

«ДВУМЕРНЫЙ» ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ АТОМ: ИЗЛУЧЕНИЕ ФОТОНА И РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ К ЭНЕРГИИ

В. В. Скобелев*

Московский политехнический университет
105066, Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 июня 2017 г.

С использованием известного решения Ψ_S уравнения Шредингера для электрона в поле ядра (Ze) в полярных координатах, через которое выражается зависящий от спинового состояния полученный в работе дираковский спинор Ψ_{\pm} , и с распространением методов КЭД на подпространство $\{0; 1, 2\}$ вычислена вероятность однофотонного излучения «двумерным» водородоподобным атомом с учетом поляризационных и спиновых состояний. Найдены также релятивистские поправки $\sim (Z\alpha)^4$ к значению энергии. Показано, что так называемое контактное взаимодействие, характерное для «трехмерного» водородоподобного атома, в «двумерном» варианте также имеет место, а обычное «трехмерное» спин-орбитальное вообще отсутствует.

DOI: 10.7868/S0044451018020049

1. ВВЕДЕНИЕ

В связи с принципиальной возможностью существования «двумерных» или «одномерных» атомов при «замораживании» соответствующего числа степеней свободы в экспериментах с бозе-конденсатом [1] представляет интерес решение традиционных задач квантовой механики и КЭД в пространственно-двумерной или одномерной формулировке. Так, в нашей работе [2] было рассмотрено однофотонное излучение и найдены релятивистские поправки $\sim (Z\alpha)^4$ к уровням энергии «одномерного» водородоподобного атома, причем его одномерная структура индуцируется сверхсильным магнитным полем $B \gg (Z\alpha)^2 B_0$, $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$, $B_0 = m_e^2 c^3 / e\hbar \approx 4.41 \cdot 10^{13}$ Гс, подавляющим поперечные по отношению к полю степени свободы.

При «замораживании» одной степени свободы электрон «движется» в одной плоскости, обозначаемой ниже как (x, y) . Заметим, что первоначальная боровская теория водородоподобного атома и была сформулирована для «плоского» атома в предположении адекватности ее результатов также и для «трехмерного» атома, причем строгая «трехмерная» шредингеровская теория последнего, как

это давно известно, дала такой же результат для значения энергии

$$E \equiv E_n = -\frac{(Ze^2)^2 m_e}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} m_e c^2, \quad (1)$$

$$n = 1, 2, \dots,$$

что и теория Бора.

Таким образом, если ориентироваться на историю сформулированных выше классических задач, то их рассмотрение с пролонгацией теорий Шредингера или Дирака на «двумерный» водородоподобный атом выглядит вполне логически обоснованным.

Конкретно, данная работа является дальнейшим развитием работы [2] применительно к случаю такого эффективно двумерного атома.

Не вдаваясь здесь в конкретные детали экспериментальной реализации [1] атомов с «двумерными» электронными структурами, которые изложены в нашей предыдущей работе [3], приведем необходимую для дальнейшего шредингеровскую волновую функцию Ψ_S в полярных координатах [4, 5] с выражением через вырожденную гипергеометрическую функцию F и с очевидными для наших целей переобозначениями (см. также [6]):

$$\Psi_S \equiv \Psi_{Nm} = R_{N|m}(r) \Phi_m(\varphi), \quad (2)$$

$$R_{N|m}(r) = \frac{1}{r_0} R_{N|m}(\rho), \quad \rho = \frac{r}{r_0},$$

* E-mail: v.skobelev@inbox.ru

$$R_{N|m|}(\rho) = C_{N|m|} \frac{(2\lambda\rho)^{|m|}}{(2|m|)!} e^{-\lambda\rho} \times F(-N + |m|, 2|m| + 1; 2\lambda\rho), \quad (2a)$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{m_e(Ze^2)}, \quad \lambda = \frac{1}{N + 1/2},$$

$$C_{N|m|} = \sqrt{2\lambda^3 \frac{(N + |m|)!}{(N - |m|)!}}; \quad (2b)$$

$$N \geq |m| = 0, 1, \dots,$$

$$\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (2c)$$

$$\int_0^\infty R_{N'|m|}(r) R_{N|m|}(r) r dr \equiv \int_0^\infty R_{N'|m|}(\rho) R_{N|m|}(\rho) \rho d\rho = \delta_{N,N'}, \quad (2d)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^* \Phi_m d\varphi = \delta_{m,m'}.$$

Выражение для энергии имеет вид

$$E \equiv E_N = -\frac{(Ze^2)^2 m_e}{2\hbar^2(N + 1/2)^2}, \quad (3)$$

и приблизительно совпадает с «обычным» (1) только при больших значениях квантовых чисел n, N , в отличие от отмеченного выше полного совпадения значений энергии в теории Бора и в теории Шредингера в ее «трехмерном» варианте.

Необходимо отметить по этому поводу, что проблематика низкоразмерных (одно- и двумерных) квантовых систем пользуется в последнее время особой популярностью в связи с их возможной реализацией в наноструктурных технологиях, в частности в физике полупроводников, и т. п., что отмечено, например, в работах [7, 8].

Как правило, в этих и аналогичным им работах по «двумерным» водородоподобным атомам используются либо различные модификации представления (2) волновой функции уравнения Шредингера с обычным потенциалом $\sim 1/r$ кулоновского типа, в том числе и с определением вида «производящей функции» решений уравнения Шредингера [9] для «двумерного» водородоподобного атома в различных «плоских» системах координат [6, 10, 11], либо с

феноменологическими потенциалами типа «плоского ящика-круга»

$$\begin{cases} \infty, & r \geq r_0, \\ \sim 1/r, & r < r_0, \end{cases}$$

как в работе [8]. Спиновые же эффекты учитывались либо в нековариантной формулировке с матрицами α, β в точном уравнении Дирака с переходом к приближению Паули с матрицами 2×2 [7, 12], либо также с феноменологическим учетом спин-орбитального взаимодействия типа «Rushba» [13] с численным расчетом поправок к энергии, как в работе [14]. В работе [15] для решения «двумерного» уравнения Дирака фактически был применен стандартный метод квадрирования исходного уравнения первого порядка с переходом к уравнению второго порядка, применяемый и в данной работе, однако спиновые состояния электрона в «двумерном» атоме в расчетах не учитывались, в отличие от настоящей работы. Можно упомянуть и о построенной в работе [16] схеме решения уравнения Дирака в общем случае пространства «D+1» измерений, не привносящей, однако, ничего нового в материал нашей работы.

В доступных нам для ознакомления работах мы не обнаружили решения уравнения Дирака для «двумерного» водородоподобного атома в его обычной релятивистской форме с соответствующими 4×4 -матрицами γ^μ , являющегося при разложении по атомному параметру ($Z\alpha$) собственной функцией оператора проектирования спина, и необходимое для вычисления вероятности однофотонного излучения таким атомом стандартными методами КЭД в их пролонгации на двумерное подпространство $\{0; 1, 2\}$ с учетом спиновых состояний электрона и состояний поляризации фотона.

Наиболее близкой к нашей по рассматриваемым вопросам, как мы полагаем, являются работы [17, 18], причем в последней, как и в [12], спиновые эффекты учитывались в нековариантной формулировке; кроме того, допускалась ориентация спина электрона вне плоскости (x, y) , что находится в диссонансе с концепцией «двумерного» в плоскости (x, y) водородоподобного атома. При этом, как уже ранее упоминалось по отношению ко всем работам по данной тематике, введенные в работе [18] спиноры не являются собственными функциями каких-либо спиновых операторов, так что, строго говоря, при рассмотрении однофотонного излучения в этих работах учет собственно спиновых эффектов и не проводился, не говоря уже о поляризационных состояниях фотона. В нашей же работе при разложении по

«атомному» параметру ($Z\alpha$) учтены все эти аспекты задачи об излучении «двумерного» водородоподобного атома с использованием в остальном эквивалентных работам [17, 18] характеристик состояния с несколько другим набором квантовых чисел.

Поправки к энергии (3) $\sim (Z\alpha)^4$ вычислялись также и в упомянутой работе [15] с тем же замечанием относительно набора квантовых чисел и без разбиения по аналогичным «трехмерному» случаю слагаемым в выражении (6b), что позволяет нам в данной работе, в которой мы последовательно проводим линию по сравнению результатов в «одно-», «двух-» и «трехмерных» пространствах, выявить наглядную параллель между «тонкими структурами» уровней энергии «трехмерного» и «двумерного» водородоподобных атомов, в частности, с анализом принципиально важных, в том числе и в методическом аспекте, так называемых контактного и спин-орбитального взаимодействий в этих атомах, чего нельзя сделать в подходе авторов работы [15].

Данный круг обычных для «трехмерной» КЭД вопросов, не затрагивавшихся ранее в упомянутых аспектах в известной нам литературе по «двумерному» водородоподобному атому, и является темой настоящей работы.

Для вычисления элемента S -матрицы

$$\langle f|S|i\rangle = i(2\pi)\delta(\Delta E - k_0)\sqrt{\frac{4\pi}{2k_0V}} M, \quad (4)$$

$$M = e \int [\bar{\Psi}'\gamma^\mu\Psi]e_\mu e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} dS, \quad dS \equiv dx dy, \quad (4a)$$

соответствующего процессу излучения $(Ze)^* \rightarrow (Ze) + \gamma$ по обычному лагранжиану КЭД

$$L = e[\bar{\Psi}_e\gamma^\mu\Psi_e]A_\mu, \quad \Psi_e = e^{-iEt}\Psi, \quad \Psi \equiv \Psi(\mathbf{r}) \quad (4b)$$

(в формулах КЭД постоянные \hbar, c опускаем), где в рассматриваемом случае «двумерного» атома $\mu = 0, 1, 2$, аналогично значениям $\mu = 0, 3$ в пространственно-одномерном варианте теории [2], а также для нахождения релятивистских поправок к энергии (разд. 5) следует предварительно найти дираковский спинор Ψ , являющийся решением «пространственно-двумерного» уравнения Дирака для электрона в поле ядра (Ze) (разд. 2). В разд. 3 мы вычисляем матричный элемент M (4a) процесса $(Ze)^* \rightarrow (Ze) + \gamma$, в разд. 4 — соответствующую вероятность этого процесса в единицу времени, а в разд. 6 обсуждаем результаты.

2. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА В ПОЛЕ ЯДРА В ПОДПРОСТРАНСТВЕ $\{0; 1, 2\}$

В этом разделе мы будем использовать схему учета спиновых эффектов, предложенную для «трехмерного» случая в наших работах [19, 20]. Именно, решение «двумерного» уравнения Дирака

$$D_-\Psi = 0 \quad (5)$$

с дираковскими операторами

$$D_\mp = \left(E_r + \frac{Ze^2}{r}\right)\gamma^0 - i\hbar c \left(\gamma \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)_{1,2} \mp m_e c^2, \quad (5a)$$

где $E_r = m_e c^2 + E$, $|E| \ll m_e c^2$, ищем в виде

$$\Psi = D_+\psi, \quad (5b)$$

используя стандартный метод квадрирования по аналогии с работой [15]. Скалярное произведение-оператор $(\gamma \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}})_{1,2}$ в выражении (5a) является «двумерным», аналогично «одномерному» оператору $\gamma^3 \frac{d}{dz}$ в работе [2].

После подстановки (5b) в (5) с учетом вида операторов (5a) получаем уравнение для «вспомогательного» спинора ψ :

$$[\hat{H}_S + \hat{H}']\psi = E\psi, \quad (6)$$

где

$$\hat{H}_S = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_r - \frac{(Ze^2)}{r} \quad (6a)$$

— шредингеровский гамильтониан с оператором Лапласа

$$\Delta_r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

в полярных координатах, а

$$\hat{H}' = -\frac{E^2}{2m_e c^2} - \frac{(Ze^2)^2}{2m_e c^2 r^2} - \frac{E}{m_e c^2} \frac{(Ze^2)}{r} + i \frac{\hbar(Ze^2)}{2m_e c} \frac{\gamma^0(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r})}{r^3} \equiv \sum_{k=1}^4 \hat{H}'_k \quad (6b)$$

— малая релятивистская добавка к нему, причем, аналогично «трехмерному» варианту теории водородоподобного атома, $\hat{H}'_k \sim (Z\alpha)^2 \hat{H}_S$, $i = 1, 2, 3$ [19–21], а также $[\bar{\Psi}'\hat{H}'_4\Psi] \sim (Z\alpha)^2 [\bar{\Psi}'\hat{H}'_S\Psi]$ [19, 20], как это будет видно из дальнейшего — см., например, (11a), (11b), (11c) и комментарий после формулы (10) (индексы 1, 2 в двумерных скалярных произведениях в (6b) и ниже в (8) в этом разделе для удобства опущены).

Тогда из (6) следует, что в пренебрежении поправками $\sim (Z\alpha)^2$ спинор ψ удовлетворяет уравнению Шредингера $\hat{H}_S\psi = E\psi$, поэтому все его компоненты пропорциональны решению Ψ_S последнего (2). Для учета спиновых эффектов выберем также спинор ψ как собственную функцию оператора x -проекции спина:

$$\Sigma_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\psi \rightarrow \psi_{(\pm)x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \\ C_{\pm} \\ \pm C_{\pm} \end{pmatrix} \Psi_S, \quad (7)$$

$$\Sigma_x \psi_{(\pm)x} = \pm \frac{1}{2} \psi_{(\pm)x}, \quad \bar{\psi}_{(\pm)x} \psi_{(\mp)x} = 0,$$

что, в частности, включает и случай «размещения» последнего в плоскости (x, y) , как это и отмечалось в предыдущем разделе по поводу применяемого в работе [18] и используемого нами подходов к постановке задачи.

Конкретные же численные значения констант C_{\pm} , как будет видно, несущественны в рассматриваемом лидирующем порядке по $(Z\alpha)$.

Далее с использованием стандартного представления γ -матриц и при разложении в ряд по $(Z\alpha)$ запишем фигурирующий в (5a), (5b) оператор D_+ с точностью до несущественного в рассматриваемом аспекте множителя в «безразмерной форме»:

$$D_+ = \begin{pmatrix} \hat{I} & \hat{0} \\ \hat{0} & \hat{0} \end{pmatrix} - \frac{i}{2}(Z\alpha)\tilde{D}_+ + \dots, \quad (8)$$

$$\tilde{D}_+ = \lambda \left(\gamma \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \right),$$

где

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} \frac{\sqrt{2m_e(-E)}}{\hbar} \quad (8a)$$

— «безразмерный радиус-вектор» со значением энергии (3). Записывая оператор D_+ через безразмерную переменную ρ (2)

$$\rho = \lambda^{-1} r' = \frac{r}{r_0}, \quad (8b)$$

получаем после перехода к полярным координатам следующее его представление:

$$D_+ = \begin{pmatrix} \hat{I} & \hat{\Omega} \\ -\hat{\Omega} & \hat{0} \end{pmatrix}, \quad \hat{\Omega} = -\frac{i}{2}(Z\alpha) \begin{pmatrix} 0 & \hat{G} \\ \hat{G}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $\hat{I}, \hat{0}$ — единичная и нулевая матрицы 2×2 , а дифференциальный оператор

$$\hat{G} = e^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (9a)$$

Подставляя D_+ (9) и ψ (7) в уравнение (5b), получаем для дираковского спинора Ψ :

$$\Psi \rightarrow \Psi_{\pm} \equiv D_+ \psi_{(\pm)x} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Psi_S \mp \frac{i}{2}(Z\alpha)C_{\pm}\hat{G}\Psi_S \\ \pm\Psi_S - \frac{i}{2}(Z\alpha)C_{\pm}\hat{G}^*\Psi_S \\ \pm\frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}\Psi_S \\ \frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}^*\Psi_S \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Как видно (см. также (11a), (11b), (11c)), при вычислении «электронных скобок» в (4a) в поперечной калибровке ($\mu = 1, 2$) и в используемом стандартном представлении γ -матриц вклад C_{\pm} будет содержать $(Z\alpha)^2$, поскольку операция $\gamma^{1,2}\Psi_{\pm}$ «меняет местами» верхние и нижние компоненты спинора (10) (это же относится к операции $\gamma^0\gamma^{1,2}\Psi_{\pm}$ при вычислении вклада \hat{H}'_4 в энергию см. разд. 5), и в главном приближении по $(Z\alpha)$ этим вкладом следует пренебречь.

Таким образом, для наших целей выражение (10) можно представить в виде

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \Psi_S \\ \pm\Psi_S \\ \pm\frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}\Psi_S \\ \frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}^*\Psi_S \end{pmatrix} \quad (10a)$$

с дираковски-сопряженным спинором

$$\bar{\Psi}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \times$$

$$\times \left(\Psi_S^*, \pm\Psi_S^*, \pm\frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}^*\Psi_S^*, \frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}\Psi_S^* \right), \quad (10b)$$

причем $\int \bar{\Psi}_{\pm}\Psi_{\mp}dS \approx 0$ в пренебрежении вкладом $\sim (Z\alpha)^2$ и с выполнением с той же точностью условия нормировки: $\int \bar{\Psi}_{\pm}\Psi_{\pm}dS \approx 1$.

3. МАТРИЧНЫЙ ЭЛЕМЕНТ ПРОЦЕССА ОДНОФОТОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ «ДВУМЕРНЫМ» ВОДОРОДОПОДОБНЫМ АТОМОМ

Вводя для дальнейшего удобства обозначения

$$[\overline{\Psi}'_{\pm}\gamma^{1,2}\Psi_{\pm}] \equiv \frac{i}{4}(Z\alpha)\tilde{M}^{1,2} \quad (11a)$$

для «электронных скобок» без переворота спина и

$$[\overline{\Psi}'_{\pm}\gamma^{1,2}\Psi_{\mp}] \equiv \frac{i}{4}(Z\alpha)\tilde{M}^{1,2} \quad (11b)$$

— с переворотом, получаем после некоторых достаточно элементарных преобразований:

$$\begin{cases} \tilde{M}^{1,2} \\ \tilde{M}^{1,2} \end{cases} = \left[(1, -i)\Psi'_S \hat{G}^* \Psi_S \pm (1, i)\Psi'_S \hat{G} \Psi_S \right] - [\Psi_S \leftrightarrow \Psi'_S]. \quad (11c)$$

Выберем также следующее представление ортогональных $((e'e') = 0)$ векторов поляризации фотона через сферические углы \mathbf{k} (фотон, как и в работе [17], в которой поляризационные состояния не учитывались, разумеется, «трехмерный»):

$$e_{\mu} = \{0; \cos \theta_k \cos \varphi_k, \cos \theta_k \sin \varphi_k, -\sin \theta_k\}, \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} e'_{\mu} &= \{0; \sin \varphi_k, -\cos \varphi_k, 0\}, \\ (e \cdot k) &= (e' \cdot k) = 0. \end{aligned} \quad (12b)$$

Определим далее «электронно-фотонный» матричный элемент без переворота спина следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{M}^{1+2} &\equiv [\overline{\Psi}'_{\pm}\gamma^1\Psi_{\pm}] e_1 + [\overline{\Psi}'_{\pm}\gamma^2\Psi_{\pm}] e_2 \equiv \\ &\equiv \frac{i}{4}(Z\alpha) \left\{ \tilde{M}^1 e_1 + \tilde{M}^2 e_2 \right\}, \end{aligned}$$

после чего находим для него

$$\begin{aligned} \tilde{M}^{1+2} &= \frac{i}{4}(Z\alpha) \cos \theta_k \left\{ \left[e^{-i\varphi_k} \Psi'_S \hat{G}^* \Psi_S + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{i\varphi_k} \Psi'_S \hat{G} \Psi_S \right] - [\Psi_S \leftrightarrow \Psi'_S] \right\} \quad (13) \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \tilde{M}^{1+2} &= \frac{i}{4}(Z\alpha) \cos \theta_k \times \\ &\quad \times \left\{ e^{-i\varphi_k} \left[\Psi'_S \hat{G}^* \Psi_S - \Psi_S \hat{G}^* \Psi'_S \right] + \right. \\ &\quad \left. + e^{i\varphi_k} \left[\Psi'_S \hat{G} \Psi_S - \Psi_S \hat{G} \Psi'_S \right] \right\} = \\ &= \frac{i}{4}(Z\alpha) \cos \theta_k \left\{ \left[e^{-i\varphi_k} \left(\Psi'_S \hat{G}^* \Psi_S - \Psi_S \hat{G}^* \Psi'_S \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - [K \leftrightarrow K']^* \right\}, \quad (13a) \end{aligned}$$

где введены обозначения для совокупности квантовых чисел $K \equiv \{N, m\}$, $K' \equiv \{N', m'\}$.

С переходом в выражении для Ψ_S к безразмерной радиальной функции $R(r) \rightarrow R(\rho)$ и безразмерной переменной $r \rightarrow \rho$ матричный элемент $M \rightarrow \tilde{M}$ (4a) запишем для удобства в виде

$$\tilde{M} \equiv e\tilde{M}_{int}^{1+2}, \quad \tilde{M}_{int}^{1+2} = \int_0^{\infty} d\rho \rho \int_0^{2\pi} d\varphi \tilde{M}^{1+2}. \quad (14)$$

Заметим при этом, что «фотонный экспоненциальный множитель» $\exp\{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\}$ в (4a) мы положили равным единице, поскольку, как обычно [19, 20],

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})_{1,2} \sim k_0 r_{eff} \sim k_0 r_0 \sim (Z\alpha) \ll 1,$$

а в предположении соответствующего распределения плотности вероятности по оси z экспериментально реализуемую эффективную «толщину» $d \sim |z|_{eff}$ «двумерного» атома предполагаем достаточно малой по сравнению со значением $r_{eff} \sim r_0$ и, оставаясь в рамках «двумерного» варианта теории, считаем, что $|k_3 d| \ll 1$ (точнее, для собственно «двумерного» атома имеем даже $|k_3 d| \ll \ll 1$). В обычном дипольном приближении, когда $\exp\{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\} \rightarrow 1$, соответствующий вклад в матричный элемент обращается в нуль из-за ортогональности шредингеровских волновых функций в подынтегральном выражении матричного элемента; однако в нашем подходе одна из них заменяется на ее производные по полярным координатам (9a), (13), (14) и ортогональность, естественно, отсутствует, так что эта замена $\exp\{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\} \rightarrow 1$ дает главный по $(Z\alpha)$ вклад в матричный элемент.

Введем также для дальнейшего удобства следующие обозначения интегралов по $d\rho$:

$$I_{R'dR} \equiv \int_0^{\infty} d\rho \rho R' \frac{dR}{d\rho}, \quad I_{RR'} \equiv \int_0^{\infty} d\rho R R', \quad (15)$$

$$R \equiv R_{N|m}(\rho), \quad R' \equiv R_{N'|m'}(\rho), \quad (15a)$$

$$I_{R'dR} + I_{R dR'} = -I_{RR'}, \quad (15b)$$

и с факторизацией характерных множителей имеем тогда после элементарного интегрирования по $d\rho$ в (14):

$$\tilde{M}_{int}^{1+2} \equiv \frac{i}{4}(Z\alpha) \cos \theta_k M(\pm \rightarrow \pm). \quad (16)$$

В результате достаточно простых преобразований получаем для величины $M(\pm \rightarrow \pm)$:

$$M(\pm \rightarrow \pm) = A_{\mp}(K, K') e^{\mp i\varphi_k} \delta_{m', m \pm 1}, \quad (17a)$$

$$A_{\mp}(K, K') = (I_{R'dR} - I_{R dR'}) \mp (m+m') I_{RR'}. \quad (17b)$$

Аналогично,

$$\tilde{M}^{1+2} = \left\{ \left[e^{-i\varphi_k} \left(\Psi_S^* \hat{G}^* \Psi_S - \Psi_S \hat{G}^* \Psi_S^* \right) \right] + [K \leftrightarrow K']^* \right\}$$

и

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{int}^{1+2} &= \frac{i}{4} (Z\alpha) \cos \theta_k M(\mp \rightarrow \pm), \\ M(\mp \rightarrow \pm) &= \mp A_{\pm}(K, K') e^{\pm i\varphi_k} \delta_{m', m \mp 1}. \end{aligned} \quad (17c)$$

Таким образом, однофотонное излучение «двумерного» водородоподобного атома может происходить как с переворотом, так и без переворота спина. Заметим, что в «трехмерном» варианте переворота спина не происходит [20, 22], в одномерном же [2] его нет «по определению».

Более того, в «трехмерном» случае переворот спина отсутствует и в двухфотонном излучении [23] (см. также другую нашу работу [24], в Приложении которой дано обоснование использования в ней и в [23] пропагатора свободного электронного поля).

Стоит отметить также, что правило отбора «по m » для «двумерного» водородоподобного атома, как следует из (17a), (17c), имеет вид $\Delta m = \pm 1$; это аналогично правилу отбора «по l » для «трехмерного» атома¹⁾: $\Delta l = \pm 1$ [21, 25]. Существенная разница имеется лишь в вычислительной процедуре — первое правило тривиальным образом следует только из последнего условия ортонормированности (2d), второе же получается с использованием достаточно громоздких рекуррентных соотношений для присоединенных полиномов Лежандра и также с условием ортонормированности для них.

Из (17a), (17c) видно также, что спиновые состояния коррелируют с изменением квантового числа m , как и в «трехмерном» варианте теории [22], в котором m — «магнитное» квантовое число.

4. ВЕРОЯТНОСТЬ ПРОЦЕССА $(Ze)^* \rightarrow (Ze) + \gamma$

Стандартными методами [26] не составляет особого труда получить следующее общее выражение для вероятности процесса однофотонного излучения с поляризацией (12a) «двумерным» водородо-

¹⁾ Заметим, что правило отбора $\Delta l = \pm 1$ при учете спиновых эффектов в принципе может распространяться и на другие нечетные значения Δl [20, 22]; это, однако, в данных работах строго нами не установлено, выяснено лишь, что при $l = m = 0$ или $l' = m' = 0$, т. е., например, в серии Лаймана, правило отбора остается прежним: $\Delta l = \pm 1$.

подобным атомом в рассматриваемом приближении по $(Z\alpha)$:

$$\begin{aligned} &\left\{ \begin{array}{l} W(\pm \rightarrow \pm) \\ W(\mp \rightarrow \pm) \end{array} \right\} = \\ &= \frac{1}{48} \alpha (Z\alpha)^4 \left[\frac{1}{(N' + 1/2)^2} - \frac{1}{(N + 1/2)^2} \right] \times \\ &\times \left\{ \begin{array}{l} A_{\mp}^2(K, K') \delta_{m', m \pm 1} \\ A_{\pm}^2(K, K') \delta_{m', m \mp 1} \end{array} \right\} \frac{c}{\lambda_C}, \quad \lambda_C = \frac{\hbar}{m_e c}. \end{aligned} \quad (18)$$

Как видно из (12a), (12b), матричный элемент излучения фотона с поляризацией (12b) получается из матричного элемента (14), соответствующего поляризации (12a), формальной заменой $\varphi_k \rightarrow \varphi_k - \pi/2$, $\theta_k \rightarrow 0$, и для этого типа поляризации легко получить, что

$$W' = 3W. \quad (19)$$

Полная же вероятность, усредненная по начальному спиновому состоянию и просуммированная по конечному состоянию и по поляризации фотона, равна

$$\begin{aligned} W_{tot} &\equiv \frac{1}{2} \times \\ &\times \{ \text{the sum over initial and final spin states} \} (W + W') = \\ &= \frac{1}{12} \alpha (Z\alpha)^4 \left[\frac{1}{(N' + 1/2)^2} - \frac{1}{(N + 1/2)^2} \right] \times \\ &\times A_{\mp}^2(K, K') \delta_{m', m \pm 1} \frac{c}{\lambda_C}. \end{aligned} \quad (20)$$

Вычисление фигурирующих в $A_{\mp}(K, K')$ интегралов (15) в общем виде и в компактной форме при данных $N, m; N', m'$ не представляется возможным, в том числе с учетом правил отбора $m' = m \pm 1$.

По этой причине здесь мы ограничимся вычислением вероятности для основного разрешенного перехода $N = 1, m = \mp 1 \rightarrow N' = m' = 0$. Используя явный вид соответствующих радиальных функций

$$\begin{aligned} R' &\equiv R_{00} = 4e^{-2\rho}, \\ R &\equiv R_{11} = 2 \left(\frac{2}{3} \right)^{5/2} \rho e^{-(2/3)\rho}, \end{aligned} \quad (20a)$$

находим значения необходимых интегралов:

$$\begin{aligned} I_{RR'} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad I_{RdR'} = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}}, \\ I_{R'dR} &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - \sqrt{\frac{2}{3}} \right), \end{aligned} \quad (20b)$$

так что при $m = \mp 1$ имеем $A_{\mp}(K, K') = \sqrt{3/2}$ со значениями вероятностей

$$W(\pm \rightarrow \pm) = \frac{1}{4} \left(\frac{2}{3}\right)^2 \alpha(Z\alpha)^4 \frac{c}{\lambda_C}, \quad (21)$$

$$W_{tot} = \left(\frac{2}{3}\right)^2 \alpha(Z\alpha)^4 \frac{c}{\lambda_C}. \quad (22)$$

5. РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ К ЭНЕРГИИ

Соответствующие оператору (6b) релятивистские добавки $E'_i = \langle \hat{H}'_i \rangle$ к энергии E_N (3) в рамках теории возмущений по шредингеровским волновым функциям (2) при $i = 1, 2, 3$ или для $i = 4$ по дираковским спинорам (10a), (10b) могут быть вычислены аналогично «трехмерному» случаю [21] (см. также Приложение) с некоторой модификацией в соответствии с уменьшением числа пространственных измерений.

Именно, скалярное произведение $(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r})$ в \hat{H}'_4 является в нашем случае «двумерным» $(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r}) \rightarrow (\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r})_{1,2}$, а не «трехмерным». Кроме того, из-за замены $dV \sim \sim \rho^2 d\rho$ на $dS \sim \rho d\rho$ при интегрировании по безразмерной радиальной координате ρ вклады $i = 2, 4$ будут, вообще говоря, расходящимися при $m = 0$, а теория возмущений применима только при $|m| \geq 1$, в отличие от «трехмерного» варианта [21], в котором интегралы от вкладов $i = 2, 4$ сходятся (см. также Приложение).

Таким образом, в данной ситуации в «двумерном» водородоподобном атоме имеет смысл по теории возмущений вычислять поправки E'_i к энергии от вкладов

$$\hat{H}'_1 = -\frac{E^2}{2m_e c^2}, \quad (23a)$$

$$\hat{H}'_3 = -\frac{E(Ze^2)}{m_e c^2 r}, \quad (23b)$$

а также

$$\hat{H}'_2 = -\frac{(Ze^2)^2}{2m_e c^2 r^2}, \quad (23c)$$

$$\hat{H}'_4 = i \frac{\hbar(Ze^2)}{2m_e c} \frac{\boldsymbol{\gamma}^0(\boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r})_{1,2}}{r^3} \quad (23d)$$

в состояниях с $m \neq 0$, когда интеграл по $d\rho$ сходится, а теория возмущений применима.

Вклад (23a), очевидно, зависит только от значения энергии (3) и равен

$$E'_1 = -\frac{(Z\alpha)^4}{8(N+1/2)^4} m_e c^2. \quad (24)$$

Общие выражения $E'_{2,3}$ после замены переменной интегрирования $t = 2\lambda\rho$ в интегралах по $d\rho$, получающихся при переходе от радиальной переменной r к безразмерной ρ , имеют вид

$$E'_2 = -\frac{1}{2}(Z\alpha)^4 m_e c^2 I(-2), \quad |m| \geq 1, \quad (25a)$$

$$E'_3 = -\frac{(Z\alpha)^4}{2(N+1/2)^2} m_e c^2 I(-1). \quad (25b)$$

Обоснование способа «регуляризации» и оценки логарифмически расходящихся в нуле интегралов типа $I(-2)$ при $m = 0$ с логарифмической же точностью по $(Z\alpha)^{-1}$ приведено в нашей работе [3] (исходная причина та же, что и в [3] — игнорирование отклонения от кулоновского взаимодействия на расстояниях порядка или меньше λ_C из-за поляризации электронно-позитронного вакуума): в интеграле по dr вида $\int_0^\infty dr f(r)/r$ следует нижний предел заменить на λ_C , а в таком же интеграле по $d\rho$ — на $(Z\alpha)$, после чего он интегрированием по частям приводится к виду

$$\int_0^\infty f(\rho) \frac{d\rho}{\rho} \rightarrow f(0) \ln(Z\alpha)^{-1} + \int_0^\infty d\rho \frac{df}{d\rho} \ln \rho \quad (25c)$$

с отсутствием расходимости.

С этим же способом устранения расходимости при $m = 0$, $k = -2$ в получающемся после указанной замены переменной $t = 2\lambda\rho$ интеграле в (25a), (25b) введено обозначение

$$I(k) = \left[\frac{C_{N|m|}}{(2|m|)!} \right]^2 \frac{1}{(2\lambda)^{k+2}} \int_0^\infty dt t^{2|m|+k+1} e^{-t} \times \\ \times F^2(-N+|m|, 2|m|+1; t). \quad (26)$$

Принципиальная процедура вычисления фигурирующего здесь интеграла приведена в классической книге [27]; для наших же целей это не имеет значения, см. также ниже.

Для вычисления $I(-2)$ при $m = 0$ следует воспользоваться формулой (25c), проведя в ней замену, согласно (26) и сделанной замене переменной:

$$(Z\alpha) \rightarrow 2\lambda(Z\alpha), \quad \rho \rightarrow t, \\ f(\rho) \rightarrow f(t) = C_{N0}^2 e^{-t} F^2(-N, 1; t) = \\ = \frac{2}{(N+1/2)^3} e^{-t} F^2(-N, 1; t), \quad f(0) = \frac{2N^2}{(N+1/2)^3}.$$

Получаем при $m = 0$ с той же логарифмической точностью:

$$I(-2) \approx \frac{2}{(N+1/2)^3} \left\{ N^2 \ln \frac{N+1/2}{2(Z\alpha)} + \int_0^\infty dt e^{-t} \ln t F(-N, 1; t) \times [-F(-N, 1; t) + 2F'(-N, 1; t)] \right\}. \quad (27)$$

Алгоритм вычисления аналогичных интегралам $I(k)$ (26) в (25a), (25b) интегралов $J_{2,3}$ дан также в Приложении нашей работы [2]²⁾; однако в силу громоздкости получающихся выражений это мало что дает для практических целей, как и использование упомянутого способа их вычисления в книге [27]. И на самом деле в имеющих значение случаях не очень больших конкретных величин квантовых чисел $N \geq |m|$ проще проводить вычисление этих интегралов непосредственно, исходя из представления конечного гипергеометрического ряда $F(-N+|m|, 2|m|+1; t)$ в выражениях (26), (27).

В «трехмерном» варианте вклад \hat{H}'_4 описывает так называемые контактное и спин-орбитальное взаимодействия [21] (в нашей интерпретации — см. Приложение). Найдем далее соответствующий вклад в энергию в рассматриваемом «двумерном» случае (в «одномерном», например, контактное взаимодействие остается, а спин-орбитальное, естественно, отсутствует [2]). Имеем с учетом (11a), (11b), (11c), аналогично «трехмерному» случаю (A.2), (A.2a) (см. также замечание перед формулой (14)):

$$\hat{H}'_4 = i \frac{\hbar(Ze^2)}{2m_e c} \frac{1}{r_0^2} \frac{1}{\rho^2} \frac{\gamma^0(\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\rho})_{1,2}}{\rho}, \quad (28)$$

$$E'_4 \equiv \int \bar{\Psi} \hat{H}'_4 \Psi dV \rightarrow \int \bar{\Psi}_\pm \hat{H}'_4 \Psi_\pm dV = -\frac{(Z\alpha)^4}{8} m_e c^2 \int \left\{ [e^{-i\varphi} \Psi_S^* \hat{G}^* \Psi_S + e^{i\varphi} \Psi_S^* \hat{G} \Psi_S] + [e^{i\varphi} \Psi_S \hat{G} \Psi_S^* + e^{-i\varphi} \Psi_S \hat{G}^* \Psi_S^*] \right\} d\varphi \frac{d\rho}{\rho}. \quad (28a)$$

Как можно видеть с учетом (9a), экспоненциальный фактор в квадратных скобках сокращается и с введением обозначения

$$\hat{G} = e^{i\varphi} \hat{G} = \frac{\partial}{\partial \rho} - i \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

получаем

²⁾ В формуле (A.4b) работы [2] есть опечатка: в подынтегральном выражении пропущен фактор t .

$$E'_4 = -\frac{(Z\alpha)^4}{8} m_e c^2 \times \int 2 \operatorname{Re} [\Psi_S^* (\hat{G}^* + \hat{G}) \Psi_S] d\varphi \frac{d\rho}{\rho}. \quad (28b)$$

С учетом вида введенного оператора \hat{G} и функции Ψ_S (2) находим тогда после «холостого» интегрирования по $d\varphi$:

$$E'_4 = -\frac{(Z\alpha)^4}{2} m_e c^2 \int_0^\infty R \frac{dR}{d\rho} \frac{d\rho}{\rho} = -\frac{(Z\alpha)^4}{4} m_e c^2 \int_0^\infty \frac{dR^2}{d\rho} \frac{d\rho}{\rho}. \quad (28c)$$

После интегрирования по частям с обращением в нуль подстановок на обоих пределах при $m \neq 0$ (см. (2a)) получаем в этом случае

$$E'_4 = -\frac{(Z\alpha)^4}{4} m_e c^2 I_0, \quad I_0 = \int_0^\infty \left(\frac{R}{\rho}\right)^2 d\rho > 0. \quad (28d)$$

При $m = 0$ интеграл в (28c) логарифмически расходится; рецепт же устранения этой расходимости уже был дан выше: формула (25c) со значением $f(\rho) = dR^2/d\rho$. При этом в первом слагаемом в (25c) следует положить

$$f(0) = 2\lambda C_{N0}^2 [-1 + 2F'(-N, 1; 0)], \quad (28e)$$

где производная берется по аргументу, а $F'(-N, 1; 0) = -N$.

Таким образом, с учетом (2b) при $m = 0$ в логарифмическом приближении получаем

$$E'_4 \approx -\frac{(Z\alpha)^4}{4} m_e c^2 \left[-4\lambda^4(1+2N) \ln(Z\alpha)^{-1} + \int_0^\infty d\rho \frac{d^2 R_{N0}^2(\rho)}{d\rho^2} \ln \rho \right]. \quad (28f)$$

По общепринятой терминологии [21] вклад первого слагаемого в квадратных скобках (28f) соответствует так называемому контактному взаимодействию (см. (28e)), которое присутствует и в «трехмерном» (см. (A.6a), (A.7a)), и в «одномерном» [2] вариантах теории. Интеграл же в квадратных скобках (28f) аналитически вычислить нам, естественно, не удалось.

Поскольку зависимости от спинового состояния « \pm » в (28d), (28f) нет, в «двумерном» варианте

спин-орбитальное взаимодействие типа «трехмерного» (А.7b) отсутствует, как и в «одномерном» варианте [2]. Это вполне естественно для «двумерного» атома, поскольку орбитальный момент, хотя, возможно, и виртуальный, перпендикулярен спиновому, «находящемуся» в нашей интерпретации в плоскости (x, y) .

6. ОБСУЖДЕНИЕ

Представляет интерес сравнить выражение вероятности основного перехода (22)

$$W_2 \equiv W_{tot} = \left(\frac{2}{3}\right)^2 \alpha(Z\alpha)^4 \frac{c}{\lambda_C} \approx \approx Z^4 \cdot 71 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1} \quad (29)$$

с соответствующими величинами в «трехмерном» [22, 25] и «одномерном» [2] вариантах:

$$W_3 = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \alpha(Z\alpha)^4 \frac{c}{\lambda_C} \approx Z^4 \cdot 6.3 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1}, \quad (29a)$$

$$W_1 = \frac{2^4}{3^6} \alpha(Z\alpha)^4 \frac{c}{\lambda_C} \approx Z^4 \cdot 3.5 \cdot 10^8 \text{ c}^{-1} \quad (29b)$$

(необходимо заметить, что в численной оценке W_3 в работе [22] при правильной точной формуле (28b) вида первой (29a) имел место технический сбой: вместо приблизительно совпадающего с [25] численного коэффициента 6.3 приведено ошибочное значение 2.1 с некорректным, следовательно, выводом о различии ширины α -линии серии Лаймана в теориях Шредингера [25] и Дирака [22]).

Заметим также, что данное частное значение W_2 (29) можно получить, как это было сделано в работе [2], для «одномерного» атома, и в рамках теории Шредингера по «трехмерной» формуле для вероятности в классической книге [25] (см. также формулу (26a) в [2]), для чего в ней следует заменить квадрат «трехмерного» матричного элемента $(x)_{KK'}^2 + (y)_{KK'}^2 + (z)_{KK'}^2$ по наборам K, K' квантовых чисел на «двумерный» $(x)_{KK'}^2 + (y)_{KK'}^2$, а матричные элементы координат $(x)_{KK'}$, $(y)_{KK'}$ вычислять по функциям (20a), (2c) с переходом к полярным координатам $x = r \cos \varphi$, $y = r \sin \varphi$ и значением энергии (3). Как можно убедиться, получающийся результат совпадает с (29) аналогично «одномерному» случаю [2], причем правило отбора «по m » одинаково в обоих подходах. Другими словами, расчет вероятности основного перехода $N = 1, m = \mp 1 \rightarrow N' = m' = 0$ в «двумерном» водородоподобном атоме и по теории Шредингера, т. е. с указанным рецептом применения к «двумерному» случаю основной «трехмерной» формулы книги [25], и по теории Дирака

(данная работа) дает одинаковый результат, как это имеет место в «одномерном» [2] и в «трехмерном» [22] вариантах теории, в последнем случае — с учетом замечания после формулы (29b).

Любопытно, что совпадение вероятностей в «двумерном» варианте для малых значений квантового числа N имеет место, несмотря на различие выражений для энергии (1) и (3), относящихся к «трехмерному» и «двумерному» пространствам соответственно, особенно существенное для этих N . В «одномерном» случае такого нет — энергия имеет одинаковое значение (1) и для «трехмерного», и для «одномерного» пространства, так что отмеченное в работе [2] совпадение вероятностей не вызывает особого удивления.

В численных значениях вероятностей (29), (29a), (29b) не обнаруживается какой-либо простой закономерности, связывающей их с размерностью пространства; можно лишь утверждать, что в «двумерном» варианте вероятность максимальна, а в «одномерном» — минимальна, причем $W_2 \gg W_{1,3}$. При этом ситуация с временем жизни $\tau \sim W^{-1}$ в этих возбужденных состояниях является обратной: $\tau_2 \rightarrow \rightarrow \min$, $\tau_1 \rightarrow \max$, $\tau_2 \ll \tau_{1,3}$. Ширина же $\Delta\omega \approx W$ основной спектральной линии в $\{0; 1, 2\}$, согласно (29), (29a), (29b), должна быть примерно на порядок больше, чем в $\{0; 1, 2, 3\}$ или в $\{0; 3\}$, не говоря уже о различии в частоте этих спектральных линий в данных пространствах. Это, возможно, объясняется тем обстоятельством, что состояние $N = 1, m = \pm 1$ с вероятностью перехода (29) в «двумерном» варианте, строго говоря, не является первым возбужденным состоянием (в качестве последнего, очевидно, следует считать $N = 1, m = 0$), в отличие от соответствующих состояний с вероятностями (29a), (29b) в «трехмерном» и «одномерном» вариантах.

Подчеркнем еще раз, что идентичность теорий Шредингера и Дирака при вычислении вероятности однофотонного излучения для основных разрешенных переходов из первого возбужденного состояния с суммированием по поляризации фотона, а также в рамках теории Дирака дополнительно при усреднении по спину «начального» электрона и суммировании по спину «конечного», имеет место для всех типов водородоподобных атомов — «одномерного», «трехмерного» и «двумерного», как это следует из наших работ [2, 22] и настоящей работы соответственно. В общем случае любых разрешенных переходов подобное доказательство, если оно вообще существует, нами не найдено.

Большое (на порядок!) различие в ширине основной спектральной линии в подпространствах $\{0; 1, 2\}$, с одной стороны, и $\{0; 3\}$ (а также и $\{0; 1, 2, 3\}$), с другой, позволяет надеяться на экспериментальное подтверждение наших результатов при сравнении спектров излучения «трехмерных» и «эффективно одномерных» или «эффективно двумерных» водородоподобных атомов, если последние будут получены в эксперименте, аналогичном предложенному авторами [1].

В связи с этим стоит специально отметить, что действительно первое возбужденное состояние $N = 1, m = 0$ является метастабильным, так как однофотонный переход $N = 1, m = 0 \rightarrow N' = 0, m' = 0$ в основное состояние запрещен правилом отбора «по m ». В этом варианте возможно, очевидно, лишь намного менее вероятное двухфотонное излучение $(Ze)^* \rightarrow (Ze) + 2\gamma$, происходящее, например, в «трехмерном» случае, как и однофотонное $(Ze)^* \rightarrow (Ze) + \gamma$, без переворота спина (разд. 3 и [23, 24]) с вероятностью, пропорциональной $\alpha^2(Z\alpha)^6$, и с правилом отбора «по m » $\Delta m = 0$ (см., например, [23]), в то время как однофотонного $\sim \alpha(Z\alpha)^4$ — с правилом отбора $\Delta m = 0, \pm 1$ [21, 25].

Если «тонкая структура» «двумерного» водородоподобного атома с достаточной точностью будет идентифицирована в эксперименте, то в этом случае, очевидно, появится и необходимость в более точном вычислении E'_2, E'_4 при $m = 0$ — формулы (25a), (27), (28), (28f).

Можно констатировать, таким образом, что характеристики водородоподобного атома в рассматриваемом «эффективно двумерном» пространстве $\{0; 1, 2\}$ отнюдь не являются «промежуточными» по отношению к «соседним пространствам» $\{0; 3\}$, $\{0; 1, 2, 3\}$, как этого можно было бы ожидать в соответствии со здравым смыслом.

Это относится как к вероятностям однофотонного излучения с переходами с переворотом и без переворота спина и порядкам их величины, так, частично, и к наличию или отсутствию контактного и спин-орбитального взаимодействия.

На данный момент физическая причина этих «аномальных» свойств представляется нам неясной.

Автор благодарит В. П. Красина за помощь в систематизации литературы по вопросу.

ПРИЛОЖЕНИЕ

К вопросу о контактном и спин-орбитальном взаимодействиях в «трехмерном» водородоподобном атоме

Найдем вклад \hat{H}'_4 в энергию в «трехмерном» случае по спинорам [20, 22]:

$$\Psi_+ = \begin{pmatrix} \Psi_S \\ 0 \\ \frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}\Psi_S \\ \frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{F}^*\Psi_S \end{pmatrix}, \quad (A.1)$$

$$\Psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_S \\ \frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{F}\Psi_S \\ -\frac{i}{2}(Z\alpha)\hat{G}\Psi_S \end{pmatrix},$$

$$\hat{G} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho} \sin^2\theta \frac{\partial}{\partial\cos\theta}, \quad (A.1a)$$

$$\hat{F} = e^{-i\varphi} \left[\sin\theta \frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho} \cos\theta \sin\theta \frac{\partial}{\partial\cos\theta} - \frac{i}{\rho \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi} \right], \quad (A.1b)$$

аналогичным «двумерному» представлению (10a), (9a). Для этого запишем соответствующий «трехмерный» оператор \hat{H}'_4 (см. также последнее слагаемое в (6b)) в виде

$$\hat{H}'_4 = i \frac{\hbar(Ze^2)}{2m_e c} \hat{\Gamma} \frac{1}{r^2}, \quad \hat{\Gamma} \equiv \frac{\gamma^0(\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\rho})}{\rho}, \quad (A.2)$$

так что

$$E'_4 \equiv \int \bar{\Psi} \hat{H}'_4 \Psi dV = i \frac{\hbar(Ze^2)}{2m_e c r_0^2} I. \quad (A.2a)$$

В силу двукратного вырождения по спину возможные значения фактора I с использованием обозначения

$$I_{sign' sign} = \int J_{sign' sign} d\rho d\Omega, \quad (A.2b)$$

$$J_{sign' sign} = \bar{\Psi}_{sign'} \hat{\Gamma} \Psi_{sign};$$

$$sign', sign = +, -,$$

должны, вообще говоря, определяться из секулярного уравнения

$$\begin{vmatrix} I_{++} - I & I_{+-} \\ I_{-+} & I_{--} - I \end{vmatrix} = 0, \quad (A.2c)$$

решение которого можно записать в виде

$$I = \frac{I_{++} + I_{--}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(I_{++} - I_{--})^2 + I_{+-}I_{-+}}. \quad (\text{A.2d})$$

Далее, с учетом очевидного равенства

$$\hat{\Gamma} = \gamma^0 [(\gamma^1 \cos \varphi + \gamma^2 \sin \varphi) \sin \theta + \gamma^3 \cos \theta] \quad (\text{A.3})$$

и формул (22a)–(22ж) нашей работы [20] можно получить следующие выражения для величин J_{++} , $J_{--} \rightarrow J_{\pm\pm}$:

$$J_{\pm\pm} = \frac{i}{2}(Z\alpha) \left\{ \left[e^{\mp i\varphi} \Psi_S^* \begin{pmatrix} \hat{F}^* \\ \hat{F} \end{pmatrix} \Psi_S + e^{\pm i\varphi} \Psi_S \begin{pmatrix} \hat{F} \\ \hat{F}^* \end{pmatrix} \Psi_S^* \right] \sin \theta + \left[\Psi_S^* \hat{G} \Psi_S + \Psi_S \hat{G} \Psi_S^* \right] \cos \theta \right\}, \quad (\text{A.3a})$$

или с учетом (A.1b):

$$J_{\pm\pm} = \frac{i}{2}(Z\alpha) \left\{ \left[\Psi_S^* \begin{pmatrix} \hat{F}^* \\ \hat{F} \end{pmatrix} \Psi_S + \Psi_S \begin{pmatrix} \hat{F} \\ \hat{F}^* \end{pmatrix} \Psi_S^* \right] \sin \theta + \left[\Psi_S^* \hat{G} \Psi_S + \Psi_S \hat{G} \Psi_S^* \right] \cos \theta \right\}. \quad (\text{A.3b})$$

Здесь \hat{F} отличается от \hat{F} (A.1b) отсутствием экспоненциального множителя, аналогично отмеченному в разд. 5 его «исчезновению» в (28a), (28b).

Нетрудно также получить для недиагональных величин J_{+-} , $J_{-+} \rightarrow J_{\pm\mp}$:

$$J_{\pm\mp} = \mp \frac{i}{2}(Z\alpha) e^{\mp i\varphi} \left\{ \left[\Psi_S^* \hat{G} \Psi_S - \Psi_S \hat{G} \Psi_S^* \right] \sin \theta - \left[\Psi_S^* \begin{pmatrix} \hat{F} \\ \hat{F}^* \end{pmatrix} \Psi_S - \Psi_S \begin{pmatrix} \hat{F} \\ \hat{F}^* \end{pmatrix} \Psi_S^* \right] \cos \theta \right\}. \quad (\text{A.3c})$$

Как видно, при интегрировании по $d\varphi$ в (A.2b) соответствующие значения $I_{\pm\mp}$ обращаются в нуль, так что секулярное уравнение имеет два корня: I_{++} , I_{--} .

Учитывая явный вид спинора (A.1), операторов (A.1a), (A.1b) и выражение (A.3b), получаем

$$J_{\pm\pm} = i(Z\alpha) \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \mp \frac{m}{\rho} \right) |\Psi_S|^2. \quad (\text{A.4})$$

С использованием представления «трехмерной» шредингеровской волновой функции $\Psi_S = R_{nl}(\rho) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ [21, 27] имеем с учетом (A.2b):

$$I \rightarrow I_{\pm\pm} = i(Z\alpha) \int_0^\infty \left(\frac{d}{d\rho} \mp \frac{m}{\rho} \right) R_{nl}^2(\rho) d\rho \times \int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (\text{A.5})$$

Из (A.2a), (A.2b), (A.5) с учетом условия нормировки $\int |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = 1$ для угловой части $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ «трехмерной» шредингеровской волновой функции получаем соответствующую поправку к энергии, которая, таким образом, состоит из двух слагаемых:

$$E'_4 = E_4^{cont} + E_4^{s-o}, \quad (\text{A.6})$$

$$E_4^{cont} = -\frac{1}{2}(Z\alpha)^4 m_e c^2 R_{nl}^2(0), \quad (\text{A.6a})$$

$$E_4^{s-o} = \pm \frac{1}{2} m(Z\alpha)^4 m_e c^2 \left\langle \frac{1}{\rho^3} \right\rangle, \quad (\text{A.6b})$$

$$\left\langle \frac{1}{\rho^3} \right\rangle = \int_0^\infty R_{nl}^2(\rho) \frac{1}{\rho^3} \rho^2 d\rho = \int_0^\infty R_{nl}^2(\rho) \frac{d\rho}{\rho}. \quad (\text{A.6c})$$

Выражения (A.6a), (A.6b) соответствуют так называемому контактному и спин-орбитальному взаимодействиям по терминологии книги [21], а вырождение по спину, таким образом, снимается этим последним взаимодействием.

Поскольку $R_{nl}(0) \neq 0$ только при $l = 0$ [21, 27], с использованием приведенного в этих же книгах вида радиальной части волновой функции находим

$$R_{nl}(0) \rightarrow \frac{2\sqrt{n}}{n^2} \delta_{l,0},$$

и вклад (A.6a) записывается в виде

$$E_4^{cont} = -2 \frac{(Z\alpha)^4}{n^3} m_e c^2 \delta_{l,0}. \quad (\text{A.7a})$$

Выражение E_4^{s-o} (A.6b) при $l = 0$ обращается в нуль, так как в этом случае $m = 0$ (иначе говоря, орбитальный момент равен нулю и никакого спин-орбитального взаимодействия также нет), а интеграл по $d\rho$ в (A.6c) при $l \neq 0$ вычислен, например, в

книге [21], так что общее выражение для энергии спин-орбитального взаимодействия можно представить в виде

$$E_4^{s-o} = \pm \frac{1}{2} m(Z\alpha)^4 m_e c^2 \left\langle \frac{1}{\rho^3} \right\rangle, \quad (\text{A.7b})$$

$$\left\langle \frac{1}{\rho^3} \right\rangle = \frac{1}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}.$$

Выражение (A.7b) согласуется с классической трактовкой: при $m \begin{pmatrix} > \\ < \end{pmatrix} 0$, что соответствует параллельным орбитальному и спиновому «механическим» (и магнитным) моментам, имеем $\Delta E_4^{s-o} > 0$, а при $m \begin{pmatrix} < \\ > \end{pmatrix} 0$, т. е. при антипараллельной их ориентации, $\Delta E_4^{s-o} < 0$, так как и на классическом уровне энергия взаимодействия двух магнитных диполей достаточно аналогичным образом зависит от их взаимной ориентации [28]:

$$E = \frac{(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2)}{r^3} - 3 \frac{(\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5}. \quad (\text{A.8})$$

При этом формула (A.7b), очевидно, является квантовомеханическим аналогом первого слагаемого в классическом выражении для энергии (A.8).

Таким образом, на наш взгляд, представление (A.7b) значительно нагляднее иллюстрирует спин-орбитальную связь, и к тому же с более прозрачной физической интерпретацией, чем это практиковалось ранее (см., например, [21]).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Gorlitz et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
2. В. В. Скобелев, ЖЭТФ **151**, 1031 (2017).
3. В. В. Скобелев, ЖЭТФ **152**, 1241 (2017).
4. В. Zaslav and C. E. Zandler, Amer. J. Phys. **35**, 1118 (1967).
5. A. Gisneros and N. V. McIntosh, J. Math. Phys. **10**, 277 (1968).
6. Л. Г. Мардоян, Г. С. Погосян, А. С. Сисакян, В. М. Тер-Антонян, ТМФ **61**, 99 (1984).
7. A. Poszwa and A. Rutkowski, Acta Physica Polonica A **117**, 439 (2010).
8. A. Aquino, G. Camroy, and A. Flores-Riveros, Int. J. Quant. Chem. **103**, 267 (2005).
9. L. Chaos-Cador and E. Ley-Koo, Int. J. Quant. Chem. **107**, 12 (2007).
10. C. A. Coulson and P. D. Robinson, Proc. Phys. Soc. **71**, 815 (1958).
11. L. G. Mardoyan, G. S. Pogosyan, A. N. Sissakyan, and V. M. Ter-Antoyan, J. Phys. A **16**, 711 (1983).
12. S. H. Guo, X. L. Yang, F. T. Chan, K. W. Wong, and W. Y. Ching, Phys. Rev. A **43**, 1197 (1991).
13. Ю. А. Бычков, Е. И. Рашба, Письма ЖЭТФ **39**, 66 (1984).
14. G. Grimaldi, Phys. Rev. B **77**, 113308 (2008).
15. S.-H. Dong and Z.-Q. Ma, Phys. Lett. A **312**, 78 (2003).
16. Xiao-Yan Gu, Zhong-Qi Ma, and Shi-Hai Dong, Int. J. Mod. Phys. E **11**(4), 335 (2002).
17. X. L. Yang, S. H. Guo, F. T. Chan, K. W. Wong, and W. Y. Ching, Phys. Rev. A **43**, 1186 (1991).
18. S. H. Guo, X. L. Yang, and F. T. Chan, Phys. Rev. A **43**, 1197 (1991).
19. В. В. Скобелев, ЖЭТФ **149**, 285 (2016); Поправка: ЖЭТФ **149**, 909 (2016).
20. В. В. Скобелев, Изв. вузов, физика **51**(1), 41 (2016).
21. А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов, *Квантовая механика*, Учпедгиз, Москва (1962).
22. В. В. Скобелев, Изв. вузов, физика **59**(7), 141 (2016).
23. В. В. Скобелев, Изв. вузов, физика **59**(10), 93 (2016).
24. В. В. Скобелев, Изв. вузов, физика **60**(1), 44 (2017).
25. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, Москва (1960).
26. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Релятивистская квантовая теория*, ч. 1, Наука, Физматлит, Москва (1968).
27. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. III, *Квантовая механика, Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
28. C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1980).