, & B = B_a, \\ m_e, & B = B_{cr}, \end{cases} \quad (1.2)$$

а энергии атомных уровней равны

$$E_n = -\lambda_n^2 Ry, \quad (1.3)$$

*E-mail: karnak@theor.mephi.ru

где $Ry = m_e e^4 / 2$ и λ — безразмерный импульс связанного состояния.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Сверхсильное магнитное поле сжимает атом: его поперечный к полю размер $a_{\perp} \sim a_H$ сокращается как $1/\sqrt{\mathcal{H}}$, а продольный размер a_{\parallel} сокращается лишь логарифмически [14]:

$$a_{\parallel}/a_{\perp} \sim \sqrt{\mathcal{H}}/\ln \mathcal{H} \gg 1. \quad (2.1)$$

Распределение электронной плотности $|\psi(\mathbf{r})|^2$ принимает сигарообразную или даже игольчатую форму. Поэтому электрон оказывается, в среднем, ближе к ядру, чем в свободном ($B = 0$) атоме, вследствие чего энергия связи уровней (особенно основного) возрастает.

При $B \sim B_{cr}$ поперечное движение электрона является релятивистским, в то время как продольное движение носит нерелятивистский характер, и к нему применимо адиабатическое приближение [4, 14]. Это позволяет получить асимптотические (при $\mathcal{H} \gg 1$) формулы для спектра уровней в таком поле. Напомним некоторые сведения об уровнях атома водорода в магнитном поле.

Спектр энергий уравнения Дирака для электрона в чисто магнитном поле B (постоянном и однородном в пространстве) имеет вид [24]

$$\varepsilon_{N\sigma_z p_z}^2 = m_e^2 + p_z^2 + (2N + 1 + \sigma_z)eB, \quad (2.2)$$

$$N = 0, 1, 2, \dots,$$

где p_z — импульс электрона вдоль магнитного поля, $\sigma_z = \pm 1$ — удвоенная проекция спина на направление магнитного поля (ось z). При $B \gg B_{cr}$ все электронные состояния являются ультрарелятивистскими: $eB \gg m_e^2$, $\varepsilon \gg m_e$, за единственным исключением основного уровня Ландау ($N = 0$) с $\sigma_z = -1$, для которого $\varepsilon^2 = m_e^2 + p_z^2$ независимо от B .

Уравнение Шредингера в данной задаче удобно решать в цилиндрических координатах (ρ, z) с калибровкой $\mathbf{A} = [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]/2$ [17, § 112]. При этом в адиабатическом приближении решение уравнения Шредингера записывается в виде

$$\Psi_{nn_{\rho}\sigma_z} = R_{n_{\rho}m}(\rho)\psi_{nn_{\rho}m}(z)\chi_{\sigma_z}, \quad (2.3)$$

где $R_{n_{\rho}m}(\rho)$ — волновая функция поперечного движения электрона, χ_{σ_z} — его спиновая функция, а $\psi_{nn_{\rho}m}(z)$ — волновая функция продольного движения электрона в эффективном потенциале

$$U_{eff}(z) = -e^2 \int \frac{|R_{n_{\rho}m}(\rho)|^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} d^2\rho, \quad (2.4)$$

удовлетворяющая уравнению

$$-\frac{1}{2m_e}\psi''(z) + U_{eff}(z)\psi(z) = E_n\psi(z).$$

Собственные значения энергии равны

$$E_{nn_{\rho}\sigma_z}[\text{Ry}] = (2N + 1 + \sigma_z)\mathcal{H} - \lambda_{nn_{\rho}m}^2, \quad (2.5)$$

где $N = n_{\rho} + (m + |m|)/2 = 0, 1, 2, \dots$, n_{ρ} — радиальное квантовое число волновой функции $R_{n_{\rho}m}(\rho)$ поперечного движения и n — квантовое число для продольного (вдоль магнитного поля) движения в эффективном потенциале. Заметим, что для основного уровня Ландау ($N = 0$) энергия нулевых колебаний осциллятора взаимно сокращается с магнитной энергией спина:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_L = \frac{e\hbar B}{2m_e c} = \mu_B B. \quad (2.6)$$

Далее в формулах (2.3)–(2.5) полагаем $N = n_{\rho} = 0$, $m = 0, -1, -2, \dots$ и $\sigma_z = -1$. Такие состояния¹⁾ имеют нерелятивистскую энергию $E = -\lambda^2 Ry$ даже при $B \gg B_{cr}$, и к ним применимо уравнение Шредингера. Напомним, что в чисто магнитном поле спектр энергий поперечного движения обладает вырождением бесконечной кратности: энергия не зависит от магнитного квантового числа $m = 0, -1, -2, \dots$. Каждому такому состоянию в атоме водорода в магнитном поле отвечает бесконечная совокупность («башня» [20]) связанных состояний, примыкающих к LLL-уровню и имеющих энергию связи, малую по сравнению с m_e . Этими состояниями мы и будем заниматься.

3. АНАЛИТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ АТОМНОГО СПЕКТРА (ЧЕТНЫЕ УРОВНИ)

В литературе предложено несколько аналитических формул для энергий уровня атома водорода в зависимости от сильного магнитного поля $B \gg B_a$, связанных с использованием адиабатического приближения. Перечислим их и сравним с данными численных расчетов.

¹⁾ Состояния LLL (the lowest Landau level) по обозначению работы [20]. Релятивистские поправки к энергии этих уровней, вычисленные на основе уравнения Дирака [8], оказались незначительными (порядка 10^{-5} от значения λ^2 при $B \sim 10^{13}$ Гс).

3.1. Основной уровень

Согласно [17, § 112, задача 3], энергия связи основного уровня равна²⁾

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} m_e e^4 \ln^2 \frac{B}{m_e^2 e^3}, \quad \text{или} \quad \lambda = \ln \mathcal{H} \quad (3.1)$$

(отметим, что при $B = B_{cr}$ имеем $\mathcal{H} = \alpha^{-2}$ и, согласно (3.1), $\lambda = 2 \ln(1/\alpha) = 9.84$).

Аналогичное уравнение (3.28) из работы Лоудона [5] можно переписать в виде

$$\ln \mathcal{H} = \lambda + 2 \ln(2\lambda). \quad (3.2)$$

Близкое выражение приведено в работе [7] и отличается от (3.2) только слагаемым $\gamma - \ln 2 = -0.116$ в правой части этого уравнения ($\gamma = -\psi(1) = 0.5772 \dots$ — постоянная Эйлера).

В статье [14] получено уравнение (см. (2.13) в [14])

$$\ln \mathcal{H} = \lambda + 2[\ln \lambda + \psi(1 - \lambda^{-1})] + c_0, \quad (3.3)$$

где $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ — логарифмическая производная гамма-функции, $c_0 = 3\gamma + \ln 2 = 2.4248$ (γ — постоянная Эйлера).

Укажем еще формальную (при $\mathcal{H} \rightarrow \infty$) асимптотику последнего уравнения,

$$\tilde{\lambda}_0 \approx \ln(\mathcal{H}/\ln^2 \mathcal{H}), \quad \tilde{\varepsilon}_0 = \tilde{\lambda}_0^2/2, \quad (3.4)$$

которая отличается от (3.1) функционально, причем

$$\frac{\tilde{\varepsilon}_0}{\varepsilon_0} = 1 - 4 \frac{\ln \ln \mathcal{H}}{\ln \mathcal{H}} + O\left(\frac{1}{\ln \mathcal{H}}\right), \quad \varepsilon_0 - \tilde{\varepsilon}_0 \approx 4 \ln \ln \mathcal{H}.$$

Хотя формально $\varepsilon_0/\tilde{\varepsilon}_0 \rightarrow 1$ при $\mathcal{H} \rightarrow \infty$, однако выход на этот предел происходит чрезвычайно медленно в полях, не имеющих реального физического смысла³⁾. В дальнейшем мы увидим, что как (3.1), так и (3.4) не являются истинными асимптотиками для энергии основного уровня.

Наконец, в работе [16] приведено уравнение

$$\ln \mathcal{H} = \lambda + 2 \psi(1 - \lambda^{-1}). \quad (3.5)$$

Для глубокого, $\lambda \gg 1$, уровня это уравнение принимает вид

$$\lambda = \ln \mathcal{H} + 2\gamma \quad (3.5')$$

и отличается от (3.1) только сдвигом (рис. 1).

²⁾ Как отмечено в [17], с «логарифмической точностью».

³⁾ Так, например, различие между ε_0 и $\tilde{\varepsilon}_0$ даже при $B = 10^8 B_{cr} \sim 10^{21}$ Гс порядка 30%, причем разность $\varepsilon_0 - \tilde{\varepsilon}_0$ неограниченно возрастает при $B \rightarrow \infty$.

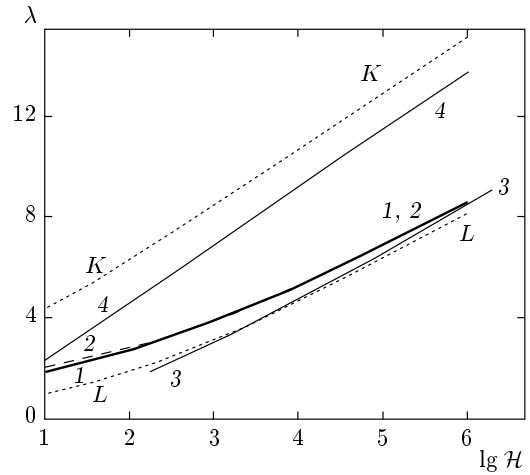


Рис. 1. Безразмерный импульс λ для основного уровня атома водорода в зависимости от приведенного магнитного поля \mathcal{H} : численные расчеты [9–13] (кривая 1), уравнение (3.3) — кривая 2, асимптотика (3.4) — кривая 3; формулам (3.1), (3.5) и (3.2) соответствуют кривая 4 и пунктирные кривые K и L

Сравним теперь эти приближения с точными⁴⁾ численными расчетами [9–12]. Из рис. 1 следует, что формула Лоудона (3.2), хотя и не является прецизионной, все же качественно описывает зависимость $\lambda(\mathcal{H})$ для значений \mathcal{H} от 10 до 10^6 . С другой стороны, выражения (3.1) и (3.5) фактически не имеют области применимости. Наиболее высокую точность имеет уравнение (3.3): так, при $B > 5 \cdot 10^{11}$ Гс кривые 1 и 2 уже неразличимы в пределах точности рис. 1, и с ростом \mathcal{H} точность этого уравнения только повышается⁵⁾. Что касается асимптотики (3.4), то она приближается к точному решению, хотя и довольно медленно. Следует подчеркнуть, что приведенные выше уравнения, за исключением (3.3), относятся только к основному уровню и не применимы для возбужденных состояний атома водорода.

Особый интерес для астрофизики нейтронных звезд может представлять не зависимость $\lambda(\mathcal{H})$, а обратная ей зависимость $\mathcal{H}(\lambda)$, определяющая магнитное поле на поверхности звезды по измеренному сдвигу атомного уровня. Соответствующие данные приведены в табл. 1 работы [14]. В полях $B \gtrsim 10^{13}$ Гс погрешность уравнения (3.3) в определении поля \mathcal{H} не превышает 0.3%, и даже при $B \sim 10^{12}$ Гс (ха-

⁴⁾ Вплоть до десяти значащих цифр в работе [9].

⁵⁾ Пользуясь случаем, исправим допущенные в [14] опечатки: на рис. 4–8 и 10–12 этой работы по оси абсцисс должны быть приведены значения десятичных логарифмов $\lg \mathcal{H}$, а не $\ln \mathcal{H}$, на рис. 9 — $\lg B$ вместо $\ln B$.

рактерное значение для нейтронных звезд) ошибка менее 10 %, что, по-видимому, достаточно для астрофизических приложений. В то же время уравнения (3.1) и (3.5) приводят здесь к значительным ошибкам — на два-три порядка величины — и не могут конкурировать с уравнением (3.3).

В (3.3) и последующих уравнениях считалось, что $n_\rho = m = 0$ (безузельное основное состояние). Как уже отмечалось, к числу уровней типа LLL относятся также состояния с $n_\rho = 0$ и $m = -|m|$. Для них в [14] получено уравнение, отличающееся от (3.3) только значением константы c_0 , которая в этом случае равна

$$c_m = \ln 2 + 4\gamma + \psi(1 + |m|), \quad (3.6)$$

$$m = 0, -1, -2, \dots,$$

так что

$$c_m = c_0 + \sum_{k=1}^{|m|} \frac{1}{k}, \quad m < 0. \quad (3.6')$$

В табл. 1 и 2 дано сравнение численных расчетов [9, 13] с решением уравнений (3.3) и (3.6). С ростом $|m|$ значения энергии связи этих состояний уменьшаются (при данном \mathcal{H})⁶⁾.

3.2. Возбужденные уровни

Здесь нужно различать два случая: четные и нечетные (относительно отражения $z \rightarrow -z$ вдоль направления \mathbf{B}) состояния. Мы начнем с первого случая.

Как было отмечено выше, уравнение (3.3) описывает весь дискретный спектр четных состояний. При этом возбужденные уровни лежат в области энергий невозмущенного атома водорода $\lambda = \lambda_n(\mathcal{H}) < 1$, причем $\lambda_n \rightarrow 1/n$ при $\mathcal{H} \rightarrow \infty$ ($n = 1, 2, \dots$ — полюсы функции $\psi(1 - 1/\lambda)$).

Сравнение с численными расчетами для $2s$ - и $3d$ -состояний⁷⁾ показывает [14], что энергии λ_n^2 этих уровней при $\mathcal{H} \gtrsim 50$ определяются уравнением (3.3)

⁶⁾ Что естественно, ибо возрастает центробежная энергия $m^2/2m_e\rho^2$.

⁷⁾ В отсутствие магнитного поля кулоновские состояния характеризуются квантовыми числами n, l, m . При включении магнитного поля l уже не является «хорошим» квантовым числом, за исключением его четности $(-1)^l$. Тем не менее в статье [9] и в этом случае для классификации состояний используется обозначение $(n'l')$ вместо n^\pm , удобного при использовании адиабатического приближения. При этом уровню приписывается значение l' в порядке его расположения по значению энергии при изменении магнитного поля. Укажем соответствие между обозначениями: $1s \rightarrow 0^+$ (LLL), $2s \rightarrow 1^+$, $3d$ (а не $3s(!)$) $\rightarrow 2^+$, $2p \rightarrow 1^-$ и т. д.

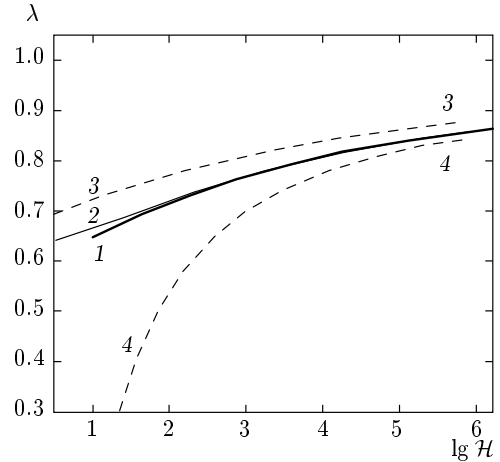


Рис. 2. То же, что на рис. 1, для первого возбужденного уровня $2s$: кривая 1 — численные расчеты [9, 10, 13]; кривая 2 — расчет по уравнению (3.3); кривая 3 — приближение Лоудона (3.7); кривая 4 — расчет по уравнению (3.8) с $n = 1$

с процентной или с еще более высокой точностью — см. кривые 1 и 2 на рис. 2.

В литературе имеется несколько приближенных асимптотических формул для энергии четных возбужденных уровней атома водорода. Согласно уравнению (3.24) из работы [5],

$$\ln \mathcal{H} = 2[\ln(2\lambda) + \psi(1 - \lambda^{-1})], \quad 0 < \lambda < 1. \quad (3.7)$$

Как видно из рис. 2, эта формула при $\mathcal{H} < 10^4$ применима только качественно.

Недавно [20] была получена асимптотика (см. также Приложение А)

$$\lambda_n = \frac{1}{n} - \frac{2}{n^2} \times \left[\Lambda - \ln 2 - \gamma + \frac{1}{n} + 2 \left(\ln n - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k} \right) \right]^{-1}, \quad (3.8)$$

где $\Lambda = \ln \mathcal{H}$ и $n = 1, 2, \dots$, применимая при условии $\ln \mathcal{H} \gg 1$ (для первого возбужденного уровня, $n = 1$, сумму по k следует опустить). Точность этой асимптотической формулы в области значений $\mathcal{H} = 10^2$ – 10^4 , типичной для нейтронных звезд, еще недостаточна; она может быть использована в области сверхсильных полей $B \gtrsim 10^{16}$ Гс.

4. НЕЧЕТНЫЕ УРОВНИ

Для нечетных уровней ($2p, 3p, 4f$ и т. д. по классификации из работы [9]) справедливо граничное усло-

Таблица 1. Энергии связи λ_n^2 [Ry] для нижних уровней ($m = n_\rho = 0$)

\mathcal{H}	1s (LLL)			2s (1 ⁺)		2p (1 ⁻)		3p (2 ⁻)	
	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>b</i>
0	1.0000	—	—	0.2500	—	0.2500	—	0.1111	—
10	3.4956	4.40	0.40	0.4179	0.4429	0.7653	0.6708	0.2197	0.2122
100	7.5796	8.08	2.41	0.5124	0.5176	0.9272	0.9162	0.2410	0.2400
10 ³	15.325	15.49	9.25	0.5917	0.5921	0.9843	0.9842	0.2482	0.2481
10 ⁴	28.282	28.288	22.8	0.6554	0.6552	0.9976	0.9976	0.2497	0.2497
10 ⁵	47.783	47.766	43.9	0.7054	0.7053	0.9996	0.9997	0.2499	0.2500
10 ⁶	74.84	74.78	73.3	0.7444	0.7443	0.9999	1.0000	0.2500	0.2500

Примечание. Приведены следующие результаты: *a*) численных расчетов [9, 13]; *b*) по уравнениям (3.3) и (4.7) соответственно для четных и нечетных состояний; *c*) асимптотика (3.4).

Таблица 2. Энергии связи для LLL-состояний с $n_\rho = 0$ и $m = 0, -1, -2, \dots$

\mathcal{H}	$m = 0$		$m = -1$		$m = -2$	
	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>b</i>
100	7.5796	8.082	5.270	6.132	4.376	5.374
1000	15.325	15.488	11.28	11.70	9.610	10.15
10 ⁴	28.282	28.288	21.83	21.97	19.05	19.26
10 ⁵	47.783	47.755	38.41	38.42	34.22	34.26
∞	—	125.7	—	108.0	—	99.72
\mathcal{H}	$m = -3$		$m = -4$		$m = -5$	
	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>b</i>
100	3.860	4.938	3.510	4.643	3.251	4.425
1000	8.617	9.230	7.929	8.598	7.412	8.125
10 ⁴	17.35	17.61	16.16	16.45	15.25	15.57
10 ⁵	31.60	31.68	29.74	29.84	28.32	28.42
∞	—	94.44	—	90.59	—	87.58

Примечание. Приведены значения λ_n^2 [Ry]: *a*) согласно численным расчетам [9, 13]; *b*) по уравнениям (3.3), (3.6). Для $\mathcal{H} = \infty$ приведены предельные значения λ_∞^2 , вычисленные по уравнению (5.8) с данным m .

вие $\psi_n(0) = 0$, и их энергии равны [14]

$$E_n^- = -\frac{m_e e^4}{2n^2} \left[1 + O\left(\frac{\ln \mathcal{H}}{\mathcal{H}}\right) \right], \quad (4.1)$$

поэтому даже в сверхсильных магнитных полях $B \sim m_e^2/e^3$, $\mathcal{H} \sim \alpha^{-3}$ их отклонения от формулы Бальмера пренебрежимо малы. Приведем здесь некоторые уточнения формул работы [14]. Так как волновые функции нечетных состояний $\psi_n^{(-)}(z) \propto z$

при малых z , в нулевом приближении можно считать $U_{eff}(z) \approx -e^2/|z|$ на всей оси z . Как известно, энергетический спектр E_n^- нечетных уровней в симметричном одномерном потенциале $U(|z|)$ совпадает со спектром s -уровней E_{ns} в трехмерном потенциале $U(r)$ той же формы, так что в данной задаче $E_n^- \approx -(1/n^2) \text{Ry}$. Поэтому можно утверждать, что если в соответствующей трехмерной задаче записать потенциал в виде

$$U_{eff} \equiv -\frac{e^2}{r} + \left[U_{eff}(r) + \frac{e^2}{r} \right],$$

то последнее слагаемое можно рассматривать как малое искажение кулоновского потенциала и учесть его по теории возмущений. Это позволяет написать следующее выражение для энергии нечетных уровней:

$$E_{nmn_\rho}^- \equiv -\frac{m_e e^4}{2} \left(\lambda_{nmn_\rho}^- \right)^2 = -\frac{m_e e^4}{2n^2} + \int \left(U_{eff}(r) + \frac{e^2}{r} \right) \psi_{ns}^2(r) d^3r, \quad (4.2)$$

где $\psi_{ns}(r)$ — невозмущенные волновые функции ns -состояний в кулоновском потенциале. При этом уровни слегка сдвинуты вверх относительно невозмущенных кулоновских уровней $E_n^{(0)} = -(1/n^2) Ry$, поскольку подынтегральное выражение в (4.2) положительно. Качественное различие спектров четных и нечетных уровней иллюстрирует рис. 1 в работе [14].

Из уравнения (4.2) следует асимптотическое разложение для энергии связи:

$$\left(\lambda_{nmn_\rho}^- \right)^2 = \frac{1}{n^2} - \frac{4}{n^3} \left\{ a_{mn_\rho} \frac{\ln \mathcal{H}}{\mathcal{H}} + \frac{a_{nmn_\rho}^{(1)}}{\mathcal{H}} + \frac{a_{nmn_\rho}^{(3/2)}}{\mathcal{H}^{3/2}} + \dots \right\}, \quad \mathcal{H} \rightarrow \infty. \quad (4.3)$$

Логарифмически главное слагаемое в сдвиге уровня определяется областью интегрирования $a_H \lesssim r \lesssim a_B$ в (4.2), в которой можно положить

$$U_{eff}(r) \approx -\frac{e^2}{r} + \frac{e^2 \bar{\rho}_{mn_\rho}^2}{2r^3}, \quad (4.4)$$

$$\psi_{ns}^2(r) \approx \psi_{ns}^2(0) = \frac{1}{\pi a_B^3 n^3}$$

и, с логарифмической точностью, получить оценку для сдвига нечетного уровня:

$$\delta E_{nmn_\rho}^- \approx \int \left(U_{eff} + \frac{e^2}{r} \right) \psi_{ns}^2(r) d^3r \approx \frac{2e^2 \bar{\rho}_{mn_\rho}^2}{a_B^3 n^3} \int_{a_H}^{a_B} \frac{dr}{r} = \frac{e^2 \bar{\rho}_{mn_\rho}^2}{a_B^3 n^3} (\ln \mathcal{H} + O(1)). \quad (4.5)$$

Поскольку

$$\bar{\rho}_{mn_\rho}^2 = \iint \rho^2 |R_{n_\rho m}(\rho)|^2 d^2\rho = 2(2n_\rho + |m| + 1) a_H^2,$$

для коэффициента a_{mn_ρ} (не зависящего от n) в разложении (4.3), согласно (4.3) и (4.5) получаем

$$a_{mn_\rho} = 2n_\rho + |m| + 1. \quad (4.6)$$

Определение следующих коэффициентов разложения связано с более громоздкими вычислениями, которые мы выносим в Приложение В. Используя приведенные в нем результаты, в случае $m = n_\rho = 0$ находим

$$\left(\lambda_{n00}^- \right)^2 = \frac{1}{n^2} - \frac{4}{n^3} \left[\frac{\ln \mathcal{H}}{\mathcal{H}} - \frac{k_n}{\mathcal{H}} + \frac{4\sqrt{2}\pi}{\mathcal{H}^{3/2}} + \dots \right], \quad (4.7)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$,

$$k_n \equiv -a_{n00}^{(1)} = 2 + \ln 2 + \gamma + 2(J_n - \ln n), \quad (4.8)$$

а J_n дается формулой (В.5) Приложения В.

В частности, для нижних нечетных уровней имеем

$$J_1 = 0, \quad k_1 = 2 + \ln 2 + \gamma = 3.270,$$

$$J_2 = 3/4, \quad k_2 = 7/2 - \ln 2 + \gamma = 3.384, \quad (4.9)$$

$$J_3 = 7/6, \quad k_3 = 13/3 - \ln(9/2) + \gamma = 3.407$$

и далее численно

$$J_4 = 1.458, \quad k_4 = 3.414,$$

$$J_5 = 1.683, \quad k_5 = 3.418. \quad (4.9')$$

Отметим, что в случае возбужденных (в продольном направлении движения) состояний, как видно из табл. 1, асимптотические формулы (3.3) и (4.7) обеспечивают более высокую точность, чем для основного уровня. Это обстоятельство имеет простое физическое объяснение, поскольку для возбужденных состояний растет (пропорционально n^2) размер области локализации волновой функции в продольном направлении, что приводит к уменьшению кулоновского взаимодействия и к расширению области применимости адиабатического приближения на все меньшие значения магнитного поля.

5. ЭФФЕКТЫ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

Недавно было показано [18–20], что в сильных магнитных полях кулоновский потенциал точечного заряда искажается из-за поляризации вакуума: возникает экранировка потенциала на малых расстояниях $|z| < 1/\sqrt{6} m_e = \alpha a_B / \sqrt{6}$, что приводит к сдвигу основного уровня $\Delta E_{1s} > 0$. В полях $B > m_e^2 / e^3 \sim 10^{16}$ Гс понижение энергии уровня с ростом B замедляется, и при $B \rightarrow \infty$ атомный уровень не «проваливается»⁸⁾ в $-\infty$, а «замерзает» на

⁸⁾ Что соответствует «падению на центр» в квантовой механике [17] и имело бы место согласно формулам (3.1) и (3.3).

конечном предельном значении энергии ($-\lambda_\infty^2 \text{ Ry}$). Этот неожиданный эффект впервые заметили Шаббад и Усов [18], затем он был исследован Высоцким и Маше [19, 20]. Результаты этих авторов качественно близки, хотя и существенно различаются в деталях; см. подробнее разд. 4.2 в работе [20].

Экранировка кулоновского потенциала при использовании адиабатического приближения приводит к изменению эффективного потенциала. Теперь он имеет вид

$$\tilde{U}_{eff}(z) = U_{eff}(z) + \delta U_{eff}(z), \quad (5.1)$$

где $U_{eff}(z)$ описывается прежним выражением (2.4) а его искажение [20] —

$$\delta U_{eff}(z) = e^2 \int \frac{|R_{0m}(\rho)|^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} d^2\rho \times \left[e^{-\mu|z|} - e^{-\sqrt{1+b}\mu|z|} \right] > 0. \quad (5.2)$$

Здесь $\mu = \sqrt{6} m_e = (\alpha a_B / \sqrt{6})^{-1}$, $b = \mathcal{H} / \mathcal{H}_\infty = B / B_\infty$,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\infty &= 3\pi / \alpha^3 = 2.42 \cdot 10^7, \\ \Lambda_\infty &= \ln \mathcal{H}_\infty = 17.00 \end{aligned} \quad (5.3)$$

(или $B_\infty = 3\pi m_e^2 / e^3 \approx 6 \cdot 10^{16}$ Гс) и мы положили $n_\rho = 0$.

Изменение зависимости сдвигов уровней от магнитного поля из-за экранировки кулоновского потенциала непосредственно связано со значением величины

$$\begin{aligned} \delta_m(\mathcal{H}) &= 2e^{-2} \int_0^\infty \delta U_{eff}(z) dz = \\ &= 2 \int_0^\infty \int \frac{|R_{0m}(\rho)|^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} d^2\rho \times \\ &\quad \times \left[e^{-\mu z} - e^{-\sqrt{1+b}\mu z} \right] dz > 0 \end{aligned} \quad (5.4)$$

и сводится к вычитанию этого слагаемого из $\ln \mathcal{H}$ в левой части уравнения (3.3). Теперь уравнение для спектра четных уровней имеет вид (см. формулы (С.11) и (С.12) в Приложении С)

$$\ln \mathcal{H} - \delta_m(\mathcal{H}) = \lambda + 2[\ln \lambda + \psi(1 - \lambda^{-1})] + c_m \quad (5.5)$$

(константы c_m определены в (3.6)).

Для вычисления интегралов в (5.4) заметим, что в них доминирующий вклад вносят области значений $\rho \sim a_H = a_B / \sqrt{\mathcal{H}}$ и $z \sim 1/\mu = \alpha a_B / \sqrt{6}$ (вклады

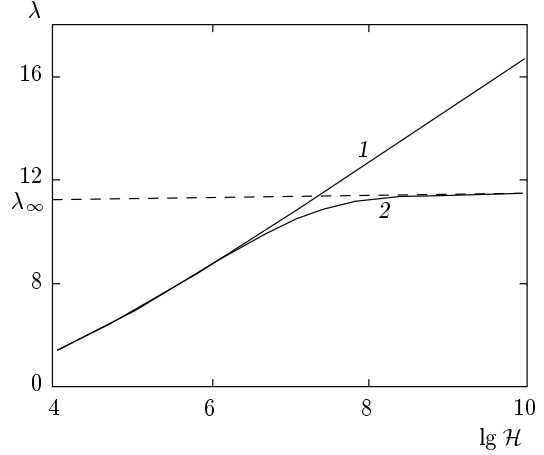


Рис. 3. Зависимость $\lambda(\mathcal{H})$ для основного уровня в области сверхсильных полей без учета (кривая 1) и с учетом (кривая 2) поляризации вакуума ($\lambda_\infty = 11.21$)

областей с большими значениями ρ и z экспоненциально малы). В предельном случае $a_H^2 \ll 1/\mu^2$, т.е. при $\mathcal{H} \gg 6/\alpha^2 \approx 10^5$ под радикалом $\sqrt{\rho^2 + z^2}$ в (5.4) можно опустить ρ^2 и получить⁹⁾

$$\begin{aligned} \delta_m(\mathcal{H}) &\approx 2 \int_{\epsilon > 0 \rightarrow 0}^\infty \frac{dz}{z} \left[e^{-\mu z} - e^{-\mu\sqrt{1+b}z} \right] = \\ &= \ln(1+b) = \ln(1 + \alpha^3 \mathcal{H} / 3\pi), \quad \mathcal{H} \gg 6/\alpha^2 \end{aligned} \quad (5.6)$$

(подчеркнем, что здесь $\delta_m(\mathcal{H})$ от значения m не зависит).

Из формул (5.5) и (5.6) видно, что экранировка кулоновского потенциала сводится к замене $\Lambda = \ln \mathcal{H}$ на $\tilde{\Lambda}$, где [20]

$$\tilde{\Lambda} \equiv \ln \tilde{\mathcal{H}} = \ln \left[\mathcal{H} / \left(1 + \frac{\alpha^3 \mathcal{H}}{3\pi} \right) \right], \quad (5.7)$$

в уравнении для спектра четных уровней и в полях $\mathcal{H} \ll \mathcal{H}_\infty$ ее влияние пренебрежимо мало.

Однако при $\mathcal{H} > \mathcal{H}_\infty$ ситуация меняется; см. рис. 3 и 4, на которых четко виден эффект «замерзания» $1s$ - и $2s$ -уровней при $\mathcal{H} \rightarrow \infty$. Предельные значения ($\lambda = \lambda_\infty$) энергии LLL-уровней определяются из уравнения

$$\Lambda_\infty = F_m(\lambda) \equiv \lambda + 2 \left[\ln \lambda + \psi \left(1 - \frac{1}{\lambda} \right) \right] + c_m \quad (5.8)$$

⁹⁾ При этом интегралы с экспонентами выражаются через интегральный логарифм.

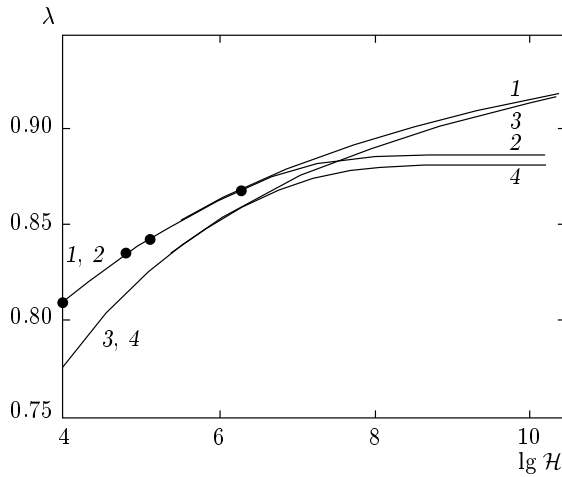


Рис. 4. Зависимость $\lambda(H)$ для первого возбужденного уровня $2s$. Кривые 1 и 2 — согласно уравнению (3.3) с $\Lambda = \ln \mathcal{H}$ и $\tilde{\Lambda} = \ln \tilde{\mathcal{H}}$, кривые 3 и 4 соответствуют уравнению (3.8) с Λ и $\tilde{\Lambda}$, $n = 1$. Точки — результаты численных расчетов

и приведены в табл. 2 и 3. Отметим, что данные этих таблиц согласуются с данными, приведенными на рис. 10 в работе [20], как и значение $\varepsilon_\infty = 1.709$ кэВ.

Из (5.7) и (5.8) следует, что

$$\ln(1 + \mathcal{H}_\infty/\mathcal{H}) = F_m(\lambda_\infty) - F_m(\lambda), \quad (5.9)$$

откуда при $\mathcal{H} \gg \mathcal{H}_\infty$

$$\lambda = \lambda_\infty - \frac{1}{F'_m(\lambda_\infty)} \frac{\mathcal{H}_\infty}{\mathcal{H}} + \dots \quad (5.10)$$

(см. рис. 3), где

$$F'_m(\lambda) = 1 + 2\lambda^{-1} + \lambda^{-2}\psi'(2 - \lambda^{-1}) = 1 + 2\lambda^{-1} + (\pi^2/3)\lambda^{-2} + \dots, \quad \lambda \gg 1.$$

Уравнения (3.3) и (5.5) имеют корни, соответствующие глубоким LLL-уровням не только при $\lambda > 1$, но также и корни вблизи полюсов ψ -функции. Эти возбужденные уровни имеют энергию связи (см. табл. 3) менее $1 \text{ Ry} = 13.6 \text{ эВ}$ и относятся к «башне» состояний, примыкающих к нижнему LLL-уровню с данным $m \leq 0$.

До сих пор мы пренебрегали аномальным магнитным моментом $\Delta\mu$ электрона, однако при $B \gtrsim B_{cr}$ его вклад становится существенным. В столь сильных полях магнитный момент зависит от поля; так, в первом порядке по α [25–27]

$$\Delta\mu = \frac{\alpha}{2\pi}\mu_B \cdot \begin{cases} 1 + O(L^2 \ln L), & L \ll 1 \\ -L^{-1} \ln^2 L, & L \gg 1, \end{cases} \quad (5.11)$$

Таблица 3. «Замерзание» атомных уровней

LLL		Возбужденные состояния		
m	ε_∞ , кэВ	n	ε_∞ , эВ	\tilde{c}_n
0	1.71	1	10.7	0.270
−1	1.47	2	3.00	1.384
−2	1.36	3	1.39	1.740
−3	1.28	4	0.798	1.914
−4	1.23	5	0.517	2.018
−5	1.19	10	0.132	2.231

Примечание. Таблица содержит предельные ($B \rightarrow \infty$) значения энергии связи ε_∞ с учетом поляризации вакуума для LLL-состояний с $n_\rho = 0$, $m = 0, -1, \dots, -5$ и для возбужденных состояний с $m = n_\rho = 0$, $n = 1, \dots, 5, 10$.

где $L = B/B_{cr} = \alpha^2 \mathcal{H}$ и $\mu_B = |e\hbar/2m_e c|$ — магнетон Бора. С ростом B аномальный магнитный момент электрона меняет знак [25].

Энергия основного уровня Ландау при $B \gg B_{cr}$ равна

$$E_0 = m_e + \frac{1}{2}\hbar\omega_H - (\mu_B + \Delta\mu)B - \frac{1}{2}m_e e^4 \lambda^2 = m_e + \left(\frac{1}{2\pi\alpha} \ln^2 L - \lambda^2 \right) \text{Ry}, \quad L \gg 1 \quad (5.12)$$

(как отмечалось выше, в случае дираковского электрона, т. е. при $\Delta\mu = 0$, для LLL-состояний энергия нулевых колебаний $\hbar\omega_H/2$ полностью сокращается с магнитной энергией спина $\mu_B B$). При $L \gg 1$ вклад в (5.12) от аномального момента $\Delta\mu$ растет как $\ln^2 L$ и сравнивается с энергией связи уровня при $\ln L = \sqrt{2\pi\alpha} \cdot \lambda$ или¹⁰⁾ $L = L_*$,

$$L_* = \exp \left[2 \ln \frac{1}{\alpha} / \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} - 1 \right) \right] \approx 15. \quad (5.13)$$

При $L > L_*$, т. е. при $B > 7 \cdot 10^{14} \text{ Гс}$, сдвиг основного уровня, связанный с $\Delta\mu$, превышает его энергию связи $\lambda^2 \text{ Ry}$. Однако этот сдвиг определяется КЭД, а не атомной физикой, и он практически одинаков для всех уровней атомного спектра. Поэтому энергии радиационных переходов $n\rho \rightarrow 1s$, которые могли бы наблюдаться в эксперименте, при учете $\Delta\mu$ практически не меняются.

¹⁰⁾ Здесь мы положили для оценки $\lambda \approx \ln \mathcal{H}$.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье обсуждаются аналитические формулы для энергий основного и возбужденных состояний атома водорода, находящегося в магнитном поле $B \gg B_a \sim 10^9$ Гс. Рассмотрены атомные уровни, примыкающие к нижней зоне Ландау с $n_\rho = 0$ и магнитными квантовыми числами $m = 0, -1, -2, \dots$. Энергии этих состояний остаются нерелятивистскими даже в сверхсильном магнитном поле $B \gtrsim B_{cr}$ и могут быть рассчитаны на основе уравнения Шредингера. Сравнение с имеющимися численными расчетами показывает, что уравнение (3.3) при $\mathcal{H} = B/B_a \gtrsim 100$ имеет процентную или еще более высокую точность.

Сделаем несколько заключительных замечаний.

1. Имеется существенное различие между энергиями четных и нечетных уровней, $E_n^\pm = -(\lambda_n^\pm)^2 \text{Ry}$, что качественно видно уже из асимптотических формул при $\mathcal{H} \gg 1$ (без учета поляризации вакуума)

$$\begin{aligned} \lambda_n^+ &\approx \frac{1}{n} \left(1 - \frac{2}{n \ln \mathcal{H}} + \dots \right), \\ \lambda_n^- &\approx \frac{1}{n} \left(1 - \frac{2 \ln \mathcal{H}}{n \mathcal{H}} + \dots \right), \end{aligned} \quad (6.1)$$

$n = 1, 2, \dots$. Возбужденные четные уровни расположены значительно выше нечетных, соответствующие поправки Ридберга составляют [17]

$$\Delta^+ \approx \frac{2}{\ln \mathcal{H}}, \quad \Delta^- \approx \frac{\ln \mathcal{H}}{\mathcal{H}}. \quad (6.2)$$

2. При $\mathcal{H} \sim 10^3\text{--}10^4$ нечетные уровни уже близки к невозмущенным кулоновским значениям $E_n = -(1/n^2) \text{Ry}$, в то время как четные уровни еще далеки от этого предела (см. также рис. 1 в [14]). Таким образом, утверждение о приближенном вырождении четных и нечетных уровней в сильном магнитном поле [5, 17] нуждается в существенном уточнении.

3. С учетом поляризации вакуума при $B \rightarrow \infty$ энергии нижних четных LLL-уровней с различными m не уходят на $-\infty$, как это было бы в случае «падения на центр», а стремятся к конечным предельным значениям, величина которых $E_\infty^+ = -\lambda_\infty^2 \text{Ry}$ зависит от магнитного квантового числа m и велика по сравнению с уровнями дискретного спектра атома водорода. Так, например, для основного состояния $n_\rho = m = 0$, в согласии с работой [20], $E_\infty^+ = \lambda_\infty^2 \text{Ry} = 1.709$ кэВ, что на два порядка превышает энергию связи в свободном атоме.

Аналогичным образом в случае возбужденных четных уровней асимптотика энергий E_n^+ при $B \rightarrow \infty$ отличается от $E_n = -(1/n^2) \text{Ry}$. В этом проявляется эффект «замораживания» уровней, связанный с поляризацией вакуума и экранировкой кулоновского потенциала. Тем самым устанавливается верхняя граница области применимости уравнения (3.3). Заметим, однако, что в полях $B \sim 10^{12}\text{--}10^{15}$ Гс (пульсары и магнитары) поправка на поляризацию вакуума еще мала, и это уравнение имеет высокую точность.

4. Обычно радиационное смещение атомных уровней в КЭД мало (например, лэмбовский сдвиг $\Delta_{LS} = 1058$ МГц уровней $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ атома водорода [24]). В случае сверхсильного магнитного поля $\mathcal{H} \gtrsim \mathcal{H}_\infty$ поляризация вакуума приводит к качественному изменению спектра четных уровней.

5. В статье Зельдовича «Уровни энергии в искаженном кулоновском поле» [28] был указан интересный физический эффект, который может наблюдаться в тех случаях, когда потенциал взаимодействия (или волновая функция) разделяется на две части с сильно несоизмеримыми радиусами. Если в системе имеется уровень с энергией, близкой к нулю (резонансная ситуация), то происходит резкое изменение («перестройка») атомного спектра. В дальнейшем этот эффект был переоткрыт в релятивистской кулоновской задаче с зарядом $Z > 137$ [29], в теории легчайших адронных атомов [30] и получил название «эффекта Зельдовича» [31, 32].

В работе [33] получено безмодельное уравнение, описывающее эффект Зельдовича для s -состояний, и показано, что подходящей переменной для его описания является эффективное квантовое число [34, 35] $n^* = 1/\lambda = (-2E_n)^{-1/2}$. При наличии эффекта Зельдовича значения n^* для серии атомных уровней обладают периодичностью (см., например, рис. 1 в [33]). Рассмотрим в этой связи спектр атома водорода в сильном магнитном поле.

В табл. 4 приведены значения n^* для состояний с квантовыми числами $m = n_\rho = 0$ и $n = 1, 2, 3$, полученные из результатов численных расчетов λ_n^2 [9, 10, 13]. Видно, что свойство периодичности с хорошей точностью выполняется в достаточно сильных полях $\mathcal{H} \gtrsim 10$ (отдельно для четных и нечетных состояний); ср., например, значения n^* для $2s$ -, $3s$ - и $3d$ -состояний при фиксированном \mathcal{H} (от 10 до 10^6). Аналогия между расположением возбужденных уровней для этих двух задач (атом водорода при $B \gg B_a$, $a_H \ll a_B$ и кулоновская задача с короткодействием [30–33] при $r_0 \ll a_B$) впервые была отмечена, по-видимому, в работе [14].

Таблица 4. Эффективное квантовое число уровня n^*

\mathcal{H}	$n^*(\mathcal{H})$						
	$P = +1$				$P = -1$		
	$1s$	$2s$	$3s$	$3d$	$2p$	$3p$	$4f$
0	1.000	2.000	3.000	3.000	2.000	3.000	4.000
0.1	0.9556	1.838	3.388	2.580	1.755	2.675	3.616
1	0.7756	1.765	3.741	2.748	1.387	2.354	3.343
10	0.5349	1.547	3.545	2.546	1.143	2.133	3.131
100	0.3632	1.397	3.399	2.399	1.039	2.037	3.036
1000	0.2554	1.300	3.303	2.302	1.008	2.007	—
10^4	0.1880	1.235	3.237	2.237	1.001	2.001	—
10^5	0.1447	1.191	3.192	2.192	1.000	2.000	—
10^6	0.1156	1.159	3.160	2.160	1.000	2.000	—
∞	0.0892	1.129	—	—	1	2	3

Мы благодарны М. И. Высоцкому, сообщившему нам результаты статьи [20] до ее опубликования, за полезные обсуждения в ходе работы. Мы также благодарны А. Е. Кудрявцеву, В. Д. Муру и Ю. А. Симонову за обсуждение полученных результатов, А. И. Потехину, предоставившему нам результаты своих численных расчетов, С. Г. Позднякову за помощь в вычислениях и М. Н. Маркиной за помощь при оформлении рукописи.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 09-02-01201а, 10-02-00364а).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Изложим вывод асимптотической формулы (3.8) для возбужденных четных уровней. При $\mathcal{H} \rightarrow \infty$ корни уравнения (3.3) близки к полюсам функции $\psi(1 - \lambda^{-1})$, а именно, $\lambda \rightarrow 1/n = 1, 1/2, 1/3, \dots$. Полагая

$$\lambda = \frac{1}{n + \varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \tag{A.1}$$

и учитывая, что [36]

$$\begin{aligned} \psi(1 - \lambda^{-1}) &\equiv \psi(\lambda^{-1}) + \pi \operatorname{ctg}(\pi/\lambda) = \\ &= \varepsilon^{-1} + \psi(n) + O(\varepsilon), \end{aligned} \tag{A.2}$$

из (3.3) получаем

$$2\varepsilon^{-1} = \Lambda - \frac{1}{n} + 2[\ln n - \psi(n)] - \ln 2 - 3\gamma$$

и окончательно находим

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{n + \varepsilon} = \frac{1}{n} - \frac{2}{n^2} \left(\frac{2}{\varepsilon} + \frac{2}{n} \right)^{-1} = \\ &= \frac{1}{n} - \frac{2/n^2}{\Lambda + 1/n + 2[\ln n - \psi(n)] - \ln 2 - 3\gamma} + \\ &\quad + O\left(\frac{1}{\Lambda^2}\right), \quad n = 1, 2, \dots \end{aligned} \tag{A.3}$$

Поскольку

$$\psi(n) = \psi(1) + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k}, \quad \psi(1) = -\gamma, \tag{A.4}$$

формула (A.3) совпадает с (3.8). Здесь $\Lambda = \ln \tilde{H}$ или $\Lambda = \ln \mathcal{H}$, соответственно с учетом или без учета поляризации вакуума.

Из (A.3) при $\mathcal{H} \rightarrow \infty$ для предельного значения $\lambda_\infty^{(n)}$ имеем

$$\lambda_\infty^{(n)} = \frac{1}{n} - \frac{2}{(\Lambda_\infty - \tilde{c}_n)n^2}, \tag{A.5}$$

где $\Lambda_\infty = \ln(3\pi/\alpha^3) = 17.0$, $\tilde{c}_1 = \ln 2 + \gamma - 1 = 0.2703$, а значения \tilde{c}_n см. в табл. 3 ($\tilde{c}_n \rightarrow c_0 = 2.425$ при $n \rightarrow \infty$).

Для $n = 1$ эта формула дает $\lambda_\infty^{(1)} = 0.8805$, а по уравнению (5.8) получаем $\lambda_\infty = 0.8861$. Отметим, что формула (A.3) неприменима для основного состояния, для которого $\lambda_\infty = 11.213$.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Вывод разложения (4.3) для энергетического спектра нечетных уровней

Для получения этого разложения¹¹⁾ удобно в интеграле в (4.2) воспользоваться выражением (2.4) для эффективного потенциала, поменять порядок интегрирования по ρ и $r \equiv z$ и разбить интегрирование по z на две области $(0, L)$ и (L, ∞) , где $a_H \ll \ll L \ll a_B$ (конкретное значение L не существенно). Далее, волновую функцию ns -состояния удобно записать в виде [17]

$$\psi_{ns}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi n^3}} e^{-z/n} F(-n + 1, 2; 2z/n), \tag{B.1}$$

где вырожденная гипергеометрическая функция выражается через обобщенный полином Лагерра.

¹¹⁾ Ниже мы используем атомные единицы $e = \hbar = m_e = 1$.

В интеграле по интервалу $(0, L)$ можно положить¹²⁾

$$\psi_{ns}^2(z) = \frac{1}{\pi n^3} [1 - 2z + O(z^2)]$$

и получить

$$\begin{aligned} 4\pi \int_0^L \left[U_{eff}(r) + \frac{1}{r} \right] \psi_{ns}^2(r) r^2 dr &\approx \\ &\approx -\frac{4}{n^3} \iint |R_{n\rho m}(\rho)|^2 \times \\ &\times \int_0^L z^2 (1 - 2z) \left[\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} - \frac{1}{z} \right] dz d^2\rho = \\ &= -\frac{4}{n^3} \left[\frac{1}{4} \overline{\rho^2 \ln \rho^2} - \frac{1}{4} (2 \ln 2 - 1) \overline{\rho^2} - \frac{4}{3} \overline{\rho^3} - \right. \\ &\left. - \frac{1}{2} \overline{\rho^2} \ln L + \overline{\rho^2} L + O(\mathcal{H}^{-2}) \right], \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

где усреднение проводится по состоянию с волновой функцией $R_{n\rho m}(\rho)$ [17].

Для выполнения интегрирования по области (L, ∞) достаточно ограничиться разложением

$$\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \approx \frac{1}{z} - \frac{\rho^2}{2z^3}$$

и записать интеграл в виде

$$\begin{aligned} 4\pi \int_L^\infty \left[U_{eff}(r) + \frac{1}{r} \right] \psi_{ns}^2(r) r^2 dr &\approx \\ &\approx \frac{2}{n^3} \iint |R_{n\rho m}(\rho)|^2 \int_L^\infty \frac{\rho^2}{z} \times \\ &\times e^{-2z/n} F^2(-n + 1, 2; 2z/n) dz d^2\rho. \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

Для вычисления интеграла удобно преобразовать (B.3) следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{2}{n^3} \overline{\rho^2} \left[\int_L^\infty \frac{1}{z} e^{-2z/n} dz - \int_0^L \frac{1}{z} e^{-2z/n} \times \right. \\ \left. \times [F^2(-n + 1, 2; 2z/n) - 1] dz - J_n \right], \quad (\text{B.4}) \end{aligned}$$

где

$$J_n = \int_0^\infty \frac{1}{z} e^{-z} [1 - F^2(-n + 1, 2; z)] dz. \quad (\text{B.5})$$

Первый интеграл в (B.4) выражается через интегральную показательную функцию $\text{Ei}(-2L/n)$, что позволяет получить его разложение

$$\begin{aligned} \int_L^\infty \frac{1}{z} e^{-2z/n} dz &= -\gamma - \ln \frac{2}{n} - \\ &- \ln L + \frac{2L}{n} + O(L^2), \quad L \ll 1. \quad (\text{B.6}) \end{aligned}$$

Наконец, последний интеграл в (B.4) с рассматриваемой точностью равен

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{1}{z} e^{-2z/n} [F^2(-n + 1, 2; 2z/n) - 1] dz &= \\ &= 2 \left(\frac{1}{n} - 1 \right) L + O(L^2). \quad (\text{B.7}) \end{aligned}$$

Приведенные формулы определяют сдвиги нечетных уровней по отношению к кулоновским уровням $E_n^{(0)} = -1/2n^2$. При этом, как и следовало ожидать, вспомогательный параметр L , введенный для удобства вычислений, в окончательном ответе выпадает.

Записывая в (B.2)

$$\frac{1}{n^3} \overline{\rho^2 \ln \rho^2} = \frac{1}{n^3} \left[\overline{\rho^2 \ln(a_H^2)} + \overline{\rho^2 \ln(\rho^2/a_H^2)} \right],$$

замечаем, что здесь первое слагаемое в правой части определяет асимптотически старшее слагаемое в сдвиге уровня с коэффициентом $a_{mn\rho}$ в разложении (4.3), совпадающее с приведенным ранее (4.6).

Для следующего члена разложения получаем

$$\begin{aligned} a_{nmn\rho}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left\{ K_{mn\rho} - [2J_n - 2 \ln n + \right. \\ &\left. + 2\gamma + \ln 2 + 1] \overline{\rho^2/a_H^2} \right\}, \quad (\text{B.8}) \end{aligned}$$

где

$$K_{mn\rho} = -\overline{(\rho^2/a_H^2) \ln(\rho^2/2a_H^2)}.$$

В случае $n_\rho = 0$, используя явное выражение для волновой функции $R_{n\rho m}(\rho)$ [17], получаем

$$K_{m0} = -2(|m| + 1)\psi(|m| + 2). \quad (\text{B.9})$$

Наконец, величина

$$a_{mn\rho}^{(3/2)} = \frac{8}{3} \overline{\rho^3/a_H^3} \quad (\text{B.10})$$

не зависит от n , при этом для состояний с $n_\rho = 0$

$$\overline{\rho^3/a_H^3} = 2^{-|m|-1/2} \sqrt{\pi} \frac{(2|m| + 3)!!}{|m|!}. \quad (\text{B.11})$$

В частности, при $m = 0$ отсюда имеем $\overline{\rho^3/a_H^3} = 3\sqrt{\pi}/2$, что учтено в разложении (4.7).

¹²⁾ Подчеркнем, что коэффициент при z не зависит от n .

ПРИЛОЖЕНИЕ С

Спектр четных уровней в искаженном на малых расстояниях одномерном кулоновском потенциале

Особенность рассматриваемой задачи связана с тем, что в пределе нулевого радиуса обрезания гамма-функции

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{e^2}{|z|}, \quad (C.1)$$

оставаясь эрмитовым, уже не является самосопряженным оператором¹³⁾: возникает падение на центр (в точку $z = 0$). Поэтому спектр искаженного потенциала зависит как от радиуса, так и от конкретного вида обрезания при $|z| \lesssim r_0$.

Получим уравнение для спектра четных уровней в одномерном симметричном потенциале вида $U(z) = -e^2 v(|z|)$, представляющем искаженный на малых расстояниях $|z| \lesssim r_0 \ll a_B$ кулоновский потенциал $U_C(z) = -e^2/|z|$. Существенно, что искажение потенциала предполагается удовлетворяющим условию¹⁴⁾ $|U(z)| \lesssim e^2/r_0$.

Для решения уравнения Шредингера

$$\psi''(z) = \frac{2m_e}{\hbar^2} [U(z) - E] \psi(z) \quad (C.2)$$

при $|z| \lesssim r_0$ замечаем, что в этой области потенциал $U(z)$ представляет мелкую потенциальную яму (а может быть, даже и невысокий барьер!), поскольку

$$\frac{m_e r_0^2 |U(z)|}{\hbar^2} \lesssim \frac{r_0}{a_B} \ll 1. \quad (C.3)$$

В этом случае, как известно, волновая функция $\psi(z) \approx \text{const} = 1$, и из уравнения (C.2) при $z > 0$ следует, что

$$\psi'(z) \approx \frac{2m_e}{\hbar^2} \int_0^z U(z') dz' \quad (C.4)$$

(см. [17, § 45]), при этом учтено, что $|E| \ll e^2/r_0$.

¹³⁾ С математической точки зрения это связано с тем, что теперь в точке $z = 0$ из-за сингулярности потенциала условия непрерывности волновой функции и ее производной не могут быть выполнены, см. ниже (C.8). О различии между эрмитовыми и самосопряженными операторами см., например, [37].

¹⁴⁾ Подчеркнем, что в трехмерном случае, в отличие от одномерного, такое искажение кулоновского потенциала $U(r) = -e^2/r$ (например, за счет конечных размеров ядра) выступает как малое возмущение, причем чем меньше радиус обрезания r_0 , тем меньше и возмущение.

Теперь замечаем, что на расстояниях $r_0 \ll z \ll \ll a_B$, где потенциал имеет уже кулоновский вид, выражение (C.4) принимает вид

$$\psi'(z) = -\frac{2}{a_B} \ln\left(\frac{z}{a_B}\right) - K, \quad (C.5)$$

при этом значение параметра K зависит от конкретного вида обрезания потенциала. Так, для модели прямоугольного обрезания, т. е. для $U = -e^2/r_0$ при $|z| < r_0$ и $U = -e^2/|z|$ при $|z| > r_0$, имеем

$$K = \frac{2}{a_B} \left[\ln \frac{a_B}{r_0} + 1 \right]. \quad (C.6)$$

Подчеркнем, что большое значение логарифма $\ln(a_B/r_0)$, являясь главным слагаемым в K , не зависит от конкретного вида обрезания, причем сама величина r_0 определена лишь по порядку величины.

В то же время на расстояниях $|z| \gg r_0$ решение уравнения (C.2) для $E = -\hbar^2 \lambda^2 / 2m_e < 0$, экспоненциально убывающее на больших расстояниях, описывается функцией Уиттекера:

$$\psi(|z|) = \text{const} \cdot W_{\nu, 1/2}(2|z|/\nu a_B) \quad (C.7)$$

с $\nu = 1/\lambda a_B > 0$. В области $r_0 \ll z \ll r_B$ аргумент функции Уиттекера мал и выражение (C.7) принимает вид (мы положили $\psi(0) = 1$)

$$\psi(z) \approx \left\{ 1 - 2 \frac{z}{a_B} \ln(2\lambda z) - \left[\lambda a_B + 2\psi\left(1 - \frac{1}{\lambda a_B}\right) - 2 + 4\gamma \right] \frac{z}{a_B} + \dots \right\}. \quad (C.8)$$

Здесь $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ — логарифмическая производная гамма-функции, $\psi(1) = -\gamma$, $\gamma = 0.5772\dots$ — постоянная Эйлера.

Область $r_0 \ll z \ll r_B$ является областью перекрытия решений, в которой справедливы формулы (C.5) и (C.8) одновременно. Дифференцируя (C.8) и приравнявая (C.5), получаем уравнение для спектра четных уровней в искаженном кулоновском потенциале:

$$K a_B = \lambda a_B + 2 \ln(2\lambda a_B) + 2\psi\left(1 - \frac{1}{\lambda a_B}\right) + 4\gamma. \quad (C.9)$$

Ранее, в случае эффективного потенциала

$$U_{eff}(z) = -e^2 \int \frac{|R_{0m}(\boldsymbol{\rho})|^2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} d^2\rho, \quad (C.10)$$

где в роли r_0 выступает $a_H = \sqrt{\hbar c/eB}$, было получено значение (для $n_\rho = 0$) [14]

$$K a_B = 2 \ln(a_B/a_H) + \ln 2 - \psi(1 + |m|) = \ln \mathcal{H} + \ln 2 - \psi(1 + |m|), \quad (C.11)$$

$\mathcal{H} = B/B_a$, $B_a = m_e^2 e^3 c / \hbar^3$, которое совместно с (С.9) определяет спектр четных уровней, см. (3.3) и (3.6).

Теперь замечаем, что согласно формулам (С.4) и (С.5) учет изменения эффективного потенциала из-за поляризации вакуума сводится к следующей замене в (С.9) и (С.11):

$$K \rightarrow K + \delta K, \quad \delta K = -\frac{2m_e}{\hbar^2} \int_0^\infty \delta U_{eff}(z) dz. \quad (\text{C.12})$$

Ввиду быстрого убывания $\delta U_{eff}(z)$, см. (5.2), верхний предел интегрирования можно положить равным бесконечности. Отсюда следует уравнение (5.5) для спектра четных уровней, так как $\delta_m(\mathcal{H}) = -\delta K_{AB}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Lai, Rev. Mod. Phys. **73**, 629 (2001).
2. A. K. Harding and D. Lai, Rep. Progr. Phys. **69**, 2631 (2006).
3. C. Kouveliotou, R. C. Duncan, and C. Thompson, Sci. Amer. (пер.: В мире науки, № 6, с. 26 (2003)).
4. L. I. Schiff and H. Snyder, Phys. Rev. **55**, 59 (1939).
5. R. Loudon, Amer. J. Phys. **27**, 649 (1959).
6. R. F. Elliott and R. Loudon, J. Phys. Chem. Sol. **15**, 196 (1960).
7. H. Hasegawa and R. E. Howard, J. Phys. Chem. Sol. **21**, 179 (1961).
8. Z. Chen and S. P. Goldman, Phys. Rev. A **45**, 1722 (1992); **48**, 1107 (1993).
9. J.-H. Wang and C.-S. Hsue, Phys. Rev. A **52**, 4508 (1995).
10. D. Lai and E. E. Salpeter, Phys. Rev. A **53**, 152 (1996).
11. Yu. P. Kravchenko, M. A. Liberman, and B. Johansson, Phys. Rev. A **54**, 287 (1996).
12. A. Y. Potekhin, J. Phys. B **31**, 49 (1998).
13. А. Ю. Потехин, Дисс. . . . докт. физ.-мат. наук, ФТИ им. Иоффе, Санкт-Петербург (2009).
14. Б. М. Карнаков, Письма в ЖЭТФ **77**, 73 (2003); В. С. Попов, Письма в ЖЭТФ **77**, 79 (2003); Б. М. Карнаков, В. С. Попов, ЖЭТФ **124**, 996 (2003).
15. В. С. Попов, Б. М. Карнаков, С. Г. Поздняков, в сб. *Научная сессия МИФИ-2011*, т. 2 (2011), с. 177.
16. I. V. Khrplovich and G. Yu. Ruban, Laser Phys. **14**, 426 (2004).
17. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория*, Физматлит, Москва (2002).
18. A. E. Shabad and V. V. Usov, Phys. Rev. Lett. **98**, 180403 (2007); Phys. Rev. D **77**, 025001 (2008).
19. M. I. Vysotsky, Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz. **92**, 22 (2010).
20. B. Machet and M. I. Vysotsky, Phys. Rev. D **83**, 025022 (2011).
21. F. Sauter, Z. Phys. **69**, 742; **73**, 547 (1931).
22. W. Heisenberg and H. Euler, Z. Phys. **98**, 714 (1936).
23. J. Schwinger, Phys. Rev. **82**, 664 (1951).
24. А. И. Ахнезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1989).
25. И. М. Тернов, В. Г. Багров, В. А. Бордовицын, О. Ф. Дорофеев, ЖЭТФ **55**, 2273 (1968).
26. R. Jancovici, Phys. Rev. **187**, 2275 (1969).
27. R. G. Newton, Phys. Rev. **96**, 523 (1954); Phys. Rev. D **3**, 626 (1971).
28. Я. Б. Зельдович, ФТТ **1**, 1637 (1959).
29. В. С. Попов, ЖЭТФ **60**, 1228 (1971).
30. А. Е. Кудрявцев, В. Е. Маркушин, И. С. Шапиро, ЖЭТФ **74**, 432 (1978).
31. A. M. Badalyan, L. P. Kok, M. I. Polikarpov, and Yu. A. Simonov, Phys. Rep. **82**, 31 (1982).
32. Б. М. Карнаков, А. Е. Кудрявцев, В. Д. Мур, В. С. Попов, ЖЭТФ **94**, 65 (1988).
33. А. Е. Кудрявцев, В. С. Попов, Письма в ЖЭТФ **29**, 311 (1979).
34. А. А. Радциг, Б. М. Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов*, Энергоатомиздат, Москва (1986).
35. Л. А. Буреева, В. С. Лисица, *Возмущенный атом*, ИздАТ, Москва (1997).
36. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица и И. Стегун, Наука, Москва (1979).
37. А. С. Вайтман, *Проблемы в релятивистской динамике квантованных полей*, Наука, Москва (1968).