

Спектр атома водорода в сверхсильном магнитном поле и эффект Зельдовича в кулоновской задаче с “короткодействием”

Б. М. Карнаков¹⁾

Московский инженерно-физический институт (Государственный университет), 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 29 ноября 2002 г.

Получены формулы, описывающие энергетический спектр атома водорода, находящегося в сверхсильном магнитном поле, для состояний с различными значениями магнитного квантового числа. Сравнение с имеющимися численными расчетами спектра показывает высокую точность полученных результатов. Отмечается, что эти результаты могут быть интерпретированы как проявление в рассматриваемой задаче эффекта Зельдовича относительно перестройки спектра атома водорода под влиянием сильного искажения кулоновского потенциала на малых расстояниях.

PACS: 03.65.–w, 32.30.–g

Таблица 1

1. Задача об атоме водорода, находящемся в экстремально сильном магнитном поле с напряженностью $H \gg H_0 \equiv e^3 m^2 c / \hbar^3 = 2.35 \cdot 10^9$ Гс представляет большой интерес для астрофизики и физики твердого тела. Опубликовано большое число работ, в которых энергетический спектр такого атома рассчитывался различными численными методами, см. [1] и цитированную там литературу.

Тем не менее, насколько известно автору, корректных аналитических выражений для этого спектра не существует (см., однако, замечание после формулы (12)). Известная формула для (Elliott and London) энергии связи основного состояния атома

$$\epsilon_0(H) \equiv \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \ln^2 \left(\frac{H}{H_0} \right), \quad (1)$$

см. [2] (§ 112), даже при значениях $H \sim (10^4 \div 10^5) H_0$ (на границе применимости нерелятивистского приближения) определяет значения ϵ_0 лишь по порядку величины, которые в три раза превосходят результат точного численного расчета. Более того, при этом обратная (1) зависимость

$$H(\kappa) = H_0 e^{\kappa a_B} \quad (2)$$

(a_B – радиус Бора) вообще является неудовлетворительной, так как дает заниженные на два порядка значения $H(\kappa)$, см. ниже табл. 1.

Такое несоответствие связано с тем, что как вывод формулы (1), так и общие соображения о свойствах спектра возбужденных состояний атома, приведенные в [2], требуют ряда существенных уточне-

κ^2	H/c				a_H/a_B
	[1]	ур.(12)	ур.(2)	[10]	
47.783	10^5	$1.003 \cdot 10^5$	$1.0 \cdot 10^3$	$1.7 \cdot 10^5$	$3.2 \cdot 10^{-3}$
41.159	$5 \cdot 10^4$	$5.014 \cdot 10^4$	611	$9.0 \cdot 10^4$	$4.5 \cdot 10^{-3}$
28.282	10^4	9991	204	$2.1 \cdot 10^4$	10^{-2}
23.747	$5 \cdot 10^3$	4970	131	$1.1 \cdot 10^4$	$1.4 \cdot 10^{-2}$
18.610	$2 \cdot 10^3$	1961	75	$5.0 \cdot 10^3$	$2.3 \cdot 10^{-2}$
15.325	10^3	962	50	$2.7 \cdot 10^3$	$3.2 \cdot 10^{-2}$
11.703	$4 \cdot 10^2$	368	31	$1.3 \cdot 10^3$	$5.2 \cdot 10^{-2}$
9.4543	$2 \cdot 10^2$	174	22	730	$7.6 \cdot 10^{-2}$
7.5796	10^2	80	16	420	0.10

ний. В частности, оказывается, что четные и нечетные (по отношению к отражению координаты электрона вдоль магнитного поля) уровни описываются совершенно разными выражениями и сильно сдвинуты относительно друг друга. При этом в спектре четных состояний проявляется эффект Зельдовича о возможности перестройки спектра атома водорода, $E_n = -me^4/2\hbar^2 n^2$, под влиянием искажения кулоновского потенциала на малых расстояниях, $r \ll a_B$. Этот эффект, предсказанный Зельдовичем [3] в связи с задачей об уровнях энергии электрона в примесном полупроводнике, предъявляет довольно жесткие требования к характеру такого искажения кулоновского потенциала: для медленных частиц оно должно иметь резонансный характер. Аналогичное поведение уровней электронного спектра было обнаружено [4] в релятивистской задаче с зарядом ядра $Z > 137$. Эффект Зельдовича в свое время привлек широкое внимание ввиду возможности его проявления в адронных атомах, см. [5–8].

¹⁾e-mail: karnak@theor.mephi.ru

2. Выбирая векторный потенциал внешнего магнитного поля в виде $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{H}\mathbf{r}]$ и направляя ось z вдоль \mathbf{H} , имеем гамильтониан рассматриваемой системы в нерелятивистском приближении ²⁾:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_{\perp} + \frac{1}{8}\left(\frac{H}{c}\right)^2 \rho^2 + \frac{H}{2c}(\hat{i}_z + \hat{\sigma}_z) - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}.$$

В случае сверхсильного магнитного поля для решения уравнения Шредингера может быть использовано адиабатическое приближение. При этом решения записываются в виде

$$\psi_{nn\rho m}(\mathbf{r}) = R_{n\rho m}(\rho)\chi_n(z),$$

где $R_{n\rho m}(\rho)$ – известные функции поперечного движения электрона в чисто магнитном внешнем поле [2] (мы опустили спиновую часть волновой функции). Спектр связанных состояний гамильтониана представляется в виде

$$E_{nn\rho m\sigma_z} = \left(n\rho + \frac{|m| + m + 1}{2} + \frac{\sigma_z}{2}\right)\frac{H}{c} - \frac{1}{2}\kappa_n^2 |m| n\rho, \quad (3)$$

где $\sigma_z = \pm 1$, n является квантовым числом для продольного движения, а последнее слагаемое определяет сдвиг соответствующего уровня Ландау, обязанный действию кулоновского потенциала. Этот сдвиг находится из уравнения Шредингера для продольной части волновой функции:

$$\left\{-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_{\text{эфф}}(|z|) + \frac{\kappa^2}{2}\right\}\chi_n(z) = 0, \quad (4)$$

в котором эффективная потенциальная энергия дается выражением

$$U_{\text{эфф}}(|z|) = -\int\int\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}|R_{n\rho m}(\rho)|^2 d^2\rho. \quad (5)$$

Отметим следующие свойства этого потенциала (конкретные выражения для него зависят от квантовых чисел $n\rho$ и $|m|$ поперечного движения).

1) На расстояниях $|z| \leq a_H \ll a_B$ по порядку величины $U_{\text{эфф}}(|z|) \sim 1/a_H$, здесь $a_H = \sqrt{\hbar/m\omega_H}$ и $\omega_H = eH/mc$. При этом $U_{\text{эфф}} \cdot a_H^2 \sim a_H \ll 1$, так что на таких расстояниях потенциал представляет собой “мелкую” одномерную потенциальную яму.

²⁾Здесь и ниже используем атомную систему единиц, $e = \hbar = m = 1$, в которой скорость света $c = \alpha^{-1} = 137$.

2) На расстояниях $|z| \gg a_H$ эффективный потенциал имеет уже кулоновский вид.

3) Отметим также, что $U_{\text{эфф}}(|z|) + 1/|z| > 0$, то есть кривая эффективной потенциальной энергии расположена выше кулоновской. Приведем эффективный потенциал для состояний с $m = n\rho = 0$:

$$U_{\text{эфф}}(|z|) = -\frac{\sqrt{2}}{a_H}\int_0^{\infty}e^{-\sqrt{2}|z|x/a_H-x^2}dx. \quad (6)$$

Решения уравнения (4) имеют определенную четность, $P = \pm 1$, относительно преобразования $z \rightarrow -z$. Начнем со случая четных состояний, для которых $\chi'(0) = 0$. Рассматривая в уравнении (4) на расстояниях $|z| \leq a_H \ll 1$ слагаемые с $U_{\text{эфф}}$ и κ^2 как возмущение, в нулевом приближении имеем $\chi(z) = 1$, $\chi'(z) = 0$. Более точное значение $\chi'(z)$ может быть получено из уравнения (4), если в нем опустить член с энергией связи, заменить $\chi(z)$ единицей в слагаемом с эффективным потенциалом и проинтегрировать получающееся уравнение по z ; в результате имеем

$$\chi'(|z|) = 2\int_0^{|z|}U_{\text{эфф}}(|z|)dz. \quad (7)$$

Для дальнейшего нам потребуются значения $\chi'(|z|)$ лишь на расстояниях $a_H \ll |z| \ll a_B$, где эффективный потенциал является уже кулоновским. Принимая во внимание зависимость функций $R_{n\rho m}(\rho)$ от ρ (полиномы по переменной ρ^2 , умноженные на $\exp(-\rho^2/4a_H^2)$) и используя значение интеграла

$$\int_0^{\infty}x^{s-1}e^{-x}\ln x dx = \Gamma'(s) = \Gamma(s)\psi(s), \quad (8)$$

где $\psi(z)$ – логарифмическая производная гамма-функции, замечаем, что производная $\chi'(|z|)$ на указанных расстояниях согласно формуле (7) имеет вид³⁾

$$\chi'(|z|) \approx -2\ln\frac{|z|}{a_H} + A_{|m|n\rho}. \quad (9)$$

Существенно, что слагаемое $A_{|m|n\rho}$ не зависит от H . В частности, для безузельных в поперечном направлении состояний, с $n\rho = 0$, согласно (8) получаем

$$A_{|m|0} = -\ln 2 + \psi(1 + |m|). \quad (10)$$

³⁾Сначала следует проинтегрировать $1/\sqrt{z^2 + \rho^2}$ в эффективном потенциале, см. (5), по z и перейти к пределу $|z| \rightarrow \infty$, опуская убывающие члены разложения. После этого интеграл с $\ln|z|$ вычисляется элементарно, а не зависящий от z интеграл с $\ln\rho$ выражается через интегралы вида (8). Заметим также, что хотя в (9) $\chi'(|z|) > 1$, тем не менее по-прежнему $\chi(|z|) \approx 1$.

Напомним, что $\psi(1) = -\gamma$, где $\gamma = 0.5772\dots$ – постоянная Эйлера, и $\psi(n+1) = -\gamma + \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}$ для целых $n = 1, 2, \dots$

В то же время, экспоненциально убывающее на больших расстояниях, $|z| \rightarrow \infty$, решение уравнения (4) с чисто кулоновским эффективным потенциалом описывается функцией Уиттекера:

$$\chi(|z|) = \text{const} \cdot W_{\nu, 1/2}(2|z|/\nu)$$

с $\nu = 1/\kappa$. На малых расстояниях $|z| \ll 1$ это решение имеет вид

$$\chi(|z|) = \left\{ 1 - 2|z| \ln(2\kappa|z|) - \left[\kappa + 2\psi \left(1 - \frac{1}{\kappa} \right) - 2 + 4\gamma \right] |z| + \dots \right\} \quad (11)$$

(см. [9], формула 9.237), мы положили $\text{const} = \Gamma(1 - \nu)$. Дифференцируя это выражение и приравнявая (9), получаем уравнение для спектра четных состояний в виде

$$\ln \frac{H}{c} \equiv \ln \frac{1}{a_H^2} = \kappa + 2 \ln \kappa + 2\psi \left(1 - \frac{1}{\kappa} \right) + 4\gamma + 2 \ln 2 + A_{|m|n_\rho}. \quad (12)$$

Подчеркнем, что это уравнение непосредственно определяет зависимость $H(\kappa)$ для четных уровней; интересно, что при этом выражение $\exp\{-A_{|m|n_\rho}\} \times H(\kappa_{n|m|n_\rho})$ является универсальной функцией (для данного n), одинаковой для состояний с различными квантовыми числами $|m|$ и n_ρ .

Основные свойства этого спектра, то есть зависимость $\kappa_{n|m|n_\rho}^{(+)}(H)$, легко понять, если заметить аналогию между уравнением (12) и уравнением, определяющим спектр s -состояний в трехмерном кулоновском потенциале притяжения $U(r) = -e^2/r$, искаженном на малых расстояниях, $r \ll a_B$, некоторым сильным короткодействующим потенциалом $U_S(r)$, который сам может связать частицу (электрон). Это уравнение имеет вид [6–8]

$$\frac{1}{a_0} = \kappa + 2 \ln \kappa + 2\psi \left(1 - \frac{1}{\kappa} \right), \quad (13)$$

где a_0 – (перенормированная) длина рассеяния в s -состоянии в потенциале U_S . Сравнение формул (12) и (13) показывает, что аналогом обратной длины рассеяния является

$$\frac{1}{a_0(H)} \equiv \ln \frac{H}{c} - 4\gamma - 2 \ln 2 - A_{|m|n_\rho}. \quad (14)$$

При этом в условиях применимости рассматриваемого подхода $a_H \ll a_0(H)$, причем численно $a_0(H) > a_B/10$; так, для $H/c = 10^4$ в случае $m = n_\rho = 0$ имеем $a_0(H) \approx 0.15$ и $a_H = 0.01$.

Имея в виду указанную аналогию, отметим следующие свойства спектра четных уровней.

1) Для каждой пары квантовых чисел $|m|$ и n_ρ уравнение (12) имеет бесконечное число корней $\kappa_{n|m|n_\rho}^{(+)} > 0$. Нижний (с $n = 1$) из них, для которого $\kappa_{1|m|n_\rho}^{(+)} \gg 1$, соответствует глубокому, в атомном масштабе, уровню; сравнить с (1).

2) Остальные корни, с $n \geq 2$, отвечают возбужденным состояниям. Соответствующие энергетические уровни расположены между соседними несмещенными кулоновскими n' -уровнями с главными квантовыми числами n' , равными $(n-1)$ и n .

Заметим, что в работе [10] для нижнего (глубокого) уровня $n = 1^+$ было получено аналогичное (12) уравнение, в котором вместо $\psi(1 - 1/\kappa)$ фигурирует $\psi(1) = -\gamma$. Такое уравнение заведомо неприменимо для возбужденных четных состояний, но по-прежнему является асимптотически точным для зависимости $H(\kappa)$ для нижнего уровня. Однако указанная замена приводит к заметной потере точности при больших, но конечных значениях H (ограниченных ввиду использования нерелятивистского приближения), см. табл. 1.

Дальнейший анализ состояний нижней части энергетического спектра см. в разд. 3.

Обсудим теперь свойства нечетных состояний, следующие из уравнения (4). Как известно, энергетический спектр E_{ns} для s -уровней в трехмерном потенциале $U(r)$ совпадает со спектром нечетных уровней в симметричном одномерном потенциале $U(|z|)$ такой же формы. Поэтому, принимая во внимание отмеченные выше свойства $U_{\text{эф}}(|z|)$, можно утверждать, что если в соответствующей трехмерной задаче записать потенциал в виде $U_{\text{эф}}(r) \equiv -1/r + (U_{\text{эф}}(r) + 1/r)$, то последнее слагаемое в нем можно рассматривать как малое искажение чисто кулоновского потенциала и учесть его по теории возмущений. Это позволяет написать следующее выражение для нечетных n -уровней в потенциале $U_{\text{эф}}(|z|)$:

$$E_{n|m|n_\rho}^{(-)} \equiv -\frac{1}{2} \left(\kappa_{n|m|n_\rho}^{(-)} \right)^2 = -\frac{1}{2n^2} + \int \left(U_{\text{эф}}(r) + \frac{1}{r} \right) \left| \psi_{ns}^{(0)}(r) \right|^2 d^3r, \quad (15)$$

где $\psi_{ns}^{(0)}(r)$ – невозмущенные волновые функции ns -состояний в кулоновском потенциале, при этом уровни слегка сдвинуты вверх относительно ку-

ловских уровней (подынтегральное выражение в (15) – положительная величина).

Заметим, что в случае, когда короткодействующее искажение кулоновского потенциала, $U_{\text{eff}}(r) + 1/r$, убывает с увеличением r быстрее, чем $\propto 1/r^3$, в формуле (15) можно вынести из-под интеграла $|\psi_{n_s}^{(0)}(0)|^2$ и получить выражение⁴⁾

$$E_{n|m|n_\rho}^{(-)} = -\frac{1}{2n^2} + \int \left(U_{\text{eff}}(r) + \frac{1}{r} \right) d^3r \cdot |\psi_{n_s}^{(0)}(0)|^2, \quad (16)$$

которое описывает сдвиги кулоновских уровней с произвольными значениями n , при этом $\delta E_{n|m|n_\rho}^{(-)} \propto |\psi_{n_s}^{(0)}(0)|^2 = 1/\pi n^3$.

Используя, в случае $m = n_\rho = 0$, выражения (6) и (15), можно получить асимптотическое разложение для энергии связи нижнего нечетного уровня и с помощью формулы (16) обобщить его на состояния с произвольным значением n :

$$\left(\kappa_{n00}^{(-)} \right)^2 = \frac{1}{n^2} - \frac{4}{n^3} \times \left\{ \frac{c}{H} \ln \frac{H}{2c} + (\gamma + 2) \frac{c}{H} - 2\sqrt{2\pi} \left(\frac{c}{H} \right)^{3/2} + \dots \right\}. \quad (17)$$

Приведем также обобщение этого результата на случай безузельных состояний с произвольным значением $|m|$:

$$E_{n|m|0}(H) = (-1)^{|m|} \frac{1}{|m|!} H^{|m|+1} \frac{d^{|m|}}{dH^{|m|}} \left(\frac{1}{H} \cdot E_{n00}(H) \right).$$

3. Обсудим полученные результаты и сравним их с имеющимися численными расчетами. В работе [1] с прецизионной точностью был рассчитан спектр атома водорода для ряда состояний с $m = 0$ ниже основного уровня Ландау в широком интервале значений H . Табл. 1 иллюстрирует зависимость $H(\kappa)$ для основного состояния атома. В ней при указанных значениях κ^2 сравниваются соответствующие величины напряженностей магнитного поля, взятые из [1] и [10], а также вычисленные как по формуле (12), так и согласно (2); кроме того, приведены значения отношения a_H/a_B , малость которого требуется для применимости используемого адиабатического приближения.

⁴⁾ Интеграл в нем с точностью до множителя $1/2\pi$ определяет длину рассеяния на искажающем потенциале в борновском приближении. В связи с этим напомним, что в нерезонансном случае для сдвига уровня справедлива следующая оценка: $\Delta \kappa_{n_s}^2 \equiv 1/n^2 - \kappa_{n_s}^2 \leq 4a_s/n^3 \leq 4r_s/n^3$, где r_s – радиус искажающего короткодействующего потенциала, а a_s – длина s -рассеяния для этого потенциала.

Отметим, что зависимость $\kappa^2(H)$ энергии связи уровня от магнитного поля дается уравнением (12) с гораздо большей точностью, чем обратная ей зависимость $H(\kappa)$, представленная в табл. 1. Так, для напряженностей поля H/c , равных 10^5 , $5 \cdot 10^3$, 200 согласно (12) имеем следующие значения энергии связи: $47.755 (6 \cdot 10^{-4})$, $23.783 (1.5 \cdot 10^{-3})$ и $9.84 (4 \cdot 10^{-2})$, соответственно, в скобках указана погрешность полученного результата (сравнить с данными таблицы). Такое различие связано с тем фактом, что зависимость $H(\kappa)$ имеет резкий экспоненциальный характер, и это обстоятельство является одной из причин несостоятельности формулы (2), упомянутой в начале статьи.

Обратим также внимание на то, что, как и ожидалось (поскольку $a_0(H) > a_B/10$), энергия связи для основного уровня в сильном магнитном поле велика в шкале обычных атомных энергий.

Приведем также табл. 2, в которой представлены энергии связи для нижних возбужденных состояний

Таблица 2

H/c	$n = 2^+ (2s)$		$n = 1^- (2p)$	
	$\kappa^2(H)$, [1]	$\kappa^2(H)$, ур.(12)	$\kappa^2(H)$, [1]	$\kappa^2(H)$, ур.(17)
10^4	–	0.65525	–	0.99760
3000	–	0.62390	–	0.99356
2000	0.61248	0.61250	0.99119	0.99111
1000	0.59171	0.59207	0.98499	0.98482
400	0.56206	0.56342	0.97073	0.97028
200	0.53794	0.54079	0.95306	0.95235
140	0.52496	0.52888	0.94092	0.94014
100	0.51236	0.51760	0.92723	0.92655
60	0.49261	0.50046	0.90186	0.90192
40	0.47640	0.48696	0.87748	0.87888
20	0.44768	0.46440	0.82676	0.83073
10	0.41790	0.44291	0.76530	0.75298

атома с $m = 0$, как взятые из [1], так и вычисленные по асимптотическим формулам (12) и (17) для состояний с квантовыми числами $n = 2^+$, $m = n_\rho = 0$ и $n = 1^-$, $m = n_\rho = 0$ (в [1] они классифицируются как $2s$ и $2p$ состояния с $m = 0$, соответственно). Сделаем следующие замечания в отношении приведенных в ней результатов.

1) Сравнение с данными табл. 1 показывает, что для этих, возбужденных в продольном направлении движения, состояний рассматриваемый подход обеспечивает более высокую точность. Это обстоятельство имеет простое объяснение, поскольку для возбужденных состояний растет размер области локализации волновой функции в продольном направлении, что приводит к расширению области применимости

адиабатического приближения на все меньшие значения магнитного поля.

2) Результаты для нечетного состояния $n = 1^-$ (или $2p$) подтверждают сделанные после формулы (15) замечания и вряд ли требуют дополнительного комментария.

Однако случай четного состояния $n = 2^+$ ($2s$) гораздо более интересен. Как видно из табл. 2, соответствующий уровень сильно сдвинут относительно невозмущенных кулоновских уровней, $E_n = -1/2n^2$, и расположен почти посередине между уровнями с главными квантовыми числами $n = 1$ и $n = 2$ (такому положению уровня соответствует значение $\tilde{\kappa}_{12}^2 = 0.625$). Заметим, что подобная ситуация сохраняется и для более сильно возбужденных четных уровней. Так, для уровня $n = 3^+$ при значениях H/c , равных 10^2 и 10^3 , согласно формуле (12) имеем $\kappa^2 = 0.17471$ и $\kappa^2 = 0.18876$, соответственно, в то время как $\tilde{\kappa}_{23}^2 = 0.18056$.

Обсудим причину столь различного характера сдвигов четных и нечетных уровней в одномерном симметричном потенциале $U_{\text{эф}}(|z|)$ и связь полученных результатов с эффектом Зельдовича. Как было показано в работе [3], в трехмерной кулоновской задаче с “короткодействием” большие сдвиги ns -уровней возможны лишь в случаях “сильного” искажающего короткодействующего потенциала, в котором имеется собственный “мелкий”, реальный или виртуальный, s -уровень (так что рассеяние медленных частиц на таком потенциале носит резонансный характер). В остальных случаях сдвиги кулоновских уровней малы, даже если в искажающем потенциале имеются свои уровни дискретного спектра, глубокие в атомном масштабе. В одномерном случае волновые функции четных и нечетных состояний удовлетворяют на полуоси $r \equiv |z| \geq 0$ одному и тому же уравнению Шредингера (4), но разным граничным условиям в точке $r = 0$: $\chi^{(-)}(0) = 0$ – для нечетных и $\chi^{(+)}(0) = 0$ – для четных уровней (при этом $\chi^{(+)}(0) \neq 0$). Выше уже отмечалось совпадение спектров нечетных уровней в симметричном одномерном потенциале и ns -уровней в соответствующем центрально-симметричном трехмерном потенциале. Нормированные волновые функции в этих случаях связаны соотношением $\psi_{ns}(r) = \chi_n^{(-)}(r)/\sqrt{2\pi r}$, так что $\psi_{ns}(0) < \infty$, а малость сдвигов нечетных уровней относительно кулоновских объяснялась слабостью искажения кулоновского потенциала⁵⁾.

⁵⁾ Как отмечалось, $U_{\text{эф}}(|z|) + 1/|z| > 0$, так что искажающий потенциал является отталкивательным и поэтому не может иметь резонансного характера.

Для четных состояний подобная аналогия не проходит, поскольку теперь $\tilde{\psi}_{ns}(r) = \chi_n^{(+)}(r)/r \propto 1/r \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$, а такие сингулярные решения уравнения Шредингера обычно исключаются из рассмотрения, кроме случая трехмерного потенциала нулевого радиуса. Напомним, что такой потенциал, локализованный в точке $r = 0$, определяется наложением на волновую функцию граничного условия вида [11,12]

$$\frac{d \ln \chi(r)}{dr} = -\kappa_0, \text{ или}$$

$$\tilde{\psi}(r) \approx \text{const} \cdot \left(\frac{1}{r} - \kappa_0 + o(r) \right), \text{ при } r \rightarrow 0, \quad (18)$$

где параметр κ_0 определяет энергию реального (при $\kappa_0 > 0$) или виртуального (при $\kappa_0 < 0$) s -уровня $E_0 = -\hbar^2 \kappa_0^2 / 2m$, существующего в этом потенциале.

Теперь легко заметить, что с четными решениями $\chi_n^{(+)}(|z|)$ уравнения Шредингера для симметричного одномерного потенциала $U(|z|)$, для которых $\chi_n^{(+)}(0) = \text{const} \neq 0$ и $\chi^{(+)}(0) = 0$, однозначно связаны решения $\tilde{\psi}_{ns}(r) = \chi^{(+)}(r)/\sqrt{2\pi r}$ уже трехмерного уравнения Шредингера для s -состояний с тем же потенциалом $U(r)$, которые удовлетворяют граничному условию (18) с $\kappa_0 = 0$. Это означает, что в данном случае сферически-симметричный потенциал является суперпозицией потенциала $U(r)$ (в рассматриваемой задаче это – эффективный потенциал $U_{\text{эф}}(r)$) и потенциала нулевого радиуса (в точке $r = 0$), для которого $\kappa_0 = 0$.

Существенно, что случай $\kappa_0 = 0$ означает, что такой потенциал нулевого радиуса моделирует “сильный” короткодействующий потенциал в момент возникновения в нем связанного состояния (с нулевой энергией связи), при этом (неперенормированный эффективный потенциал) длина рассеяния $a_0 = \kappa_0^{-1} = \infty$. Именно такое свойство короткодействующего потенциала, искажающего трехмерный кулоновский потенциал, требуется для возникновения эффекта Зельдовича⁶⁾.

Заметим, что для обобщения полученных результатов на случай одноэлектронных ионов с зарядом ядра Ze следует, записав соответствующие формулы в обычных единицах, сделать в них замены $e \rightarrow \sqrt{Z}e$ и $H \rightarrow H/\sqrt{Z}$.

Автор выражает благодарность В. С. Попову и В. Д. Муру за полезные обсуждения и замечания по рукописи статьи.

⁶⁾ Слабое искажение кулоновского потенциала в $U_{\text{эф}}(r)$ не изменяет резонансного характера взаимодействия, связанного с потенциалом нулевого радиуса.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект # 01-02-16850).

1. Jang-Haur Wang and Chen-Shiung Hsue, *Phys. Rev.* **A52**, 4508 (1995).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, М.: Физматлит, 2002.
3. Я. Б. Зельдович, *ФТТ* **1**, 1637 (1959); см. также Я. Б. Зельдович, *Избранные труды. Частицы, ядра, Вселенная*, М.: Наука, 1985.
4. В. С. Попов, *ЖЭТФ* **60**, 1228 (1971).
5. А. Е. Кудрявцев, В. Е. Маркушин, И. С. Шапиро, *ЖЭТФ* **74**, 432 (1978).
6. А. Е. Кудрявцев, В. С. Попов, *Письма в ЖЭТФ*, **29**, 311 (1979).
7. В. С. Попов, А. Е. Кудрявцев, В. Д. Мур, *ЖЭТФ* **77**, 1727 (1979); *ЖЭТФ* **80**, 1271 (1981).
8. Б. М. Карнаков, А. Е. Кудрявцев, В. Д. Мур, В. С. Попов, *ЖЭТФ* **94**, 65 (1988).
9. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, М.: ГИФМЛ, 1962.
10. H. Hasegawa and R. E. Howard, *J. Phys. Chem. Sol.* **21**, 179 (1961).
11. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, изд. 2-ое, М.: Наука, 1971.
12. Ю. Н. Демков, В. Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, ИЛУ, Ленинград, 1975.