

© 1990 г.

В. М. Вайнберг, В. С. Попов, А. В. Сергеев

1/n-РАЗЛОЖЕНИЕ ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Построено 1/n-разложение для атома водорода в постоянных электрическом и магнитном полях. Суммирование 1/n-разложения позволяет найти с высокой точностью положение и ширину атомных уровней в сильном поле. Метод обобщается на резонансы у отталкивающего кулоновского центра и на двухэлектронные атомы.

1. Исследование ридберговских состояний атомов и молекул, в том числе во внешних полях, является актуальной задачей атомной физики и вызывает в последние годы значительный интерес (см. обзоры [1, 2] и указанные в них ссылки). Вычислению уровней энергии атома водорода в постоянных электрическом и магнитном полях посвящены, например, работы [3–8]. Основным методом расчета вплоть до настоящего времени является теория возмущений. Между тем, благодаря развитию лазерной техники и атомной спектроскопии, становится доступной область сильных полей, сравнимых с полем на атомной орбите электрона (особенно для ридберговских состояний, $n \gg 1$). В этом случае естественно использовать 1/n-разложение, поскольку в задаче имеется малый параметр 1/n.

В данной работе, являющейся продолжением [9], полуклассическое 1/n-разложение применяется к задаче об атоме водорода в электрическом ($\vec{\mathcal{E}}$) и магнитном ($\vec{\mathcal{H}}$) полях. Мы ограничимся случаем параллельных полей и, в основном, состояниями с $|m| = n - 1$ (m — магнитное, n — главное квантовое число уровня). Такие состояния в пределе $n \rightarrow \infty$ минимизируют соотношения неопределенностей $\Delta p_r \Delta r$ и $\Delta p_z \Delta z$ (т. е. для радиальной и поперечной к плоскости орбиты компонент p и r), поэтому они наиболее близки к классической механике [9, 10]. Это значительно упрощает вычисления, особенно в низших порядках по 1/n.

2. Основные уравнения. Изложим весьма наглядный вывод уравнений 1/n-разложения (ср. с аналогичным подходом [11] для эффекта Штарка). Воспользуемся тем, что в случае больших квантовых чисел применима модель атома Бора, причем безузельному ($|m| = n - 1$) состоянию отвечает круговая орбита электрона, перпендикулярная к оси z , вдоль которой направлены поля $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$. Из рис. 1 ясно, что при включении внешних полей классическая орбита смещается и изменяет свой радиус, оставаясь по-прежнему круговой (т. е. является устойчивой). Пара-

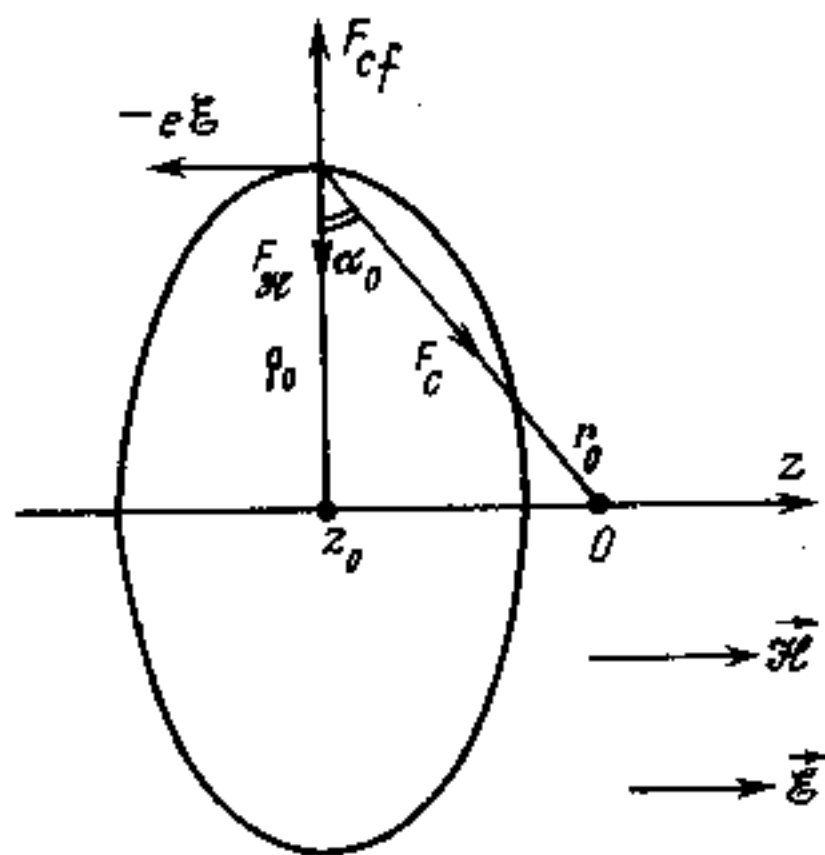


Рис. 1. Классическая орбита электрона, отвечающая состояниям с $m = n - 1 \gg 1$ (ядро расположено в начале координат). Показаны силы, действующие на электрон в системе покоя: $F_c = e^2/r_0^2$, $F_{cf} = v^2/\rho_0$, $F_{ze} = (e/c)v\mathcal{H}$

метры орбиты определяются из условия равновесия сил в системе покоя электрона и условия квантования проекции момента ¹⁾:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint (p_\varphi - A_\varphi) \rho d\varphi = m, \quad \mathbf{p} = \mathbf{v} + 1/2 [\mathcal{H} \mathbf{r}],$$

где $\rho = (r^2 - z^2)^{1/2}$, а \mathbf{v} — скорость электрона. Выполняя масштабное преобразование

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= n^2 \tilde{\mathbf{r}}, & \mathbf{v} &= \tilde{\mathbf{v}}/n, & F &= n^4 \mathcal{E}, & B &= n^3 \mathcal{H}, \\ \varepsilon &= 2n^2 E = \varepsilon' - i\varepsilon'', \end{aligned} \quad (1)$$

переходим к приведенным переменным ε , F и т. д., которые остаются конечными при $n \rightarrow \infty$ («ридберговский предел»). Здесь $m/n = \pm(1 - n^{-1}) \rightarrow \pm 1$. С учетом рис. 1 имеем (для краткости далее мы опускаем тильду над \tilde{r} и \tilde{v}):

$$\rho r^{-3} - Bv = v^2 \rho^{-1}, \quad F = -zr^{-3}, \quad \rho(v + 1/2 B\rho) = 1, \quad (2)$$

где $\rho = (r^2 - z^2)^{1/2} = r(1 - F^2 r^4)^{1/2}$. Исключая скорость v , приходим к уравнению, определяющему расстояние $r = r_0(F, B)$ от ядра до равновесной орбиты электрона:

$$r(1 - F^2 r^4)^2 (1 + 1/4 B^2 r^3) = 1. \quad (3)$$

В области слабых полей

$$\begin{aligned} r_0 &= 1 + 2F^2 - 1/4 B^2 + 19F^4 + 1/4 B^4 - 4F^2 B^2 + \dots, \\ \rho_0 &= 1 + 3/2 F^2 - 1/4 B^2 + 111/8 F^4 + 1/4 B^4 - 27/8 F^2 B^2 + \dots, \\ \alpha_0 &= F(1 + 25/8 F^2 - 1/2 B^2 + \dots) \end{aligned} \quad (4)$$

(обозначения см. на рис. 1). Таким образом, электрическое поле увеличивает радиус орбиты и смещает ее, магнитное — сжимает орбиту; см. также формулу (A.12) в Приложении А. Отметим, что в отсутствие электрического поля уравнение (3) переходит в уравнение, полученное в работе [12], а в случае $B=0$ — в уравнение (4) из [11]. В этих двух случаях можно вычислить все коэффициенты разложения r_0 и приведенной энергии ε по степеням F и B (см. Приложение А).

Первый член $1/n$ -разложения

$$\varepsilon = \varepsilon^{(0)} + \frac{\varepsilon^{(1)}}{n} + \frac{\varepsilon^{(2)}}{n^2} + \dots \quad (5)$$

равен энергии электрона на равновесной орбите, второй ($\varepsilon^{(1)}$) определяется малыми колебаниями вокруг нее:

$$\varepsilon^{(0)} = 2U(r_0) = \frac{2}{\rho_0^2} + \frac{\rho_0^2}{r_0^3} - \frac{4}{r_0}, \quad (6)$$

$$\varepsilon^{(1)} = (2n_1 + 1)\omega_1 + (2n_2 + 1)\omega_2 - \frac{2(n_1 + n_2 + 1)}{\rho_0^2},$$

где $n_1 + n_2 + 1 = n - |m| = 1, 2, 3, \dots$; $n_i \geq 0$ — осцилляторные квантовые числа, а частоты ω_i равны:

$$\omega_{1,2} = \{r_0^{-3} + 1/2 B^2 \pm [9F^2 r_0^{-3} + 3F^2 B^2 r_0 + 1/4 B^4]^{1/2}\}^{1/2} \quad (7)$$

(см. подробнее в Приложении В). Высшие порядки $1/n$ -разложения ($\varepsilon^{(k)}$, $k \geq 2$), учитывают ангармонизм в эффективном потенциале $U(\mathbf{r})$ и могут

¹⁾ Далее используются атомные единицы $\hbar = m_e = e = 1$. Единицей напряженности электрического поля является $\mathcal{E}_0 = m_e^2 e^5 / \hbar^4 = 5,142 \cdot 10^9$ В/см, а единица напряженности магнитного поля $\mathcal{H}_0 = m_e^2 e^3 c / \hbar^3 = 2,350 \cdot 10^9$ Гс.

быть вычислены по рекуррентным соотношениям теории возмущений Рэ-
 лая — Шредингера для ангармонического осциллятора (ср. с работами
 [12—14]).

Как и в случае эффекта Штарка, эффективный потенциал $U(r)$, оп-
 ределяемый формулой (В.3), обладает минимумом лишь в достаточно
 слабом электрическом поле — при $F < F_*(B)$. При $F = F_*$ частота ω_2 обра-
 щается в нуль, что отвечает пересечению двух классических решений;
 при этом рассматриваемая нами равновесная орбита теряет устойчи-
 вость²⁾. Отсюда получаем уравнение

$$1 + B^2 r^3 - 9F^2 r^4 - 3F^2 B^2 r^7 = 0, \quad (8)$$

которое вместе с (3) определяет $F_*(B)$. Заметим, что уравнение (8) сле-
 дует также из условия $(\partial\varphi/\partial r)|_{r=r_0} = 0$, отвечающего слиянию двух кор-
 ней уравнения (3) с последующим выходом их в комплексную плоскость
 (здесь $\varphi = \varphi(r; F, B)$ — полином, стоящий в левой части уравнения (3)).
 Отсюда

$$F_*(B) = \begin{cases} F_*(0) [1 + aB^2 + O(B^4)], & B \rightarrow 0, \\ c_1 B + c_2 B^{1/2} + c_3 + O(B^{-1/2}), & B \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (9)$$

где $F_*(0) = 2^{12} \cdot 3^{-9} = 0,2081$, $a = 3^{12} \cdot 2^{-19} \approx 1,014$, $c_1 = 3^{-3/2}$, $c_2 = 2/27$ и $c_3 = 11 \cdot 3^{-9/2} \cdot 2^{-1}$ (см. (А.13) в Приложении А).

Следуя [3], можно назвать F_* классическим порогом ионизации. За-
 висимость F_* от B представлена на рис. 2. Отметим, что при $F_* \gtrsim 0,5$ она
 близка к линейной. Дополнительно на рис. 2 изображена зависимость
 $F_*(B)$ для отталкивающего кулоновского центра (кривая 2, подробности
 см. ниже в п. 5).

Используя формулы (6) и (А.10), получаем разложение приведенной
 энергии ϵ при любом n :

$$\begin{aligned} \epsilon_n = \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^{(k)} n^{-k} = & -1 + \frac{1}{4} (1 + n^{-1}) \left[-(4 + 5n^{-1}) F^2 + B^2 - \right. \\ & - \frac{1}{16} (192 + 933n^{-1} + 1550n^{-2} + 880n^{-3}) F^4 - \frac{1}{48} (12 + 27n^{-1} + 14n^{-2}) B^4 + \\ & + \frac{1}{8} (24 + 75n^{-1} + 60n^{-2}) F^2 B^2 - \frac{1}{128} (11\,776 + 109\,013n^{-1} + \\ & + 415\,522n^{-2} + 814\,928n^{-3} + 821\,540n^{-4} + 340\,000n^{-5}) F^6 + \\ & + \frac{1}{1\,152} (216 + 1\,089n^{-1} + 2\,048n^{-2} + 1\,700n^{-3} + 528n^{-4}) B^6 - \\ & - \frac{1}{384} (1\,440 + 8\,361n^{-1} + 17\,918n^{-2} + 16\,380n^{-3} + 5\,096n^{-4}) F^2 B^4 + \\ & \left. + \frac{1}{128} (3\,840 + 27\,735n^{-1} + 77\,220n^{-2} + 98\,160n^{-3} + 48\,000n^{-4}) F^4 B^2 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Коэффициенты при B^4 и B^6 отличаются от соответствующих коэффици-
 ентов в разложении (22) из работы [16]. Для $n=1$ имеем

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = & -1 - \frac{9}{2} F^2 + \frac{1}{2} B^2 - \frac{3\,555}{32} F^4 - \frac{53}{96} B^4 + \frac{159}{16} F^2 B^2 - \frac{2\,512\,779}{256} F^6 + \\ & + \frac{5\,581}{2\,304} B^6 + \frac{254\,955}{256} F^4 B^2 - \frac{49\,195}{768} F^2 B^4 + \dots, \end{aligned} \quad (10')$$

²⁾ Эта ситуация является общей и имеет место, например, при вычислении $\epsilon^{(0)}$
 для потенциалов Юкавы и Хюльтена [15].

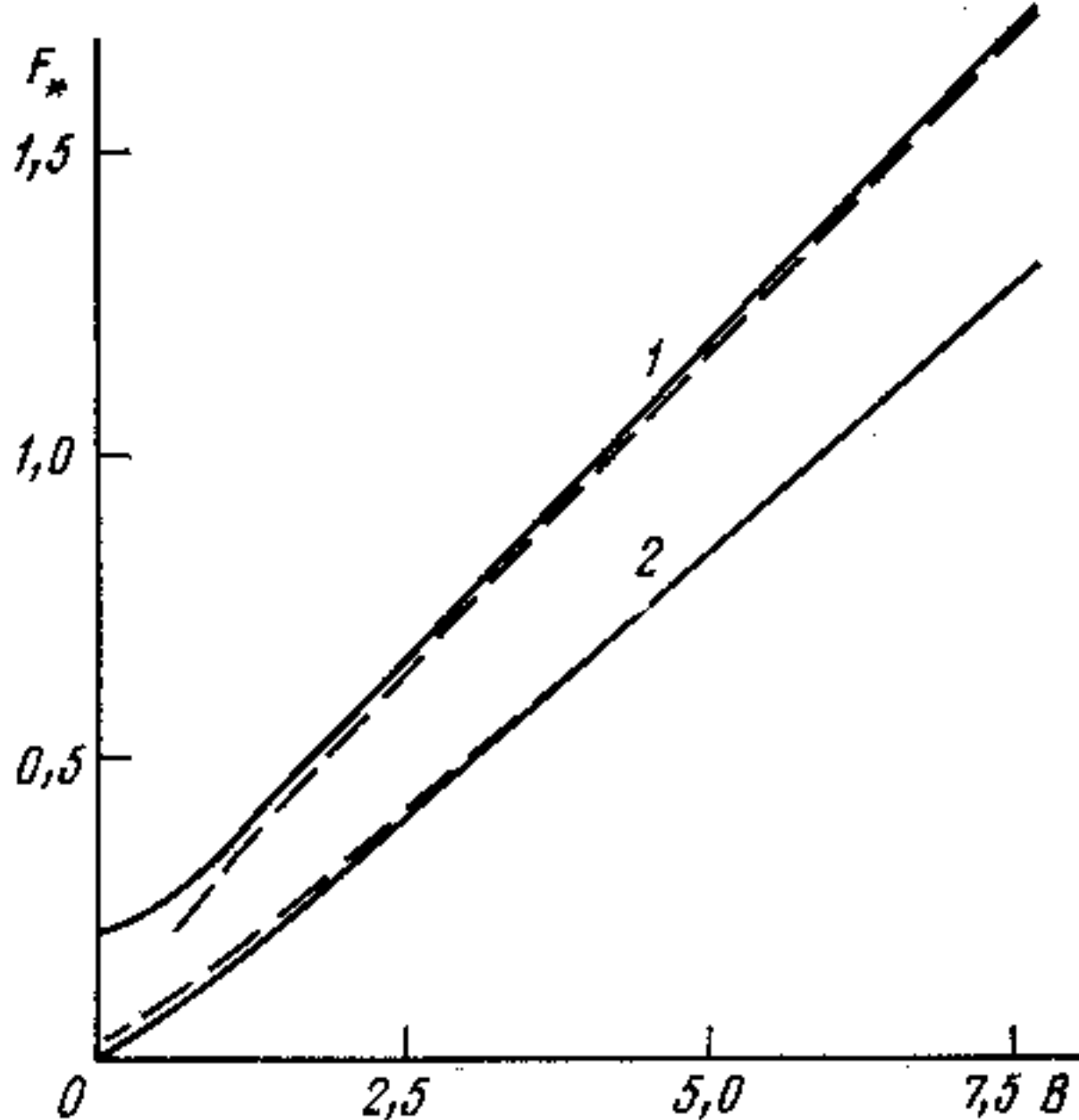


Рис. 2. Классический порог ионизации $F_*(B)$ при наличии магнитного поля: 1 — атом водорода, 2 — резонанс у отталкивающего центра. Штрихами показаны асимптотики при $B \rightarrow \infty$, см. формулы (9') и (12')

что согласуется с разложением энергии основного состояния в случае $\vec{\mathcal{E}} \parallel \vec{\mathcal{H}}$, полученным другими методами³⁾.

Отметим, что для нефизических значений $n = m + 1 = -1, -2, -3, \dots$ уравнение Шредингера допускает решение:

$$\psi(\mathbf{r}) = \left\{ (\xi\eta)^{m/2} \sum_{i,j \geq 0} c_{ij} \xi^i \eta^j + (\xi\eta)^{-m/2} \sum_{i,j \geq 0} c'_{ij} \xi^i \eta^j \right\} e^{im\varphi},$$

где $\xi = r + z$, $\eta = r - z$, φ — параболические координаты. Для коэффициентов c_{ij} нетрудно получить рекуррентные соотношения, которые в простейшем случае $n = -1$ имеют следующий вид:

$$(i^2 - 1)c_{i+1, j} + (j^2 - 1)c_{i, j+1} + c_{ij} + \frac{1}{4}\mathcal{E}(c_{i-2, j} - c_{i, j-2}) - \frac{1}{16}\mathcal{H}^2(c_{i-2, j-1} + c_{i-1, j-2}) + \frac{1}{2}E(c_{i-1, j} + c_{i, j-1}) = 0.$$

Из них определяется сингулярная часть волновой функции

$$\psi_{\text{синг}} = (\xi\eta)^{-1} (1 + \frac{1}{2}\xi) (1 + \frac{1}{2}\eta) e^{-2i\varphi},$$

причем $E = -1/2$ при всех $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$ (т. е. смещение «уровня» с $n = -1$ равно нулю). Отсюда следует, что во всех членах разложения (10), за исключением начального, можно вынести за скобки множитель $(n+1)$, что и сделано в (10).

Не имея возможности входить в дальнейшие детали, укажем лишь, что существование точных решений при $n = -1, -2, \dots$ тесно связано с конечномерными неунитарными представлениями группы $O(2, 1)$.

При $F > F_*(B)$ радиус классической орбиты и коэффициенты $\varepsilon^{(A)}$ становятся комплексными. Такое решение теряет смысл в классической меха-

³⁾ См. [4-6], а также работу [7] для произвольного угла между $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$ (следует отметить, что коэффициенты разложения, приведенные в [6], содержат ошибки; см. в этой связи [7, 17]).

Коэффициенты $1/n$ -разложения $\varepsilon^{(k)}$

k	$F=0,1, B=1$	$F=0,2, B=1$	$F=B=1$	$F=1, B=0,1$
0	-0,7951	-0,81559	-1,16248-0,49863i	-1,286-0,601i
1	0,1461	0,10452	0,06450-0,67977i	0,0211-0,7219i
2	-0,04680	-0,07538	0,00041+0,03463i	0,0585+0,4003i
3	0,01052	-0,01070	0,04153-0,00902i	0,03590-0,00523i
4	-0,003872	-0,03119	-0,04913-0,03432i	-0,03705-0,02935i
5	0,001246	-0,05083	-0,02663+0,09148i	-0,02441+0,05817i
6	-0,001145	-0,12158	0,23497-0,00099i	0,1434+0,0233i
7	0,001337	-0,34250	-0,21248-0,64715i	-0,0475-0,3733i
8	-0,002298	-1,12927	-1,94255+1,36108i	-1,110+0,443i
9	0,003656	-4,24186	7,56330+5,78870i	2,665+3,437i
10	-0,025965	-17,8976	14,7197-40,5717i	10,646-14,320i

Примечание. Коэффициенты $\varepsilon^{(k)}$ являются комплексными при $F > F_*(B)$, причем $F_*(0,1) = 0,2102$, а $F_*(1,0) = 0,345$.

Таблица 2

Приведенные энергии состояний с $m = n - 1$ в параллельных полях \vec{E} и \vec{H}

n	$B = n^2 \mathcal{H}$		
	0,1	0,5	1,0
1	1,246+1,292i	1,210+1,256i	1,084+1,155i
2	1,2717+0,9532i	1,2384+0,9218i	1,1274+0,8315i
3	1,27760+0,83750i	1,24573+0,80792i	1,13994+0,72186i
5	1,28150+0,74380i	1,25079+0,71568i	1,14931+0,63330i
10	1,283974+0,672744i	1,254163+0,645764i	1,155989+0,566273i

Примечание. В таблице приведены значения $-\varepsilon_n$ при $F = n^2 \mathcal{H} = 1,0$ и различных B .

нике, но при переходе к квантовой механике именно оно открывает возможность описания (в рамках $1/n$ -разложения) не только сдвига, но также и ширины уровней в сильном поле.

3. Результаты расчетов. В табл. 1 приводятся первые 11 коэффициентов $1/n$ -разложения $\varepsilon^{(k)}$ (при $F < F_*$ все $\varepsilon^{(k)}$ — вещественные, при $F > F_*$ — комплексные; $F_*(1) = 0,345$). Типичное поведение коэффициентов $\varepsilon^{(k)}$: вначале (до $k = 3 \div 6$) они убывают, затем начинают возрастать. При $k \gg 1$ рост $|\varepsilon^{(k)}|$ становится факториальным, поэтому для вычисления энергии с высокой точностью необходимо использование методов суммирования расходящихся рядов (в этой связи см. [3, 14, 18, 19]).

Результаты суммирования $1/n$ -разложения для приведенной энергии ε_n даны в табл. 2. При $F > F_*$ использовались аппроксиманты Паде (АП) $[L/M]$, при $F < F_*$ — квадратичные аппроксиманты Паде — Эрмита (АПЭ) $[L, M, N]$. Указаны только те десятичные знаки, которые стабилизировались у АП $[4/5]$ и $[5/5]$ или у АПЭ $[3, 3, 2]$ и $[3, 3, 3]$. Даже в наименее благоприятном случае (основное состояние, параметр разложения $1/n = 1$) точность определения энергии $\sim 10^{-4}$, а с ростом n она быстро возрастает. При $n = 1$ результаты суммирования согласуются с результатами численного интегрирования уравнения Шредингера [20].

Часть полученных результатов приведена на рис. 3 и 4 (для безузельных состояний: $n_1 = n_2 = 0$, $m = n - 1$, $n = 3$ и 5; см. также [10]). Сплошные линии — вещественная ($\varepsilon_n' = 2n^2 \operatorname{Re} E_n$) и мнимая ($\varepsilon_n'' = n^2 \operatorname{Im} E_n$) части приведенной энергии в зависимости от электрического поля F для нескольких фиксированных значений B (разрывы на кривых ε_n' соответствуют той области значений F вблизи F_* , в которой $1/n$ -разложение плохо сходится).

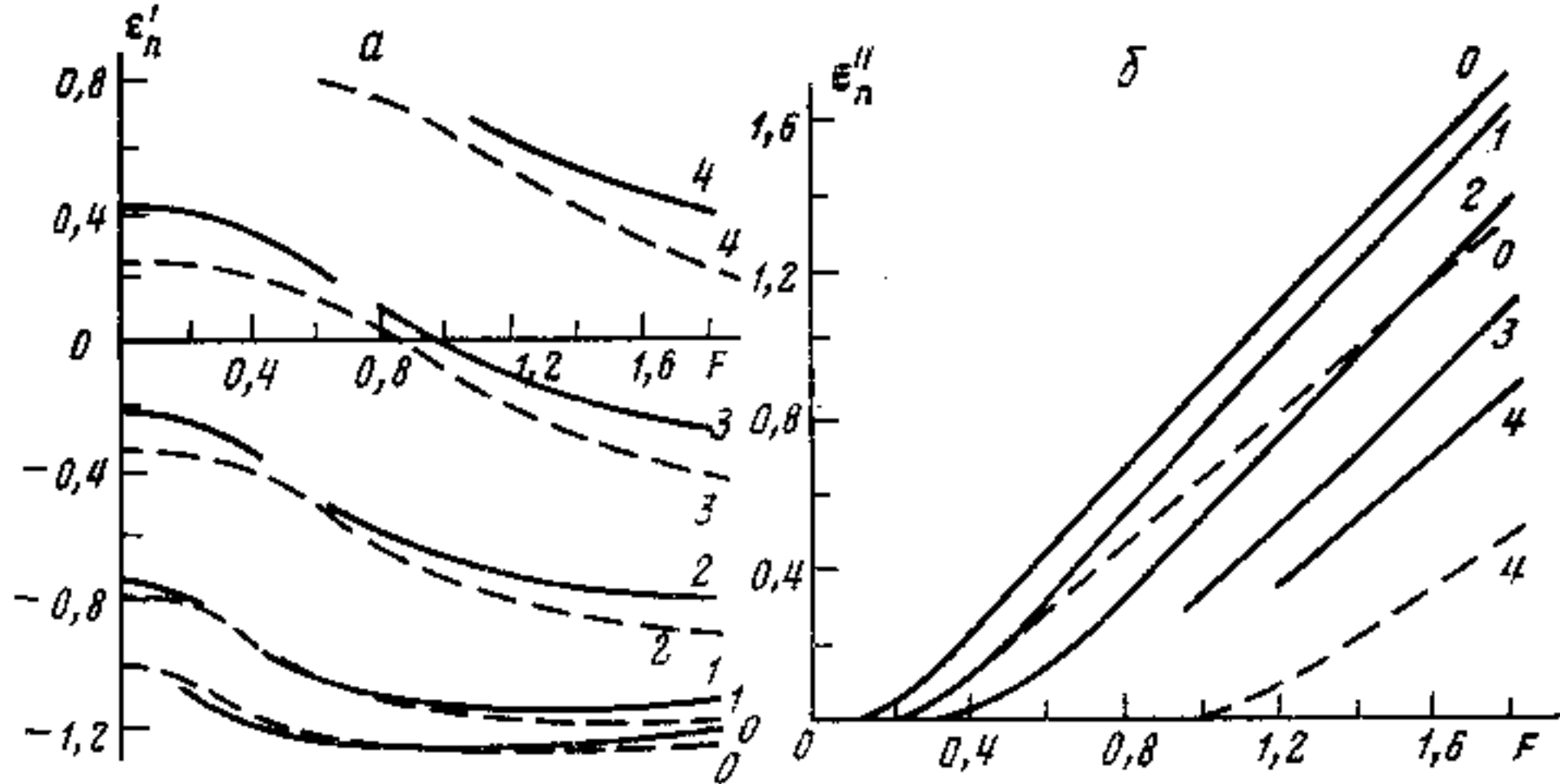


Рис. 3. Вещественная (а) и мнимая (б) части энергии $\epsilon_n = 2n^2 E_n = \epsilon'_n - i\epsilon''_n$ для состояний с $m=n-1$ ($n=3$). Сплошные кривые получены суммированием $1/n$ -разложения методом ЛП, штриховые — классическое приближение $\epsilon^{(0)}$. У кривых указаны значения B

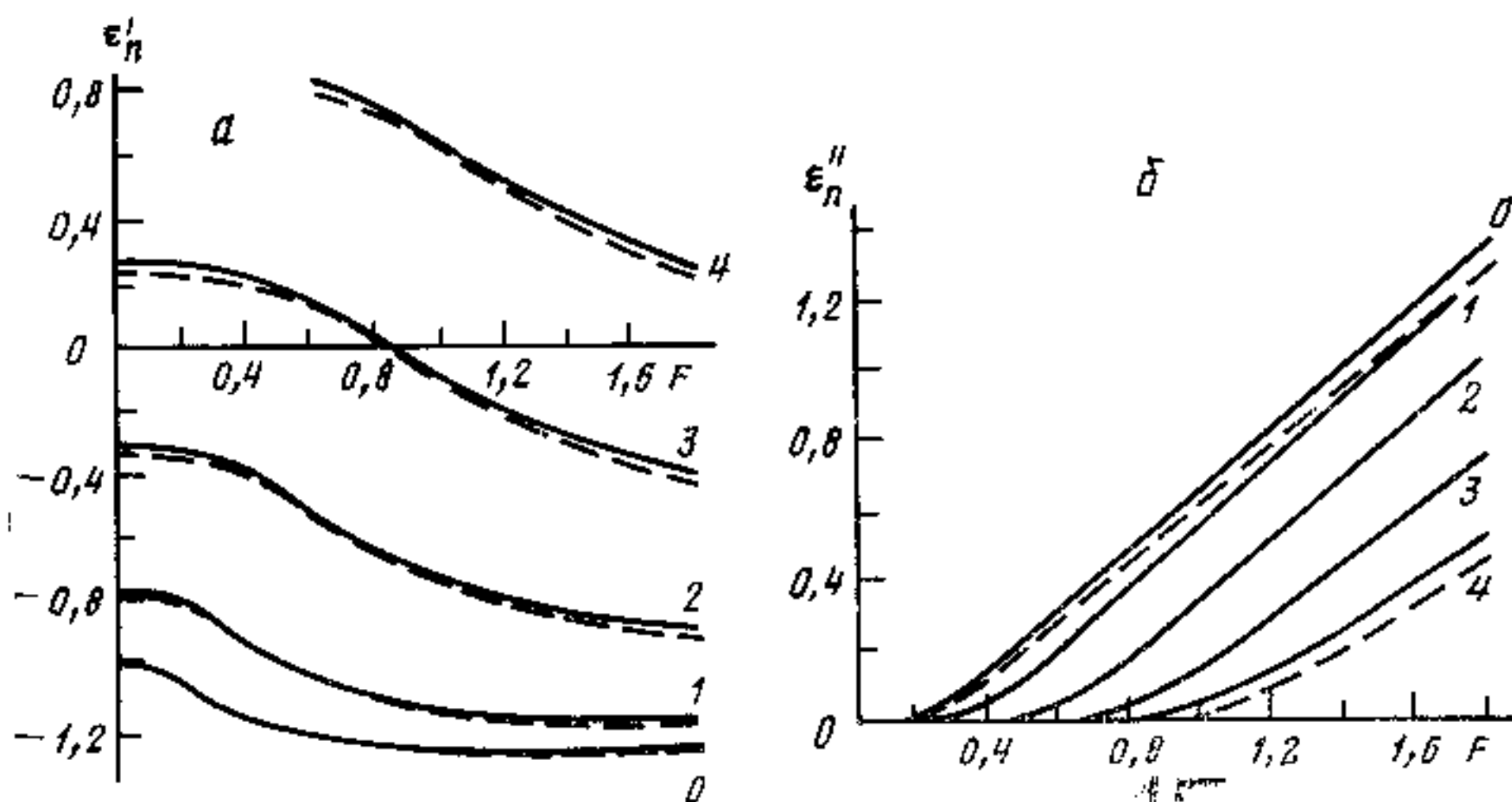


Рис. 4. То же, что на рис. 3, для состояния с $n=5$ ($m=4$)

Для сравнения штрихами показаны вещественная и мнимая части классической энергии $\epsilon^{(0)}$. Видно, что $\text{Re } \epsilon^{(0)}$ уже передает качественно зависимость энергии от поля; что касается $\text{Im } \epsilon^{(0)}$, то она является довольно грубым приближением (см. рис. 3, б), т. е. без суммирования ряда (5) здесь не обойтись. В целом видно, что $1/n$ -разложение является вполне эффективным методом расчета, особенно для ридберговских состояний.

4. Сделаем несколько дополнительных замечаний.

а. Как показывают расчеты, энергия уровня повышается с ростом B (см. рис. 3, а и 4, а). Это объясняется сжатием классической орбиты, в силу чего электрон приближается к ядру. При $B \rightarrow \infty$ и фиксированном F имеем (см. формулу (А.11))

$$r_0(F, B) = \beta \left[1 - \frac{1}{4} \beta - \frac{1}{32} \beta^2 + \frac{5}{256} \beta^3 + \frac{1}{2} \left(\frac{7}{1024} + F^2 \right) \beta^4 + \dots \right] \quad (11)$$

где $\beta = (B/2)^{-1/2} \rightarrow 0$. Что касается ширины Γ_n (т. е. вероятности распада атомного уровня под действием электрического поля), то магнитное поле уменьшает ее, а электрическое — увеличивает (см. рис. 3). Следует отме-

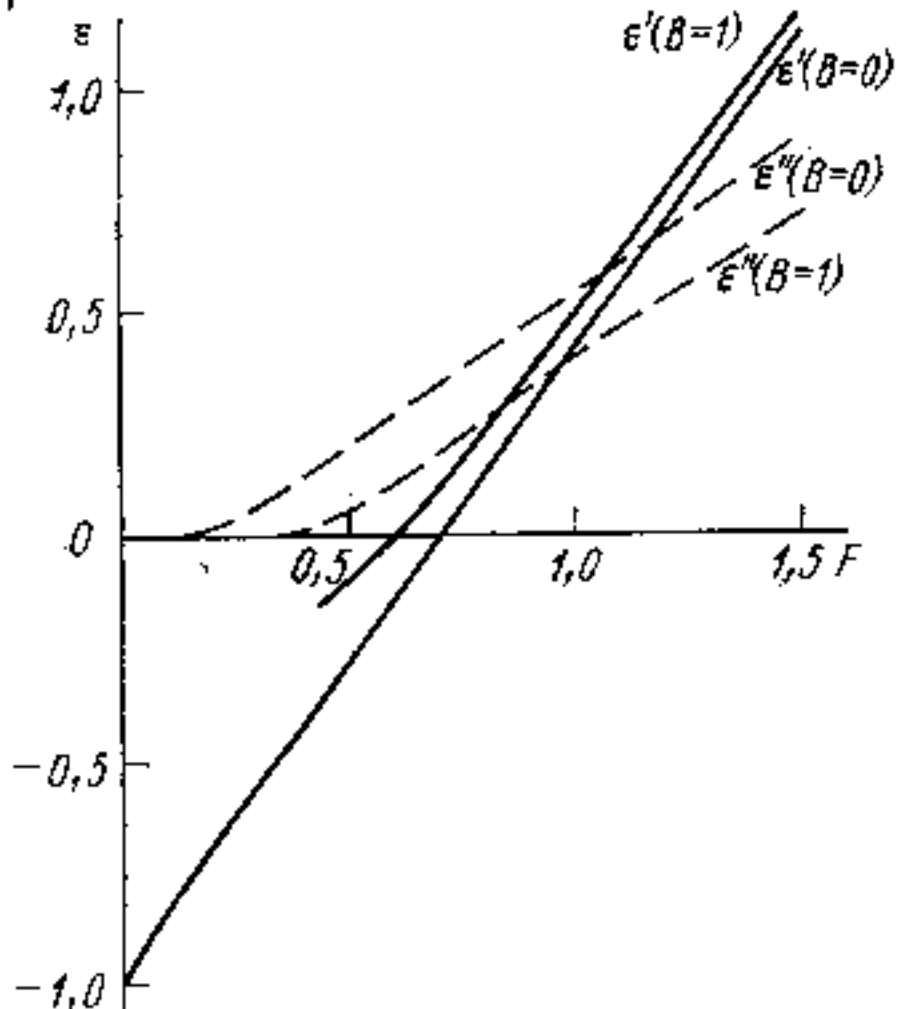


Рис. 5

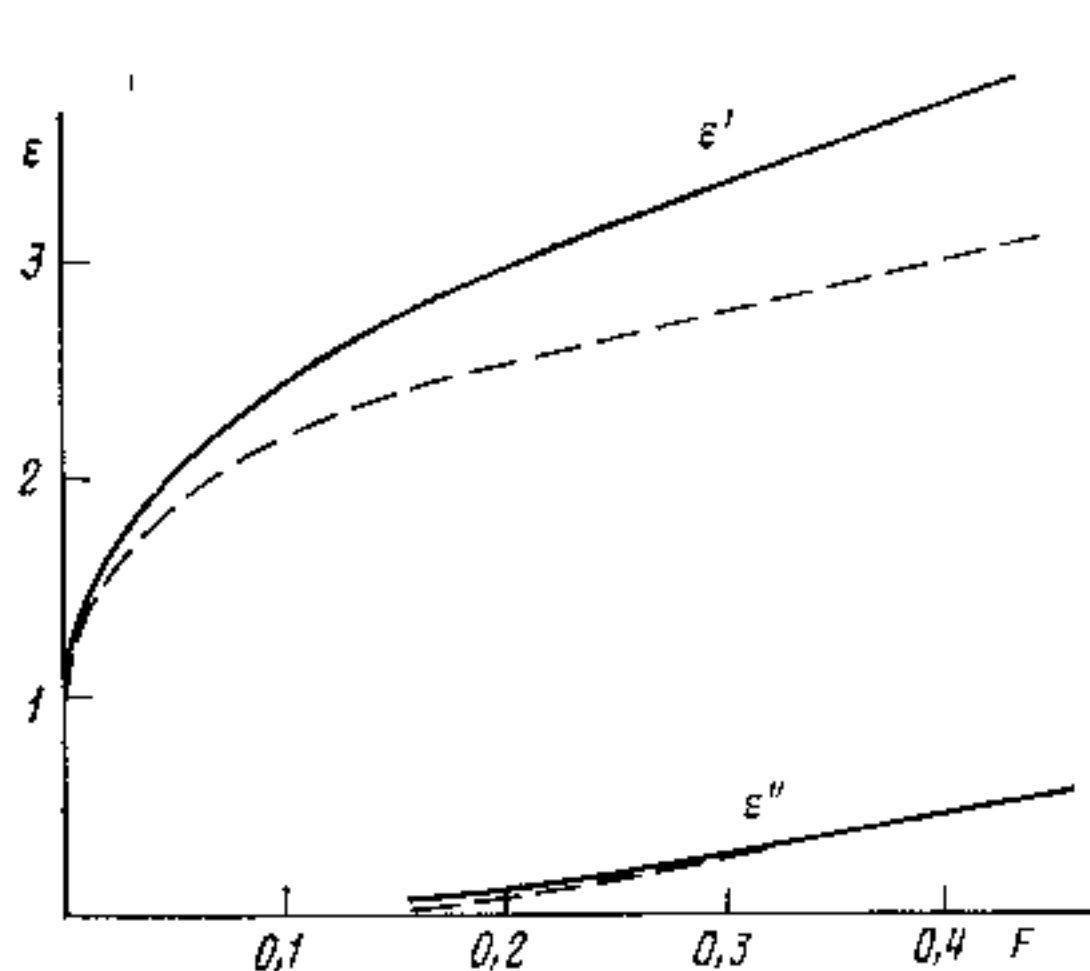


Рис. 6

Рис. 5. Влияние магнитного поля на положение и ширину штарковского уровня (для состояния $|2, 0, 0\rangle$, $n=3$). Кривые получены суммированием $1/n$ -разложения (при $B=0$ они относятся к обычному эффекту Штарка в атоме водорода)

Рис. 6. Квазистационарное состояние у отталкивающего кулоновского центра ($Z=-1$) при $B=1$. Здесь $\varepsilon=2E=\varepsilon'-i\varepsilon''$, $F=\mathcal{E}$. Сплошные кривые — результаты суммирования $1/n$ -разложения, штриховые — классическая энергия $\varepsilon^{(0)}$

тить, что в области $F > F_*$ зависимость ширины Γ_n от F близка к линейной, как и в случае эффекта Штарка [12].

б. Приведенные в п. 3 результаты относятся к состояниям с $n=m+1$, которые в пределе $n \rightarrow \infty$ переходят в основное ($n_1=n_2=0$) состояние двумерного осциллятора. Однако рассматриваемый метод может быть обобщен и на возбужденные состояния, что не встречает принципиальных затруднений. При этом в (5) первый член $\varepsilon^{(0)}$, а также значения ω_1 , ω_2 и ρ_0 не меняются, член $\varepsilon^{(1)}$ приведен в (6), а следующие коэффициенты $\varepsilon^{(k)}$ хотя и усложняются⁴⁾, но могут быть вычислены с помощью рекуррентных соотношений. Такое обобщение представляет интерес для состояний с $n_1, n_2 \ll m$. Результаты расчетов для состояния $|2, 0, 0\rangle$ приведены на рис. 5.

Сходимость $1/n$ -разложения для состояний с различными квантовыми числами иллюстрирует табл. 3.

в. Для атома водорода в параллельных полях $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$ ранее использовалась теория возмущений [5, 6] и полуклассические методы [8] для состояний с $n \sim 30$ и $|m|=0, 1$ (помимо приведенных выше ссылок, укажем на обзор [2] и цитированную там литературу). Результаты расчетов для состояний с $m \sim n \gg 1$ являются новыми.

5. В параллельных полях $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$ электронные резонансы возникают не только у притягивающего кулоновского центра (протона), но и у отталкивающего центра (антипротона). До сих пор резонансы ($\bar{p}e$) не наблюдались на эксперименте и не изучались теоретически. В то же время они могут проявляться при рассеянии электронов на антипротонах (или позитронов на протонах) в области, где действуют поля $\vec{\mathcal{E}}$ и $\vec{\mathcal{H}}$, а теория подобных резонансов получится простым обобщением соответствующей теории для атома водорода.

Магнитное поле стабилизирует резонансы у отталкивающего центра. При больших \mathcal{H} в классическом пределе $n \rightarrow \infty$ подобным состояниям отве-

⁴⁾ Ср. с формулой (2.5) в [9] для случая потенциалов со сферической симметрией.

Сходимость $1/n$ -разложения для различных состояний при $F = B = 1$

	(n_1, n_2, m)			
	(0, 0, 0)	(0, 0, 1)	(0, 1, 0)	(1, 0, 0)
ε_{osc}	-1,0980— 1,1784i	-1,13023— 0,83852i	-2,147— 1,616i	-0,0489— 0,7405i
$[4/4]$	-1,0843— 1,1541i	-1,12739— 0,83146i	-2,475— 1,258i	0,0822— 0,5802i
$[4/5]$	-1,0836— 1,1557i	-1,12736— 0,83148i	-2,486— 1,238i	0,0830— 0,5812i
$[5/5]$	-1,0843— 1,1545i	-1,12738— 0,83147i	-2,483— 1,233i	0,0828— 0,5817i

Примечание. Для каждого состояния в таблице приводятся осцилляторное приближение $\varepsilon_{osc} = \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(1)}n^{-1}$ и три аппроксиманты Паде $[L/M]$. При $F=B=1$ для всех состояний $\varepsilon^{(0)} = -1,16248 - 0,49863i$.

чает орбита электрона малого радиуса $\rho_0 = (2m/\mathcal{H})^{1/2}$, расположенная с катодной стороны от антипротона на расстоянии $z_0 = \mathcal{E}^{-1/2}$.

Для отталкивающего центра формулы $1/n$ -разложения (2), (3), (5)–(8), (B.1)–(B.4) по-прежнему будут справедливы, если заменить в них r на $-r$. В формуле (A.13) для определения $F_*(B)$ следует полагать $1 < \tau \leq 3$; соответствующая асимптотика имеет вид

$$F_*(B) = \begin{cases} (B/2)^{3/2} [1 - a' B^{2/3} + O(B^{1/3})], & B \rightarrow 0, \\ c_1 B - c_2 B^{1/2} + c_3 + O(B^{-1/2}), & B \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (12)$$

$$(12')$$

где $a' = 5 \cdot 3^{-1/2} \cdot 2^{1/3} \approx 11,9$, а c_1, c_2, c_3 — те же коэффициенты, что и в (9'). Если перейти к напряженностям \mathcal{E} и \mathcal{H} , то в слабом поле $n^3 \mathcal{H} \ll 1,5 \cdot 10^{-5}$ имеем $\mathcal{E}_* \approx (\mathcal{H}/2)^{1/2}$ независимо от n . Так, полю $\mathcal{H} = 100$ Гс при $n \ll 7$ отвечает $\mathcal{E}_* = 0,30$ В/см.

При $\mathcal{H} \rightarrow \infty$ движение электрона становится по существу одномерным, энергия равна $E = 1/2 n \mathcal{H} + E_z$, где $E_z \approx 2\mathcal{E}^{1/2}$ — энергия в одномерном потенциале $-1/z + \mathcal{E}z$. Коэффициенты $\varepsilon^{(k)}$ могут быть разложены по степеням B^{-1} :

$$\varepsilon^{(0)} = B + 4F^{1/2} - 2F^{1/2}B^{-1} - 3/2 F^{3/2}B^{-2} + O(B^{-3}), \quad (13)$$

$$\varepsilon^{(1)} = \sqrt{2} F^{3/4} - \frac{3\sqrt{2}}{2} F^{1/4} B^{-1} + \left(3F^{5/4} - \frac{63\sqrt{2}}{32} F^{11/4} \right) B^{-2} + O(B^{-3}).$$

При $\mathcal{E} \rightarrow 0$ имеем $\varepsilon^{(0)} \rightarrow B$, а $\varepsilon^{(k)} \rightarrow 0$ ($k \geq 1$); электрон удаляется от антипротона и переходит на уровень Ландау с энергией $\varepsilon = B$.

Энергия основного состояния в зависимости от F при $B=1$ изображена на рис. 6. Сплошные кривые — результаты суммирования $1/n$ -разложения, штриховые — классическая энергия $\varepsilon^{(0)}$. Оказалось, что ширина уровня растет очень медленно даже за классическим порогом ионизации (при $F > F_*(1) = 0,14$).

6. Для одноэлектронного атома $1/n$ -разложение совпадает с разложением по степеням $1/n'$ для основного состояния ($n' = (N-1)/2$), но в пространстве размерности $N \gg 1$ [9]. Для двухэлектронного атома это уже не так, однако $1/n'$ -разложение по-прежнему применимо. Полагая $n'=1$, можно таким образом рассчитать основное состояние реального трехмерного атома.

Выполняя масштабное преобразование, аналогичное (1), но с заменой $n \rightarrow n'$, приходим к уравнению Шредингера с эффективным потенциалом

$$U_{eff} = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} + F(z_1 + z_2) + \frac{B^2}{8}(\rho_1^2 + \rho_2^2) + U_c, \quad (14)$$

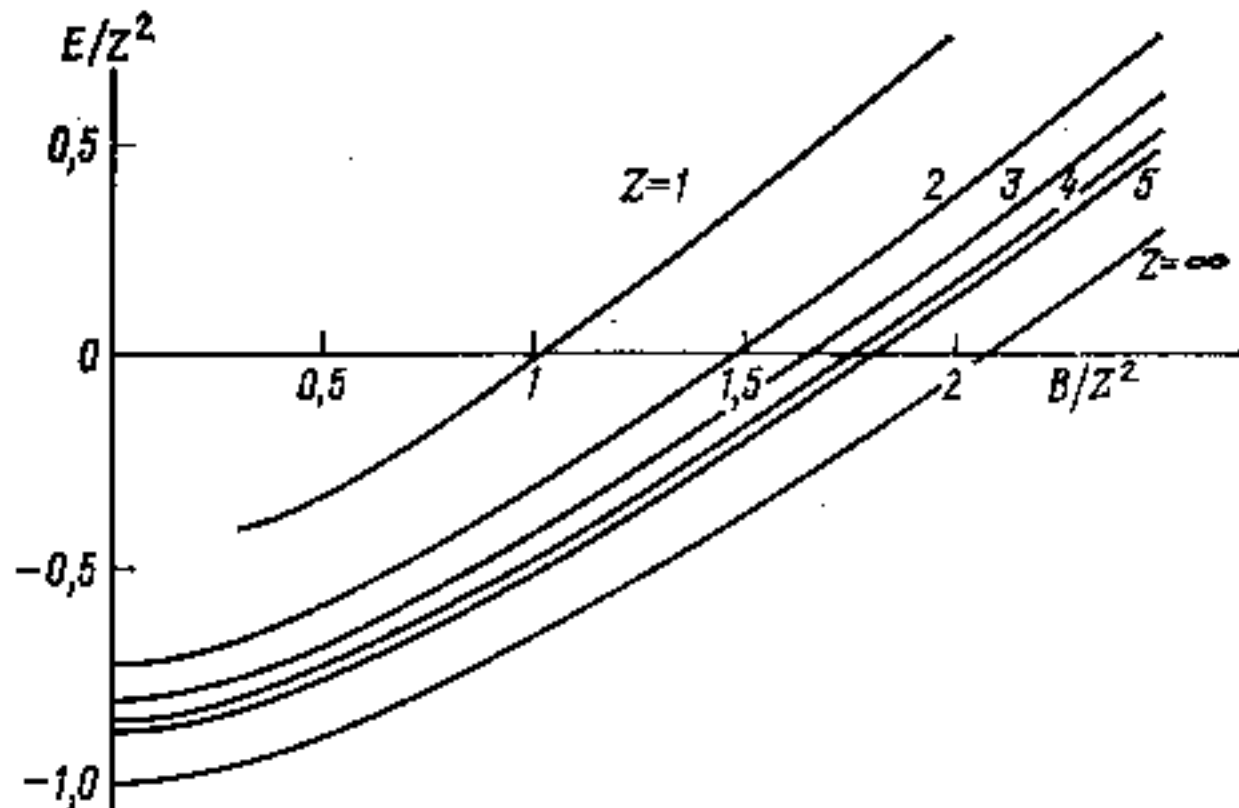


Рис. 7. Энергия основного состояния двухэлектронных атомов в магнитном поле

в которое $1/n'$ входит (перед вторыми производными) таким же образом, как и постоянная Планка \hbar (см. также [9]). В (14) Z — заряд ядра, U_c — центробежный потенциал⁵⁾,

$$U_c = (\hbar_1^{-2} + \hbar_2^{-2})/2,$$

где \hbar_i — высоты треугольника со сторонами $\rho_1, \rho_2, \rho_{12}$, опущенные на стороны ρ_i ; $\rho_i = (r_i^2 - z_i^2)^{1/2}$ ($i=1, 2$),

$$\rho_{12} = (r_{12}^2 - z_{12}^2)^{1/2}, \quad r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|.$$

В пределе $n' \rightarrow \infty$ энергия дается минимумом эффективного потенциала:

$$1/2 \varepsilon^{(0)} = U_{eff}(\rho_1^{(0)}, \rho_2^{(0)}, \rho_{12}^{(0)}, z_1^{(0)}, z_2^{(0)}).$$

В приближении гармонического осциллятора

$$\varepsilon = \varepsilon^{(0)} + \varepsilon^{(1)}/n', \quad \varepsilon^{(1)} = \sum_{i=1}^5 \omega_i - 6U_c. \quad (15)$$

Мы вычислили также ангармоническую поправку $\varepsilon^{(2)}/n'^2$, однако формула для нее очень громоздка и здесь не приводится.

Вследствие перестановочной симметрии у потенциала U_{eff} могут быть симметричные минимумы ($\rho_1^{(0)} = \rho_2^{(0)}$ и $z_1^{(0)} = z_2^{(0)}$) или двукратные асимметричные, характерные для состояний со слабо связанным электроном ($r_2^{(0)} \gg r_1^{(0)}$). Расчеты проводились только для наиболее простого случая симметричного минимума.

При $F=0$ симметричный минимум существует для $Z \geq 1,228$ при любых B , а для $Z=1$ — только при $B \geq 0,26$ (см. рис. 7). Результаты суммирования трех членов $1/n'$ -разложения (АП $[^1/1]$) для основного ($n=1$) состояния H^- и He в магнитном поле даны в табл. 4. АП $[^1/1]$ согласуются с вариационным расчетом [21] в пределах $\pm 0,03$. Исключение составляет случай $B=2$ для гелия. Низкая точность при $\mathcal{H}=B=2$ объясняется близостью к полюсу у АП $[^1/1]$ при $B=2,1$. В этом случае более точным будет АП $[^2/0] = -2,287$. С помощью АП $[^3/1]$ мы получили значение, составляющее 86% от величины диамагнитной восприимчивости для He и 90% — для Li^+ .

Энергия основного состояния двухэлектронных атомов в магнитном поле представлена на рис. 7. Использование переменных E/Z^2 и B/Z^2 позволяет охватить на одном рисунке все значения заряда ядра Z . Отметим, что кри-

⁵⁾ Он аналогичен члену $\tilde{\rho}^{-2}/2$ в уравнении (B.2) для атома водорода, возникающему после отделения угловой переменной φ .

Энергия основного состояния двухэлектронных атомов в магнитном поле. В первой строке приводятся результаты суммирования $1/n'$ -разложения, во второй — вариационный расчет [21]

\mathcal{H}	$E(\text{H-})$	$E(\text{He})$	\mathcal{H}	$E(\text{H-})$	$E(\text{He})$
0	— -0,528	-2,888 -2,904	2	0,756 0,765	-2,447 -2,327
0,2	— -0,479	-2,881 -2,894	3	1,586 1,598	-1,820 —
0,5	-0,329 -0,329	-2,846 -2,854	5	3,330 3,360	-0,598 —
1	-0,009 -0,002	-2,733 -2,727	10	7,900	3,046

вая с $Z=1$ обрывается при $B=0,26$ (при меньших значениях B необходимо провести вычисления для асимметричного минимума U_{eff}). В случае $Z \geq 2$ такое ограничение отсутствует и кривые начинаются с $B=0$.

При $B=0$ симметричный минимум потенциала U_{eff} существует лишь в достаточно слабых полях $F \leq F_c$ ($F_c=0,795$ для He и $3,720$ для Li^+). Сумма трех членов $1/n'$ -разложения дает 94% диэлектрической проницаемости для He и 99% — для Li^+ .

Приведем характерный пример суммирования $1/n'$ -разложения для гелия в параллельных полях $\mathcal{E}=0,5$ и $\mathcal{H}=1$:

$$\varepsilon^{(0)} = -5,3493, \quad \varepsilon^{(1)} = -0,5458, \quad \varepsilon^{(2)} = 0,3424,$$

откуда

$$E = \frac{1}{2} \varepsilon^{1/1} = \frac{1}{2} \left[\varepsilon^{(0)} + \frac{(\varepsilon^{(1)})^2}{\varepsilon^{(1)} - \varepsilon^{(2)}} \right] = -2,842.$$

7. В настоящее время $1/n$ -разложение (в различных его вариантах, отличающихся выбором параметра разложения $1/n$) широко применяется в квантовой механике и теории поля. При этом, однако, в большинстве работ рассматривается только случай дискретного спектра. В [15] было, по-видимому, впервые показано, что данный метод применим также к вычислению энергий и ширин ($E = \text{Re } E - i\Gamma/2$) квазистационарных уровней, если ввести в рассмотрение классические орбиты, удовлетворяющие уравнениям движения, но имеющие комплексные значения координат. Это позволило использовать $1/n$ -разложение в теории эффекта Штарка в сильном поле [3, 11], что оказалось особенно полезным в случае ридберговских состояний.

В данной работе с помощью $1/n$ -разложения решена задача об атоме водорода, помещенном в параллельные поля \mathcal{E} и \mathcal{H} . Основным результатом являются формула (10) и рекуррентные соотношения, позволяющие вычислять в принципе произвольный член $1/n$ -разложения. Суммирование этого разложения позволило нам вычислить положения и ширины различных состояний в сильных полях, сравнимых с атомным полем. Было рассмотрено также (см. разд. 6) $1/n$ -разложение для двухэлектронного атома.

Авторы благодарны В. Д. Муру, Н. Л. Манакову, Л. П. Рапопорту и А. И. Шерстюку за обсуждение работы и полезные замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Ряды теории возмущений и другие разложения

1) Обозначим через $x_0(\lambda)$ тот корень уравнения

$$x = 1 - \lambda x^a, \quad (\text{A.1})$$

который стремится к единице при $\lambda \rightarrow 0$. Применение теоремы Лагранжа (см. [22, стр. 178]) дает для любого показателя ν

$$x_0^\nu = 1 + \nu \sum_{k=1}^{\infty} c_k \lambda^k, \quad (\text{A.2})$$

где

$$c_k = \begin{cases} (-1)^k \Gamma(k\alpha + \nu) / k! \Gamma(k(\alpha - 1) + 1 + \nu), & \alpha > 0, \\ -\Gamma(k(\alpha' + 1) - \nu) / k! \Gamma(k\alpha' + 1 - \nu), & \alpha' = -\alpha \geq 0 \end{cases}$$

(в частности, $c_1 = -1$, $c_2 = \alpha + (\nu - 1)/2$ и т. д.). Здесь $\Gamma(x)$ — гамма-функция.

Заметим, что уравнение

$$x(1 - \lambda x^b)^a = 1 \quad (\text{A.3})$$

с помощью подстановки $x = t^{-a}$ сводится к предыдущему. В этом случае в (A.2)

$$c_k = a^{-1} \Gamma\left(\frac{k(a+b) + \nu}{a}\right) / k! \Gamma\left(\frac{kb + a + \nu}{a}\right), \quad a \neq 0, \quad (\text{A.4})$$

Полученные разложения сходятся при достаточно малых λ ; например, последнее — при

$$|\lambda| < \frac{a}{a+b} \left(1 + \frac{a}{b}\right)^{-b/a}. \quad (\text{A.5})$$

2) Уравнение (3) при $F=0$ сводится к (A.3) с параметрами $a=1$, $b=3$ и $\lambda = -1/4 F^2$, откуда

$$r_0(0, B) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(4k)!}{2^{2k} k! (3k+1)!} B^{2k}. \quad (\text{A.6})$$

Учитывая также, что в данном случае

$$z_0 = 0, \quad \rho_0 = r_0, \quad \varepsilon^{(0)} = \frac{1}{r_0^2} - \frac{2}{r_0} + \frac{1}{4} B^2 r_0^2 = \frac{2}{r_0^2} - \frac{3}{r_0},$$

легко находим

$$\varepsilon^{(0)}(0, B) = -1 + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{(4k-3)!}{2^{2k-1} k! (3k-1)!} B^{2k} \quad (\text{A.7})$$

(эти ряды сходятся при $|B| < 3^{3/2}/8 = 0,6495$).

Разложение, аналогичное (A.7), приведено в работе [16] (формула (24)), но с ошибками в коэффициентах при B^4 и B^6 .

3) Если $B=0$, то $a=2$, $b=4$, $\lambda = F^2$ и

$$r_0(F, 0) = 1 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Gamma(3k + 1/2)}{k! \Gamma(2k + 3/2)} F^{2k}, \quad (\text{A.8})$$

$$\varepsilon^{(0)}(F, 0) = -1 - 6 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(9k-4)!}{k! (8k-2)!} F^{2k} \quad (\text{A.9})$$

(область сходимости: $|F| < 0,2081$, см. [3, 11]). Заметим, что в магнитном поле ряды теории возмущений являются знакопеременными, в то время как в случае электрического поля коэффициенты разложения сохраняют свой знак. Это непосредственно связано с положением ближайшей особой точки по B^2 (или F^2).

4) Приведем первые члены рядов теории возмущений для коэффициентов $1/n$ -разложения (5):

$$\begin{aligned}\varepsilon^{(0)} &= -1 - F^2 + \frac{1}{4} B^2 - 3F^4 - \frac{1}{16} B^4 + \frac{3}{4} F^2 B^2 + \dots, \\ \varepsilon^{(1)} &= -\frac{9}{4} F^2 + \frac{1}{4} B^2 - \frac{1125}{64} F^4 - \frac{13}{64} B^4 + \frac{99}{32} F^2 B^2 + \dots, \\ \varepsilon^{(2)} &= -\frac{5}{4} F^2 - \frac{2483}{64} F^4 - \frac{41}{192} B^4 + \frac{135}{32} F^2 B^2 + \dots, \\ \varepsilon^{(3)} &= -\frac{1215}{32} F^4 - \frac{7}{96} B^4 + \frac{15}{8} F^2 B^2 + \dots, \\ \varepsilon^{(4)} &= -\frac{55}{4} F^4 + \dots\end{aligned}\quad (\text{A.10})$$

(последующие коэффициенты $\varepsilon^{(k)}$ уже не содержат членов $F^i B^j$ с $i+j \leq 4$). Отсюда непосредственно следует разложение (10) (члены, пропорциональные F^6 , $F^4 B^2$, $F^2 B^4$ и B^6 в (10), находятся аналогично). Формулы (A.10) были получены на ЭВМ с помощью рекуррентных соотношений, аналогичных детально описанным в работе [16] для эффекта Штарка. Ввиду громоздкости этих соотношений мы их здесь не приводим. Заметим, что разложения (A.7) и (A.9) использовались для контроля численного счета.

5) В области интенсивного магнитного поля удобно выполнить в (3) замену $r_0 = \beta s^{1/4}$, где $\beta = (B/2)^{-1/2} \rightarrow 0$. Получаем

$$s + \beta s^{1/4} - 2\beta^4 F^2 s + O(\beta^8) = 1. \quad (\text{A.11})$$

Отсюда следует формула (11), а также

$$\begin{aligned}\varepsilon^{(0)} &= 2\beta^{-2} - 2\beta^{-1} - \frac{1}{4} - \frac{1}{16}\beta - \frac{1}{64}\beta^2 - \left(\frac{3}{1024} + F^2\right)\beta^3 + O(\beta^4), \\ \alpha_0 &= \frac{2F}{B} \left[1 - \frac{1}{2}\beta + O(\beta^3) \right].\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

При этом орбита сильно сжимается, классическая энергия $\varepsilon^{(0)}$ в основном определяется магнитным полем, а электрическое поле приводит лишь к малым поправкам.

6) Классический порог ионизации $F_*(B)$ определяется из системы (3), (8). Полагая

$$\xi = r_0^{-1}, \quad \eta = B^2 r_0^3, \quad \tau = 3F^2 r_0^4,$$

находим ξ , η как функции от τ :

$$\xi = \frac{3}{4} \left(1 - \frac{\tau}{3} \right)^3 (1-\tau)^{-1}, \quad \eta = (3\tau-1)(1-\tau)^{-1}.$$

Зависимость F_* от B можно представить в параметрической форме:

$$F_* = \xi^2 (\tau/3)^{1/2}, \quad B = (\xi^3 \eta)^{1/2} \quad (\text{A.13})$$

($1/3 \leq \tau < 1$). При этом $\tau = 1/3$ отвечает отсутствию магнитного поля: $F_*(0) = 2^{12} \cdot 3^{-9}$, $r_* = 81/64$, а при $F=0$ уравнения (3) и (8) несовместны (это соответствует тому, что в отсутствие электрического поля связанное состояние не становится квазистационарным ни при каких значениях \mathcal{H}). Из (A.13) в двух предельных случаях ($\tau \rightarrow 1/3$ и $\tau \rightarrow 1$) нетрудно получить формулы (9).

Кратко изложим более стандартный вывод $1/n$ -разложения. Учитывая осевую симметрию задачи, запишем уравнение Шредингера в цилиндрических координатах:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{m^2 - 1/4}{2\rho^2} - \frac{1}{r} - \mathcal{E}z + \frac{1}{8} \mathcal{H}^2 \rho^2 - E \right\} \chi = 0, \quad (\text{B.1})$$

где $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$, волновая функция

$$\psi(\mathbf{r}) = \rho^{-1/2} e^{im\varphi} \chi(\rho, z)$$

и мы опустили (так же, как и в разд. 2) парамагнитный член $1/2 \mathcal{H} (L_z + 2S_z)$, вклад которого в энергию тривиален. После скейлинга (1) приходим к уравнению, в котором $1/n$ играет роль постоянной Планка \hbar :

$$\left\{ -\frac{1}{2n^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \bar{\rho}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}^2} \right) - \frac{1}{\bar{r}} - F\bar{z} + \frac{1}{8} B^2 \bar{\rho}^2 + \frac{1}{2\bar{\rho}^2} \left(1 - \frac{2p}{n} + \frac{p^2 - 1/4}{n^2} \right) \right\} \bar{\chi} = \frac{1}{2} \varepsilon \bar{\chi}, \quad (\text{B.2})$$

где $p = n - m$ и $\bar{\chi}(\bar{\rho}, \bar{z}) = \chi(n^2 \bar{\rho}, n^2 \bar{z})$. В пределе $n \rightarrow \infty$ эффективный потенциал в (B.2) есть

$$U(\bar{\rho}, \bar{z}) = -\frac{1}{\bar{r}} + \frac{1}{2\bar{\rho}^2} + F\bar{z} + \frac{1}{8} B^2 \bar{\rho}^2. \quad (\text{B.3})$$

Он обладает минимумом в точке $(\bar{\rho}_0, \bar{z}_0)$, определяемой из уравнения (3). Частоты малых колебаний электрона вокруг точки равновесия определяются диагонализацией матрицы $(\partial^2 U / \partial x_i \partial x_j)_0$:

$$\omega_{1,2} = (a \pm b)^{1/2}, \quad (\text{B.4})$$

$$a = 1/2 (U_{\rho\rho} + U_{zz}), \quad b = 1/2 [(U_{\rho\rho} - U_{zz})^2 + 4U_{\rho z}^2]^{1/2},$$

где

$$U_{\rho\rho} = 4/\bar{\rho}_0^4 - 3\bar{\rho}_0^2/\bar{r}_0^5, \quad U_{\rho z} = -3\bar{\rho}_0 \bar{z}_0/\bar{r}_0^5,$$

$$U_{zz} = \frac{1}{\bar{r}_0^3} (1 - 3\bar{z}_0^2/\bar{r}_0^2).$$

Отсюда следует формула (7).

При $\omega_2 = 0$ происходит слияние двух точек равновесия (устойчивой $(\bar{\rho}_0, \bar{z}_0)$ и неустойчивой) в потенциале (B.3), после чего эти точки выходят в комплексную плоскость. Как и в других задачах [11, 14, 15], такая ситуация представляет особый интерес в квантовой механике, поскольку позволяет вычислить (с помощью $1/n$ -разложения) ширину квазистационарных состояний.

Список литературы

1. Ридберговские состояния атомов и молекул/Под ред. Р. Стеббингса и Ф. Даннинга. М.: Мир, 1985.
2. Лисица В. С. // УФН. 1987. Т. 153. С. 379.
3. Вайнберг В. М., Мур В. Д., Попов В. С., Сергеев А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 44. С. 9. ЖЭТФ. 1987. Т. 93. С. 450.
4. Lambin P., Van Hay J. C., Kartheuser E. // Amer. J. Phys. 1978. V. 46. P. 1144.
5. Johnson B. R., Scheibner K. F., Farrelly D. // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 51. P. 2280.
6. Турбинер А. В. // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 33. С. 181. ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 1329.
7. Мананов Н. Л., Мармо С. И., Овсянников В. Д. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. С. 404.
8. Richter K., Wintgen D., Briggs J. S. // J. Phys. B. 1987. V. 20. P. L627.
9. Мур В. Д., Попов В. С., Сергеев А. В. // ЖЭТФ. 1990. Т. 97. С. 32.
10. Вайнберг В. М., Мур В. Д., Попов В. С., Сергеев А. В. Препринт ИТЭФ 160-89. М., 1989.

11. Popov V. S., Mur V. D., Shcheblykin A. D., Weinberg V. M. Preprint IТЕР-86-125. Moscow, 1986. // Phys. Lett. A. 1987. V. 124. P. 77.
12. Bender C. M., Mlodinow L. D., Parantololau N. // Phys. Rev. A. 1982. V. 25. P. 1305.
13. Попов В. С., Вайнберг В. М., Мур В. Д. Препринты ИТЭФ-178. М., 1985; ИТЭФ 86-69. М., 1986.
14. Вайнберг В. М., Мур В. Д., Попов В. С. и др. // ТМФ. 1988. Т. 74. С. 399.
15. Попов В. С., Вайнберг В. М., Мур В. Д. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 41. С. 439. ЯФ. 1986. Т. 44. С. 1103.
16. Turbiner A. V. // J. Phys. A. 1984. V. 17. P. 859.
17. Турбинер А. В. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. С. 1152.
18. Сергеев А. В., Шерстюк А. И. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. С. 1070.
19. Бейкер Дж., мл., Грейвс-Моррис П. Аппроксимация Паде. М.: Мир, 1986.
20. Анохин С. Б., Иванов М. В. // Вестник ЛГУ. Сер. физ., хим. 1983. Вып. 2. С. 65.
21. Larsen D. M. // Phys. Rev. B. 1979. V. 20. P. 5217.
22. Уиттекер Е. Т., Ватсон Г. Н. Курс современного анализа, т. 1. Л.; М.: Гостехиздат, 1933.

Институт теоретической
и экспериментальной физики

Поступила в редакцию
10.04.90

V. M. Vainberg, V. S. Popov, A. V. Sergeyev

1/n-EXPANSION FOR THE HYDROGEN ATOM IN AN EXTERNAL FIELD

The 1/n-expansion for the hydrogen atom in stationary electric and magnetic fields is presented. Summation of the 1/n-expansion yields, with high accuracy, the position and width of the atomic levels in strong fields. The method is extended to resonances at a repulsive Coulomb center and to two-electron atoms.