Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Белов, В. А. Максимов, Квазиклассические спектральные серии гелиепо-
добного атома в магнитном поле, *ТМФ*, 2001, том 126, номер 3, 455–474

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf441>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и
согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.210.77.194

26 апреля 2023 г., 15:23:04

© 2001 г.

В. В. Белов*, В. А. Максимов*

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ СЕРИИ ГЕЛИЕПОДОБНОГО АТОМА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Для модели двух электронов в поле неподвижного центра на основе комплексного метода ВКБ (теории комплексного ростка Маслова) построены квазиклассические спектральные серии собственных значений оператора Паули во внешнем магнитном поле с учетом спин-орбитального, спин-спинового взаимодействий и квадрупольного момента ядра. Эти серии отвечают найденному новому типу замкнутых фазовых траекторий – относительным положениям равновесия соответствующей классически неинтегрируемой системы. Получены явные эффективные формулы для тонкого (эффект Зеемана) и сверхтонкого расщеплений квазиклассических уровней энергии гелиеподобного иона с произвольным зарядом ядра Z во всей области изменения величины магнитного поля, включая предельные случаи слабого и сверхсильного полей.

1. ВВЕДЕНИЕ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Работа посвящена исследованию спектра гелиеподобных атомов (во внешнем магнитном поле) в рамках квазиклассического приближения. Как известно, квазиклассическое приближение реализует принцип соответствия результатов квантовой и классической теорий. В частности, в спектральных квантовых задачах квазиклассический подход позволяет сопоставить инвариантным объектам соответствующей классической системы приближенные собственные значения и собственные функции квантового гамильтониана. Такое сопоставление называют квазиклассическим квантованием.

Квазиклассическое квантование инвариантных (полномерных) лагранжевых торов в интегрируемых и близких к интегрируемым классических системах (квантование Эйнштейна–Бриллюэна–Келлера (ЭБК)) дает серии квазиклассических уровней энергии, а метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ) – и соответствующие волновые функции одномерных квантовых гамильтонианов. Строгая математическая реализация этих методов в многомерных спектральных задачах, в том числе и с матричными гамильтонианами (многомерный метод ВКБ), была осуществлена в работах Маслова [1], [2] в его теории канонического оператора с вещественной фазой. Как отмечает в своей известной книге [3] Лере, квантование Маслова дает результат старой квантовой теории, сохраняя простоту вычислений; это квантование, возникающее из чисто математических рассуждений, может заменить квантование Бора–Зоммерфельда. С физической точки

*Московский государственный институт электроники и математики, Москва, Россия.
E-mail: belov@amath.msk.ru, pm@miem.edu.ru

зрения такая замена будет оправдана, если она окажется применимой к атому с несколькими электронами.

Простейшей моделью такого атома является гелиеподобная система: два электрона в поле неподвижного центра. Соответствующая классическая система в этой ограниченной “заряженной” задаче трех тел является неинтегрируемой по Лиувиллю. Тем не менее и в случае неинтегрируемых гамильтоновых систем удастся получить информацию о спектре соответствующей квантовой задачи на основе развитого относительно недавно в работах [4]–[6] комплексного метода ВКБ (теории комплексного ростка Маслова). Геометрические объекты, пригодные для квантования в этой теории, – это инвариантные маломерные лагранжевы торы Λ^k ($0 \leq k < n$, n – размерность конфигурационного пространства системы), обладающие дополнительным свойством орбитальной устойчивости (в линейном приближении). Явное (в аналитической форме) построение таких объектов для классически неинтегрируемых систем даже в случае $k = 1$ (Λ^1 – замкнутая фазовая траектория) является отдельной весьма нетривиальной задачей классической механики.

Заметим, что для атома гелия эта задача, как и проблема квантования его замкнутых фазовых орбит, имеет длинную историю. Еще в 1921 году в работе Ленгмюра [7] были вычислены орбиты, отвечающие планарному коррелированному движению двух электронов (в плоскости $z = 0$ с общим угловым моментом $\mathbf{L} = 0$), и получены квазиклассические уровни энергии по формулам старой квантовой теории Бора.

В настоящее время в физической литературе периодические коррелированные движения электронов в атоме гелия – предмет интенсивного (в основном численного) исследования (см., например, [8]–[10] и цитированную там литературу). Это связано с тем, что такие типы движения при условии их классической (линейной) стабильности порождают дважды возбужденные (с главными квантовыми числами $n \sim 10$ и выше [11], [12]) *долгоживущие* состояния квантовой системы, несмотря на то что их энергия выше, чем энергия одноэлектронной ионизации атома [13], [14]. Такие состояния наблюдались в экспериментах по мультифотонному лазерному возбуждению гелиеподобных атомов [15], где они проявлялись в виде узких резонансов, энергия которых чрезвычайно близка к энергии двойной ионизации атома. Лишь сравнительно недавно [16] была доказана стабильность ленгмюровских орбит, а также найдена устойчивая конфигурация коррелированного коллинеарного движения электронов (с общим угловым моментом $\mathbf{L} = 0$), находящихся по одну сторону от ядра, – так называемая $Z^{2+}e^-e^-$ -конфигурация (“frozen planet configuration”) [17]. На основе эвристической полуклассической теории Гутцвиллера [18] в работах [17], [9], [19]–[21] были вычислены тройные (с тремя квантовыми числами) ридберговские серии уровней энергии дважды возбужденных состояний: симметричных ($\langle r_1 \rangle \sim \langle r_2 \rangle$) для ленгмюровских орбит и несимметричных ($\langle r_1 \rangle \sim \langle r_2 \rangle / 3$) для $Z^{2+}e^-e^-$ -конфигурации ($\langle r \rangle$ – радиальное среднее). Отметим, что именно последние состояния наблюдались в экспериментах по лазерному возбуждению атома бария [15].

В данной работе с помощью комплексного метода ВКБ получены аналитические эффективные формулы квазиклассических уровней энергии (спектральные серии) для

дважды возбужденных состояний¹⁾ гелиеподобных атомов, отвечающих новому типу коррелированного движения электронов (с общим орбитальным моментом $\mathbf{L} \neq 0$). Эти движения порождаются замкнутыми фазовыми траекториями – так называемыми относительными положениями равновесия (ОПР) соответствующей неинтегрируемой классической системы [22]. Они явно найдены в разделе 2 на основе известной процедуры редукции Марсдена–Вейнштейна [23].

В разделе 3 построены спектральные серии, качественно учитывающие как квадрупольный момент $\gamma \geq 0$ ядра атома, так и спиновые поправки, обусловленные спин-орбитальным и спин-спиновым взаимодействиями, и, как следствие, вычислены сверхтонкая и тонкая структуры квазиклассических уровней энергии скалярной квантовой задачи для гелиеподобных атомов. Заметим, что при $\gamma = 0$ соответствующие квазиклассические волновые функции с точки зрения классификации, принятой в [24], это состояния двух эквивалентных электронов с орбитальными квантовыми числами $l_1 = l_2 = l/2$, где l – “коллективное” орбитальное квантовое число.

В разделе 4 мы квантуем в квазиклассическом приближении ОПР гелиеподобной системы, помещенной в однородное магнитное поле B_0 (при $\gamma = 0$). Полученные формулы для зеемановского расщепления уровней энергии (как нормального, так и аномального с учетом диамагнетизма атома) справедливы для любых значений величины магнитного поля B_0 , и что существенно, включая промежуточную область полей $B_0 \sim 10^9$ Гс, возникающих на поверхности нейтронных звезд и белых карликов. Эта область наиболее трудна для анализа другими методами [25]–[27], поскольку кулоновское и магнитное взаимодействия в ней одного порядка. В этом же разделе рассмотрены предельные случаи слабого ($B_0 \sim 10^3$ Гс) и сверхсильного ($B_0 \sim 10^{11} \div 10^{13}$ Гс) магнитных полей и получены квазиклассические уровни энергии в виде разложения по степеням параметра, пропорционального полю B_0 (в случае слабых полей) и $B_0^{-1/2}$ (в случае сверхсильных полей). Последняя задача о поведении спектра гелиеподобных атомов в сверхсильном магнитном поле весьма актуальна в связи с недавними исследованиями мягкого рентгеновского излучения вращающихся пульсаров [28]–[30].

Подчеркнем еще раз, что нахождение ОПР является отдельной нетривиальной задачей в классической механике неинтегрируемых систем [22], [31]. Известно, что для систем с циклическими переменными ОПР определяются точками покоя эффективно-го гамильтониана на приведенном фазовом пространстве [22]. В более общем случае (когда циклических переменных нет или они явно не выделены) для гамильтоновых систем с непрерывной группой симметрий такие траектории могут быть получены с помощью известной классической процедуры редукции Марсдена–Вейнштейна [23]. В рассматриваемой ситуации классический гамильтониан гелиеподобной системы допускает непрерывные группы симметрий: группу $SO(2)$ при $B_0 \neq 0$ и группу $SO(3)$ при $B_0 = 0$. В этих случаях ОПР гамильтоновой системы отвечают коррелированные движения электронов по равновесным орбитам действия групп $SO(2)$ и $SO(3)$ с полным орбитальным моментом электронов $\mathbf{L} \neq 0$ – окружностям радиусов R_1 и R_2 , лежащим в плоскости $z = 0$.

¹⁾ По-видимому, эти возбужденные долгоживущие состояния, так же как и состояния, отвечающие устойчивым конфигурациям ленгмюровских и “frozen planet” орбит, могут быть обнаружены в экспериментах по лазерному возбуждению гелиеподобных атомов.

При отсутствии внешнего магнитного поля (диагональное гамильтоново действие группы $SO(3)$ на пространстве $\mathbb{R}^{12} = \mathbb{R}_\mathbf{p}^6 \times \mathbb{R}_\mathbf{q}^6$) процедура редукции позволила дать полную классификацию всех относительных положений равновесия гелиеподобной системы с учетом квадрупольного момента атома и исследовать их (орбитальную) устойчивость в широкой области параметров классической системы²⁾. Оказывается, что структура фазового пространства гелиеподобного атома, и в частности структура его ОПР, весьма чувствительна к малым возмущениям гамильтониана, связанным с квадрупольным моментом ядра γ , $\gamma \sim 10^{-25} \text{ см}^2$. Так, например, в случае $\gamma = 0$ у классической системы, состоящей из двух электронов в поле неподвижного центра, существует лишь единственное семейство симметричных ОПР, для которых радиусы орбит электронов R_1 и R_2 совпадают. При учете квадрупольного момента ядра ($\gamma > 0$) помимо этого симметричного ОПР в системе возникают еще два семейства несимметричных ОПР с энергией, близкой к энергии ионизации атома гелия (см. раздел 3), в каждом из которых радиусы равновесных орбит двух электронов различны ($R_1(\gamma) \neq R_2(\gamma)$).

Перейдем к точной постановке задачи. Рассмотрим следующую спектральную задачу:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= E\Psi, \quad \Psi \in \mathbb{L}_2(\mathbb{R}_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}^6) \times \mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^2, \\ \Psi &= {}^t(\Psi_1, \Psi_2), \quad \Psi_i = {}^t(\Psi_{i1}, \Psi_{i2}), \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (1)$$

с квантовым гамильтонианом Паули $\hat{H}$ вида [32]

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hbar \hat{H}_{s-f} + \hbar^2 \hat{H}_{s-s}, \\ \hat{H}_0 &= \frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar \nabla_{\mathbf{q}_1} + \frac{e_0}{c} \mathbf{A}_1 \right)^2 + \frac{1}{2m_e} \left(-i\hbar \nabla_{\mathbf{q}_2} + \frac{e_0}{c} \mathbf{A}_2 \right)^2 + V_\gamma(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \\ V_\gamma &= -\frac{Ze_0^2}{r_1} - \frac{Ze_0^2}{r_2} + \frac{e_0^2}{r_{12}} + e_0^2 \gamma \left(\frac{1}{r_1^3} + \frac{1}{r_2^3} \right), \quad \gamma \geq 0, \\ \hbar \hat{H}_{s-f} &= \frac{e_0 \hbar}{2m_e c} (\mathcal{H}_1 \sigma_1 + \mathcal{H}_2 \sigma_2) + \\ &+ \frac{e_0 \hbar}{4m_e^2 c^2} \left\{ \left[\mathcal{E}_1 \times (-i\hbar \nabla_{\mathbf{q}_1}) + \frac{2e_0}{r_{12}^3} \mathbf{r}_{12} \times (-i\hbar \nabla_{\mathbf{q}_2}) \right] \sigma_1 + \right. \\ &+ \left. \left[\mathcal{E}_2 \times (-i\hbar \nabla_{\mathbf{q}_2}) + \frac{2e_0}{r_{12}^3} \mathbf{r}_{21} \times (-i\hbar \nabla_{\mathbf{q}_1}) \right] \sigma_2 \right\}, \\ \hbar^2 \hat{H}_{s-s} &= \frac{e_0^2 \hbar^2}{4m_e^2 c^2} \frac{1}{r_{12}^3} \left[\sigma_1 \sigma_2 - \frac{3(\sigma_1 \mathbf{r}_{12})(\sigma_2 \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $V_\gamma(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$, $\mathbf{q}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1, 2$, есть потенциальная энергия кулоновского взаимодействия между двумя электронами ($e_0 = -e$, e , m_e – заряд и масса электрона) и неподвижным ядром гелиеподобного атома с зарядом Z , помещенным в начало координат; расстояния между электронами и ядром обозначены через r_i , $i = 1, 2$, между электронами – через r_{12} . Последнее слагаемое в V_γ при определенных условиях [24] описывает квадрупольное взаимодействие нуклонов ядра с электронами. В

²⁾Этот вспомогательный с точки зрения квазиклассических асимптотик квантовой задачи результат представляет, на наш взгляд, самостоятельный интерес для известной классической ограниченной “заряженной” задачи трех тел при исследовании структуры ее фазовых траекторий.

операторе взаимодействия спинов электронов с внешним однородным магнитным полем $\mathbf{A}_i = B_0(-y_i, x_i, 0)/2$, $B_0 = \text{const}$, $i = 1, 2$, матрицы Паули $\sigma_i = (\sigma_i^1, \sigma_i^2, \sigma_i^3)$ действуют на i -ю спинорную компоненту волновой функции Ψ , $\mathcal{E}_i = -\nabla_{\mathbf{q}_i} V_\gamma(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)/e_0$, $\mathcal{H}_i = \nabla_{\mathbf{q}_i} \times \mathbf{A}_i$, $\hbar^2 \hat{H}_{s-s}$ – оператор взаимодействия спиновых магнитных дипольных моментов электронов.

Комплексный метод ВКБ позволяет сопоставить квазиклассические ($\hbar \rightarrow 0$) серии собственных функций $\Psi_{\vec{n}, \xi}(\mathbf{q}, \hbar)$ и собственных значений $E_{\vec{n}, \xi}(\hbar)$ задачи (1), (2) – квазимод оператора $\hat{H}$, замкнутым фазовым траекториям Λ^1 соответствующей классически неинтегрируемой системы Гамильтона

$$\dot{\mathbf{p}} = -H_{\mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = H_{\mathbf{p}}, \quad (3)$$

$$(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathbb{R}_{\mathbf{p}}^6 \times \mathbb{R}_{\mathbf{q}}^6, \quad \mathbf{q} = {}^t(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \quad \mathbf{p} = {}^t(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2),$$

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2m_e c} \sum_{i=1}^2 \mathbf{p}_i^2 + V_\gamma(\mathbf{q}) + \frac{e_0 B_0}{2m_e} L_z + \frac{e_0^2 B_0^2}{8m_e c^2} (x_1^2 + y_1^2 + x_2^2 + y_2^2), \quad (4)$$

где L_z – проекция полного момента двух электронов $\mathbf{L} = \mathbf{q}_1 \times \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}_2 \times \mathbf{p}_2$ на направление магнитного поля (ось z). Здесь $\vec{n}$ – полный набор орбитальных квантовых чисел двух электронов: $\vec{n} = (\vec{n}_1, \vec{n}_2)$, $n_i \in \mathbb{Z}^3$, а ξ – спиновое квантовое число ($\xi = \pm 1, 0; 0$) – нумерует четыре спиновых состояния системы двух электронов, разделенных по значению полного спина S и его проекции m_s на ось z . А именно, значения $\xi = \pm 1, 0$ отвечают трем состояниям ($S = 1$, $m_s = \pm 1, 0$), а значение $\xi = 0$ – состоянию ($S = 0$, $m_s = 0$).

Напомним определение квазимод задачи (1), (2), отвечающих замкнутым фазовым траекториям Λ^1 классической системы (3), (4). Пусть фазовая траектория $\Lambda^1(E_0)$ принадлежит гладкому однопараметрическому семейству фазовых кривых $\Lambda^1(E)$ в $\mathbb{R}^{12}$, где параметр $E \in (E_1, E_2)$ – классическая энергия системы. Последовательность значений $E_{\vec{n}, \xi} = E_{\vec{n}, \xi}(\hbar)$ (где орбитальные квантовые числа $\vec{n}$, вообще говоря, могут зависеть от $\hbar$) и функций $\Psi_{E_{\vec{n}, \xi}(\hbar)}(\mathbf{q}, \hbar) \in L_2(\mathbb{R}_{\mathbf{q}}^6) \times \mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^2$, $\hbar \in (0, 1]$, называется квазиклассической спектральной серией (квазимодой квантового гамильтониана $\hat{H}$), отвечающей классической траектории $\Lambda^1(E_0)$, если выполнены следующие условия:

1) $\lim_{\hbar \rightarrow 0} E_{\vec{n}, \xi}(\hbar) = H(\mathbf{p}, \mathbf{q})|_{\Lambda^k(E_0)}$ (соответствие между квазиклассической спектральной серией $E_{\vec{n}, \xi}(\hbar)$ и классическим движением на уровне энергии E_0);

2) $\Psi_{E_{\vec{n}, \xi}(\hbar)}(\mathbf{q}, \hbar) = O(1)$ для почти всех³⁾ $\mathbf{q} \in \pi_{\mathbf{q}}(\Lambda^1(E_0))$, где $\pi_{\mathbf{q}}(\Lambda^1(E_0))$ – проекция $\Lambda^1(E_0)$ на конфигурационное пространство $\mathbb{R}_{\mathbf{q}}^6$ (соответствие между квазиклассической серией асимптотических собственных функций и $\Lambda^1(E_0)$);

3) $\|(\hat{H} - E_{\vec{n}, \xi}(\hbar))\Psi_{E_{\vec{n}, \xi}(\hbar)}(\mathbf{q}, \hbar)\|_{L_2(\mathbb{R}_{\mathbf{q}}^6) \times \mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^2} = O(\hbar^N)$, $N > 1$ (условие формальной асимптотики).

Опишем кратко, следуя работам [5], [6], структуру квазимод, возникающих при квазиклассическом квантовании методом комплексного ростка Маслова при отсутствии фокальных точек на Λ^1 : $|\dot{Q}| \neq 0$, семейства замкнутых фазовых траекторий классической системы $\Lambda^1(E) = \{\mathbf{p} = P(t), \mathbf{q} = Q(t)\}$, где $P(t)$, $Q(t)$ являются периодическими

³⁾Исключение составляют фокальные точки или точки, принадлежащие каустическим множествам.

функциями с периодом $T = T(E)$. В квазиклассическом приближении ($\hbar \rightarrow 0$) для задачи (1), (2) орбитальные ($\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$) и спиновые переменные могут быть разделены с точностью $O(\hbar^2)$. А именно, квазиклассические волновые функции матричного оператора $\hat{H}$ имеют следующую структуру:

$$\Psi_{\vec{n}, \xi}(\mathbf{q}, \hbar) = \Psi_{\vec{n}}(\mathbf{q}, \hbar) \mathbf{f}_{\xi}(\mathbf{q}),$$

а соответствующий квазиклассический спектр имеет вид

$$E_{\vec{n}, \xi}(\hbar) = E_{\vec{n}}(\hbar) + \hbar \mu_{\xi} + O(\hbar^2). \quad (5)$$

Здесь $(E_{\vec{n}}(\hbar), \Psi_{\vec{n}}(\mathbf{q}, \hbar))$ – квазимоды скалярного оператора Шредингера $\hat{H}_0$, отвечающие Λ^1 :

$$\hat{H}_0 \Psi_{\vec{n}}(\mathbf{q}, \hbar) = E_{\vec{n}}(\hbar) \Psi_{\vec{n}}(\mathbf{q}, \hbar) + O(\hbar^{\frac{3}{2}}), \quad \Psi_{\vec{n}}(\mathbf{q}, \hbar) \in \mathbb{L}_2(\mathbb{R}_{\mathbf{q}}^6), \quad (6)$$

где, так же как и в условии 3), под $O(\hbar^{3/2})$ понимается оценка невязки уравнения в среднем – по норме $\mathbb{L}_2$. Спиновые поправки к спектру μ_{ξ} и соответствующий спинор $\mathbf{f}_{\xi}(\mathbf{q})$ находятся как решения спектральной задачи для уравнения поляризации на фазовой кривой Λ^1 :

$$-i \frac{d}{dt} \mathbf{f}_{\xi} + \Pi|_{\Lambda^1} \mathbf{f}_{\xi} = \mu_{\xi} \mathbf{f}_{\xi}, \quad \mathbf{f}_{\xi}: \Lambda^1 \rightarrow \mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^2, \quad \mu_{\xi} \in \mathbb{R}. \quad (7)$$

Здесь $\mathbf{f}_{\xi} = \mathbf{f}_{\xi}(\mathbf{q} = Q(t))$ и d/dt есть дифференцирование вдоль траекторий классической системы (3), а матрица поляризации Π имеет вид (см., например, [6], [33])

$$\begin{aligned} \Pi = & \frac{e_0}{2m_e c} (\mathcal{H}_1 \sigma_1 + \mathcal{H}_2 \sigma_2) + \frac{e_0}{4m_e^2 c^2} \left\{ \left(\mathcal{E}_1 \times \mathbf{p}_1 + \frac{2e_0}{r_{12}^3} \mathbf{r}_{12} \times \mathbf{p}_2 \right) \sigma_1 + \right. \\ & \left. + \left(\mathcal{E}_2 \times \mathbf{p}_2 + \frac{2e_0}{r_{12}^3} \mathbf{r}_{21} \times \mathbf{p}_1 \right) \sigma_2 \right\} + \frac{e_0^2 \hbar}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r_{12}^3} \left\{ \sigma_1 \sigma_2 - \frac{3(\sigma_1 \mathbf{r}_{12})(\sigma_2 \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Параметр $\xi = \pm 1, 0$ нумерует четыре спиновых состояния системы двух электронов, разделенных по значению полного спина $\mathbf{s}$ и его проекции m_s на ось z . А именно, значения $\xi = \pm 1, 0$ отвечают трем состояниям ($\mathbf{s} = 1, m_s = \pm 1, 0$), а значение $\xi = 0$ – состоянию ($\mathbf{s} = 0, m_s = 0$).

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Используя стандартную технику [1], несложно показать, что в силу оценки 3 в определении квазимод асимптотические собственные значения $E_{\vec{n}, \xi}(\hbar)$ (5) отстоят от точных собственных значений E^{ex} задачи (1), (2) на величину порядка $O(\hbar^{3/2})$, т.е. существует значение E^{ex} такое, что $|E_{\vec{n}, \xi}(\hbar) - E^{\text{ex}}| \leq C \hbar^{3/2}$ ($C > 0$ – константа). При этом асимптотические собственные функции $\Psi_{\vec{n}, \xi}(\mathbf{q}, \hbar)$ близки к некоторой линейной комбинации точных собственных функций.

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Формальная процедура вычисления асимптотик по $\hbar$ ($\hbar \rightarrow 0$) подразумевает, что в рассматриваемой ситуации безразмерным параметром квазиклассических разложений является отношение длины волны де Бройля λ к характерным размерам системы R : $\lambda/R \sim 1/l$, где l – “коллективное” орбитальное квантовое число двух электронов. Другими двумя параметрами разложения здесь являются отношения $\sqrt{\nu_1/l}$ и

$\sqrt{\nu_2/l} \sim \sqrt{\hbar} \ll 1$, где ν_1, ν_2 – номера мод радиальных осцилляций электронов около их равновесной орбиты $\pi_q \Lambda^1(E)$, лежащей в плоскости $z = 0$.

Отметим, что результаты работы, касающиеся квазиклассического спектра скалярной задачи (6), носят полуэвристический характер. Мы не указываем асимптотических собственных функций, а приводим формулы лишь для части квазиклассического спектра задачи (6), соответствующего устойчивым в линейном приближении степеням свободы в окрестности Λ^1 , а именно, устойчивым малым радиальным колебаниям около равновесной орбиты $\pi_q \Lambda^1$. Отвечающие таким движениям Флоке решения системы в вариациях (линеаризации системы (3) в окрестности Λ^1) имеют нетривиальные мультипликаторы – собственные значения матрицы монодромии [34] $\lambda_{1,2} = e^{\pm i\beta_1}$ и $\lambda_{3,4} = e^{\pm i\beta_2}$, где $\beta_j \in \mathbb{R}$ и $\beta_j \neq 0 \pmod{2\pi}$. Остальные собственные значения λ_{i+4} , $i = 1, 2, 3, 4$ (кратности два) равны 1 (это связано с наличием у классической системы (3) четырех первых интегралов $H_0, \mathbf{L}_z, \mathbf{L}_x$ и $|\mathbf{L}|^2$, находящихся в инволюции на плоскости $\mathbf{L}_x = \mathbf{L}_y = 0$ ($\mathbf{L}_z \neq 0$), содержащей ОПР этой системы). Можно показать, что приведенная матрица монодромии [34] диагонализуема. Это означает, что комплексный росток r^6 над кривой Λ^1 является не единственным [35]. Здесь мы сталкиваемся с ситуацией, аналогичной той, которая изучалась для квантовой анизотропной задачи Кеплера [36] и трехмерного ангармонического осциллятора [37]. С точки зрения теории квазиклассических асимптотик эта резонансная ситуация приводит к асимптотическому вырождению спектра скалярной задачи (6) (в пределах точности $O(\hbar^{3/2})$). На основе результатов работ [36]–[38] это асимптотическое вырождение спектра в принципе можно снять в следующих порядках по $\hbar \rightarrow 0 \pmod{O^{5/2}}$, построив на кривой Λ^1 “нелинейный” росток, учитывающий как кубические, так и четвертые степени разложения функции Гамильтона H в окрестности Λ^1 по ростковым переменным. Решение такой задачи требует дополнительных конструкций и составляет тему отдельной работы.

2. РЕДУКЦИЯ ПО ДЕЙСТВИЮ ГРУППЫ $SO(3)$ И ПОСТРОЕНИЕ ИНВАРИАНТНОГО КОМПЛЕКСНОГО РОСТКА

При отсутствии внешнего магнитного поля ($B_0 = 0$) инвариантность гамильтониана $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ (4) относительно действия группы $G = SO(3)$ порождает диагональное действие G на евклидовом фазовом пространстве $\mathbb{R}_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}^{12} = \mathbb{R}_{\mathbf{p}}^6 \times \mathbb{R}_{\mathbf{q}}^6$ со стандартной симплектической структурой $\omega = dp \wedge dq$. Гамильтоново действие G на фазовом пространстве определяет отображение $\mathbb{R}^{12}$ в дуальное пространство алгебры Ли группы – отображение момента:

$$\mathcal{L}: \mathbb{R}^{12} \rightarrow g^* \approx \mathbb{R}^3, \quad \mathcal{L} = \mathbf{q}_1 \times \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}_2 \times \mathbf{p}_2.$$

Следуя [22], введем редуцированное (по диагональному действию группы G) фазовое пространство $B_L = M_L/G_L$, где $M_L = \mathcal{L}^{-1}(L)$, $L \in g^*$ – множество уровня отображения момента, $G_L = \{g \in G : \text{Ad}_g^* L = L, L \in g^*\} = SO(2)$ – стационарная подгруппа точки L относительно коприсоединенного представления G . Для описания структуры редуцированного фазового пространства рассмотрим алгебру Ли G_μ , состоящую из функций на $\mathbb{R}_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}^{12}$, находящихся в инволюции с компонентами отображения момента относительно стандартной скобки Пуассона. Реализуем эту алгебру с помощью следующего

набора координатных функций μ :

$$\mu = \left\{ \mu_1 = \frac{|\mathbf{p}_1|^2}{2}, \quad \mu_2 = \frac{|\mathbf{q}_1|^2}{2}, \quad \mu_3 = \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1 \rangle, \quad \mu_4 = \frac{|\mathbf{p}_2|^2}{2}, \quad \mu_5 = \frac{|\mathbf{q}_2|^2}{2}, \right. \\ \left. \mu_6 = \langle \mathbf{p}_2, \mathbf{q}_2 \rangle, \quad \mu_7 = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \rangle, \quad \mu_8 = \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \rangle, \quad \mu_9 = \langle \mathbf{p}_1, \mathbf{q}_2 \rangle, \quad \mu_{10} = \langle \mathbf{p}_2, \mathbf{q}_1 \rangle \right\}.$$

Скобка Ли–Пуассона на дуальном пространстве $g_\mu^* \approx \mathbb{R}_\mu^{10}$ ($\mu = (\mu_1, \dots, \mu_{10})$) – координаты на $\mathbb{R}_\mu^{10}$) алгебры Ли G_μ является вырожденной и имеет ранг 8. Соответствующие функции Казимира $I_l(\mu)$, $l = 1, 2$, этой алгебры вычисляются и имеют вид

$$I_1(\mu) = \mu_7\mu_8 - \mu_9\mu_{10} + 2\mu_1\mu_2 - \frac{\mu_3^2}{2} + 2\mu_4\mu_5 - \frac{\mu_6^2}{2}, \\ I_2(\mu) = \mu_1\mu_2(4\mu_4\mu_5 - \mu_6^2) - \mu_5\mu_6\mu_3^2 + \frac{\mu_3^2\mu_6^2}{4} - \mu_2\mu_5\mu_8^2 - \frac{\mu_3\mu_6\mu_7\mu_8}{2} - \mu_1\mu_4\mu_7^2 + \\ + \mu_2\mu_6\mu_8\mu_9 + \mu_3\mu_4\mu_7\mu_9 - \mu_2\mu_4\mu_9^2 + \mu_3\mu_5\mu_8\mu_{10} + \mu_1\mu_6\mu_7\mu_{10} - \\ - \frac{\mu_3\mu_6\mu_9\mu_{10}}{2} - \mu_1\mu_5\mu_{10}^2 + \left[\frac{\mu_7\mu_8}{2} - \frac{\mu_9\mu_{10}}{2} \right]^2.$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. Динамическая гамильтонова система на редуцированном фазовом пространстве B_L имеет вид

$$\frac{d\mu_i}{dt} = \{H_0, \mu_i\} = [\Psi(\mu)\nabla_\mu H_0]_i, \quad i = 1, \dots, 10, \quad (9)$$

$$I_1(\mu) = \frac{L^2}{2}, \quad L \in \mathbb{R}^+, \quad (10)$$

$$I_2(\mu) = 0, \quad (11)$$

где функция Гамильтона

$$H_0 = H_0(\mu) = \frac{1}{m}(\mu_1 + \mu_4) - \frac{Ze_0^2}{\sqrt{2\mu_2}} - \frac{Ze_0^2}{\sqrt{2\mu_5}} + \\ + \frac{e_0^2}{\sqrt{2(\mu_2 + \mu_5 - \mu_7)}} + e_0^2\gamma((2\mu_2)^{-\frac{3}{2}} + (2\mu_5)^{-\frac{3}{2}}),$$

а кососимметрическая (10×10) -матрица

$$\Psi(\mu) = \begin{pmatrix} 0 & \mu_3 & -2\mu_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_9 & 0 & \mu_8 \\ -\mu_3 & 0 & -2\mu_2 & 0 & 0 & 0 & -\mu_{10} & 0 & -\mu_7 & 0 \\ -2\mu_1 & 2\mu_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mu_8 & \mu_7 & -\mu_9 & \mu_{10} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu_6 & 2\mu_4 & 0 & \mu_{10} & \mu_8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu_6 & 0 & -2\mu_5 & -\mu_9 & 0 & 0 & -\mu_7 \\ 0 & 0 & 0 & -2\mu_4 & 2\mu_5 & 0 & -\mu_8 & \mu_7 & \mu_9 & -\mu_{10} \\ 0 & \mu_{10} & \mu_8 & 0 & \mu_9 & \mu_8 & 0 & \mu_3 + \mu_6 & 2\mu_1 & 2\mu_4 \\ -\mu_9 & 0 & -\mu_7 & -\mu_{10} & 0 & -\mu_7 & -\mu_3 - \mu_6 & 0 & -2\mu_5 & -2\mu_2 \\ 0 & \mu_7 & \mu_9 & -\mu_8 & 0 & -\mu_9 & -2\mu_4 & 2\mu_5 & 0 & \mu_6 - \mu_3 \\ -\mu_8 & 0 & -\mu_{10} & 0 & \mu_7 & \mu_{10} & -2\mu_4 & 2\mu_2 & \mu_3 - \mu_6 & 0 \end{pmatrix}.$$

Уравнение (9) есть уравнение Эйлера–Пуанкаре на $\mathbb{R}_\mu^{10}$, а формулы (10), (11) определяют однопараметрическое семейство $\Omega = \Omega(L)$, $L \in \mathbb{R}^+$, орбит коприсоединенного представления в $\mathbb{R}_\mu^{10}$. Каждая из орбит семейства инвариантна относительно пуассонова фазового потока $g_{H_0}^t: \mathbb{R}_\mu^{10} \rightarrow \mathbb{R}_\mu^{10}$ и является четырехмерным симплектическим многообразием с невырожденной замкнутой 2-формой Кириллова [39]

$$\omega_\Omega = \frac{1}{2} d\mu \wedge \Psi^{-1}(\mu) d\mu. \quad (12)$$

На орбите $\Omega(L)$ рассмотрим класс нульмерных подмногообразий $\Lambda^0 = \mu_0(L) \subset \Omega(L)$, аннулирующих форму (12) ($\omega_\Omega|_{\mu_0(L)} = 0$) – точки покоя уравнения (9),

$$\Psi(\mu_0(L)) \nabla_\mu H_0(\mu_0(L)) = 0.$$

Построим инвариантный комплексный росток в точке $\mu_0(L)$ – положительную лагранжеву плоскость $r(\mu_0(L))$ в комплексифицированном касательном пространстве ${}^{\mathbb{C}}T(\Omega)_{\mu_0(L)}$ ($\dim r(\mu_0(L)) = \dim \Omega/2 = 2$) (см. подробнее в [4], [5]). Хорошо известно [4], что необходимым и достаточным условием существования ростка является устойчивость точки покоя $\mu_0(L)$ в линейном приближении. А именно, все решения линеаризованного в окрестности $\mu_0(L)$ уравнения Эйлера–Пуанкаре

$$\frac{d\mathbf{e}}{dt} = \mathcal{H}_{\text{var}}(\mu)\mathbf{e}, \quad \mathbf{e}(t) \in \mathbb{C}^{10}, \quad (13)$$

ограничены при $t \in \mathbb{R}^1$. Здесь $\mathcal{H}_{\text{var}}(\mu)$ – постоянная матрица с элементами

$$(\mathcal{H}_{\text{var}}(\mu))_{js} = \left[\sum_{k=1}^{10} \left(\lambda_{jk}^s \frac{\partial H_0}{\partial \mu_k} + \Psi_{jk}(\mu) \frac{\partial^2 H_0}{\partial \mu_k \partial \mu_s} \right) \right]_{\mu_0(L)}, \quad (14)$$

$j, s = 1, \dots, 10$, а λ_{jk}^s – структурные константы алгебры Ли G_μ ($\{\mu_j, \mu_k\} = \sum_{s=1}^{10} \lambda_{jk}^s \mu_s$).

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Пусть точка покоя $\mu_0(L)$ устойчива в линейном приближении. Тогда ненулевые собственные значения матрицы $\mathcal{H}_{\text{var}}$ (14) (показатели Флоке) чисто мнимые и имеют вид $\pm i\beta_1(L)$, $\pm i\beta_2(L)$, $\beta_{1,2} \in \mathbb{R}^1$. Существуют два линейно независимых решения уравнения (13), $\mathbf{e}^1(t), \mathbf{e}^2(t) \in {}^{\mathbb{C}}T(\Omega)_{\mu_0(L)}$, $\mathbf{e}^j(t) = e^{i\beta_j t} \mathbf{e}^j(0)$, удовлетворяющих условиям

$$\omega_\Omega(\mathbf{e}^j(t), \mathbf{e}^k(t)) = 0, \quad \omega_\Omega(\mathbf{e}^j(t), \bar{\mathbf{e}}^k(t)) = 2i\delta_{jk}, \quad j, k = 1, 2.$$

Указанные решения $\mathbf{e}^j(t)$, $j = 1, 2$, образуют базис на инвариантном комплексном ростке $r(\mu_0(L))$.

Приведем теперь явные формулы для соответствующей замкнутой кривой Λ^1 в исходном фазовом пространстве $\mathbb{R}_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}^{12}$, используя стандартную процедуру реконструкции [23].

Обозначим через $\mu_0^\alpha(L)$, $\alpha = 1, 2, \dots, N$, $N = N(\gamma, L)$, точки покоя уравнения (9), лежащие на орбите $\Omega(L)$. ОПР – решения классической системы (3), отвечающие $\mu_0^\alpha(L)$, имеют вид

$$\Lambda_\gamma^\alpha(L) = \begin{cases} \mathbf{q}_1^\alpha = \begin{pmatrix} R_1^\alpha \cos \Omega^\alpha t \\ R_1^\alpha \sin \Omega^\alpha t \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{q}_2^\alpha = \begin{pmatrix} -R_2^\alpha \cos \Omega^\alpha t \\ -R_2^\alpha \sin \Omega^\alpha t \\ 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{p}_1^\alpha = \begin{pmatrix} -P_1^\alpha \sin \Omega^\alpha t \\ P_1^\alpha \cos \Omega^\alpha t \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{p}_2^\alpha = \begin{pmatrix} P_2^\alpha \sin \Omega^\alpha t \\ -P_2^\alpha \cos \Omega^\alpha t \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}, \quad (15)$$

$$\alpha = 1, \dots, N.$$

Фазовым траекториям $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$ отвечают орбиты коррелированного движения электронов по равновесным окружностям в плоскости, ортогональной вектору полного углового момента. Угловая частота движения электронов

$$\Omega^\alpha = \delta \frac{P_1^\alpha}{R_1^\alpha} = \delta \frac{P_2^\alpha}{R_2^\alpha}, \quad \delta = \frac{a_0}{p_0 t_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e_0^2}, \quad p_0 = \frac{m_e e_0^2}{\hbar}, \quad t_0 = \frac{\hbar^3}{m_e e_0^4},$$

а радиусы равновесных окружностей R_1^α, R_2^α и соответствующие импульсы электронов P_1^α, P_2^α определяются соотношениями:

а) при $\alpha = 1$ для симметричного ОПР Λ_γ^1 –

$$R_1^1 = R_2^1 = R^1 = a_0 \frac{\tilde{L}^2 + \sqrt{\tilde{L}^4 + 48\tilde{\gamma}(4Z - 1)}}{8Z - 2}, \quad (16)$$

$$P_1^1 = P_2^1 = P^1 = p_0 \left(\frac{(4Z - 1)a_0}{4R^1} - \frac{3\tilde{\gamma}a_0^3}{(R^1)^3} \right)^{\frac{1}{2}};$$

б) для ОПР $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$ при $\alpha > 1$ импульсы P_i^α и радиусы орбит R_i^α , $i = 1, 2$, электронов однозначно определяются через решения алгебраического уравнения относительно параметра $k \in \mathbb{R}^+$,

$$\begin{aligned} & -\frac{\tilde{L}^2}{\sqrt{3\tilde{\gamma}}} \frac{1+k}{k} \sqrt{\frac{k^4 + k^3 + k^2 + k + 1}{Zk^4 + 3Zk^3 + (4Z - 1)k^2 + 3Zk + Z}} - \\ & - 2k^7 - 2k^6 - k^5 + k^4 - k^3 + 1 + \\ & + \frac{1}{Zk^4 + 3Zk^3 + (4Z - 1)k^2 + 3Zk + Z} (k^4 + k^3 + k^2 + k + 1)(1 + k)^2 \times \\ & \times (Zk^2(1 - k^3) - Z(1 - k^3) + Zk^3(1 + k)^2 - k^3) = 0, \end{aligned} \quad (17)$$

$$R_1^\alpha = a_0 \frac{3\gamma(k^4 + k^3 + k^2 + k + 1)(1 + k)^2}{k^2 [Z(1 + k)^2(k^2 + k + 1) - k^2]}, \quad R_2^\alpha = kR_1^\alpha,$$

$$P_1^\alpha = p_0 \left[\frac{Za_0}{R_1^\alpha} - \frac{3\gamma a_0^3}{(R_1^\alpha)^3} - \frac{R_1^\alpha a_0^2}{(R_1^\alpha - R_2^\alpha)^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (18)$$

$$P_2^\alpha = p_0 \left[\frac{Za_0}{R_2^\alpha} - \frac{3\gamma a_0^3}{(R_2^\alpha)^3} - \frac{R_2^\alpha a_0^2}{(R_1^\alpha - R_2^\alpha)^2} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$\tilde{\gamma} = \frac{\gamma}{a_0^2}, \quad \tilde{L} = \frac{L}{a_0 p_0}.$$

Численный анализ показал, что в области параметров $\tilde{\gamma} > C\tilde{L}^4$, $C \approx 0.0629$ уравнение (17) имеет два решения $k_i \neq 1$, $i = 2, 3$, $k_i \in \mathbb{R}^+$. Отсюда следует полная классификация ОПР классической системы (3).

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Трактории $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$, $\alpha = 1, 2, 3$, определенные формулами (15)–(18), описывают все ОПР классической системы (3), причем:

а) в области параметров $\tilde{\gamma} > C\tilde{L}_4$, $C \approx 0.0629$ существуют три ОПР ($N(\gamma, L) = 3$), при этом $R_1^\alpha < R^1 < R_2^\alpha$, $\alpha = 2, 3$; соответствующие $\alpha = 2, 3$ ОПР будем называть несимметричными;

б) в области параметров $0 \leq \tilde{\gamma} \leq C\tilde{L}_4$ существует лишь одно симметричное ОПР $\Lambda_\gamma^1(L)$ ($N(\gamma, L) = 1$).

Нетривиальные показатели Флоке $\beta_{1,2}^\alpha$ матрицы (14) определяются формулами

$$\frac{\beta_1^\alpha}{2\pi} = \pm \sqrt{\frac{-d_1^\alpha b_1^\alpha - c_1^\alpha}{b_2^\alpha}}, \quad \frac{\beta_2^\alpha}{2\pi} = \pm \sqrt{\frac{d_2^\alpha b_2^\alpha - c_2^\alpha b_1^\alpha}{b_1^\alpha}}, \quad (19)$$

где

$$b_j^\alpha = \frac{3\tilde{\gamma}a_0^5}{(R_j^\alpha)^5} - \frac{Za_0^3}{(R_j^\alpha)^3} + (g^\alpha)^3, \quad c_j^\alpha = \frac{Z(R_j^\alpha)^2 a_0^3 - 9\tilde{\gamma}a_0^5}{(R_j^\alpha)^5} + d_j^\alpha + 2(g^\alpha)^3, \\ d_j^\alpha = -\frac{3R_j^\alpha}{a_0}(g^\alpha)^4, \quad g^\alpha = \frac{a_0}{R_1^\alpha + R_2^\alpha}, \quad j = 1, 2.$$

3. КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ СЕРИИ ОПЕРАТОРА ПАУЛИ В ОТСУТСТВИЕ ВНЕШНЕГО ПОЛЯ

3.1. Нерелятивистский гелиеподобный атом с квадрупольным моментом. Сверхтонкое расщепление. Здесь мы приведем явные формулы квазиклассических спектральных серий для задачи (1), (2), соответствующих ОПР (15). Следуя схеме квантования, описанной выше, найдем решения спектральных задач для скалярного оператора $\hat{H}_0$ (6) и уравнения поляризации (7). Используя эти результаты, мы затем получим ответ в исходной задаче.

Условие квантования для семейства точек покоя $\mu_0^\alpha(L)$ с комплексным ростком $r(\mu_0^\alpha(L))$ относительно $H_0 = H_0(\mu)$ в дуальном пространстве алгебры Ли G_μ [40] в исходном фазовом пространстве с учетом формул (15)–(18) имеет вид

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint_{\Lambda_\gamma^\alpha(L)} p dq = L_{l,\nu_1,\nu_2}^\alpha = l + \sum_{j=1}^2 \beta_j^\alpha(L, \gamma) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right), \quad (20) \\ l \in \mathbb{Z}, \quad \nu_j \in \mathbb{Z}^+, \quad \nu_j \ll l, \quad j = 1, 2.$$

Показатели Флоке $\beta_j^\alpha(L, \gamma)$ определены в (19). Заметим, что здесь орбитальное квантовое число $l = l(\hbar)$ есть большой параметр, $|l| \gg 1$. Он связан с параметром $\hbar$ ($\hbar \rightarrow 0$) условием $l(\hbar)\hbar \rightarrow L^{\text{cl}}$, где полный орбитальный момент двух частиц L^{cl} определяется по значению энергии E^{cl} классической системы соотношениями $E^{\text{cl}} = f^\alpha(L^{\text{cl}}, \gamma)$. Для семейства $\Lambda_\gamma^1(L)$ эта зависимость имеет вид

$$f^1(L^{\text{cl}}, \gamma) = -\frac{(4Z-1)e_0^2}{4R^1(L)} - \frac{e_0^2\gamma}{(R^1(L))^3}.$$

Для значений $\alpha = 2, 3$ на рисунке приведен лишь качественный характер зависимостей $f^\alpha(L^{\text{cl}}, \gamma)$ при фиксированных значениях параметров $\gamma = 10^{-25} \text{ см}^2$, $Z = 2$.

Условие квантования ОПР (20) определяет последовательность (квазиклассических) квантованных значений полного углового момента двух электронов $L^\alpha = L_{l, \nu_1, \nu_2}^\alpha(\hbar)$. Тогда квазиклассические уровни энергии скалярного оператора $\hat{H}_0$, отвечающие (в пределе $\hbar \rightarrow 0$) семейству замкнутых фазовых кривых $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$, $\alpha = 1, 2, 3$, определяются формулой

$$E^\alpha = E_{l, \nu_1, \nu_2}^\alpha(\hbar) = E_l^{\alpha(0)}(\hbar) + \hbar E_{l, \nu_1, \nu_2}^{\alpha(1)}(\hbar) + O(\hbar^2), \quad (21)$$

где $E_l^{\alpha(0)}$ – энергия электронов на равновесной орбите $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$,

$$E_l^{\alpha(0)} = f^\alpha(L^\alpha = l\hbar, \gamma),$$

а $\hbar E_{l, \nu_1, \nu_2}^{\alpha(1)}(\hbar)$ – энергия малых радиальных осцилляций электронов с частотами $\omega_j^\alpha(L, \gamma) = \Omega^\alpha \beta_j^\alpha(L, \gamma)/2\pi$ при $L = l\hbar$,

$$\hbar E_{l, \nu_1, \nu_2}^{\alpha(1)}(\hbar) = \hbar \sum_{j=1}^2 \omega_j^\alpha(L, \gamma) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right),$$

где $L = l\hbar$, $l \in \mathbb{Z}$, $\nu_j \in \mathbb{Z}^+$. Напомним, что при $\alpha = 1$ квазиклассическая спектральная серия (21) отвечает симметричному, а при $\alpha = 2, 3$ – несимметричному дважды возбужденному состоянию электронов.

Из полученных формул нетрудно найти сверхтонкое расщепление квазиклассических уровней энергии, отвечающих симметричным дважды возбужденным состояниям:

$$|E_{l, \nu_1, \nu_2}^0(\gamma) - E_{l, \nu_1, \nu_2}^0(0)| \sim \gamma.$$

Отметим, что несимметричные дважды возбужденные состояния, порожденные несимметричными ОПР классической системы (см п. “а” утверждения 3), существуют при реальных значениях $Z = 2$, $\gamma \sim 10^{-25} \text{ см}^2$ лишь в достаточно узкой области энергий $E_1 \leq -E \leq E_2$, $\Delta E = E_2 - E_1 \approx 3 \text{ эВ}$ вблизи основного уровня $E_0 = -24.58 \text{ эВ}$, $E_2 \approx 23 \text{ эВ}$ при значениях орбитального квантового числа $l \sim 10 \div 10^2$.

3.2. Тонкая структура уровней (спиновые поправки). Матрица поляризации для семейства $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$ при $\alpha = 1, 2, 3$ есть матрица с постоянными коэффициентами

$$\begin{aligned}\Pi|_{\Lambda_\gamma^\alpha(L)} &= \Pi_\alpha^{s-o} + \Pi_\alpha^{s-s}, \\ \Pi_\alpha^{s-o} &= C_1^\alpha \sigma_1^3 + C_2^\alpha \sigma_2^3, \\ \Pi_\alpha^{s-s} &= \hbar D^\alpha (\sigma_1^3 \sigma_2^3 - 2\sigma_1^1 \sigma_2^1 - 2\sigma_1^2 \sigma_2^2 - 3\sigma_1^2 \sigma_2^1 - 3\sigma_1^1 \sigma_2^2),\end{aligned}$$

где в части матрицы поляризации Π_α^{s-o} , отвечающей спин-орбитальному взаимодействию, константы C_i^α , $i = 1, 2$, имеют вид

$$\begin{aligned}C_1^\alpha &= C_1^\alpha(L, \gamma) = \frac{e_0^2}{4m_e^2 c^2} \left[\left(-\frac{Z}{(R_1^\alpha)^2} + \frac{1}{(R_1^\alpha + R_2^\alpha)^2} + \frac{3\gamma}{(R_1^\alpha)^4} \right) P_1^\alpha + \frac{2}{(R_1^\alpha + R_2^\alpha)^2} P_2^\alpha \right], \\ C_2^\alpha &= C_2^\alpha(L, \gamma) = \frac{e_0^2}{4m_e^2 c^2} \left[\left(-\frac{Z}{(R_2^\alpha)^2} + \frac{1}{(R_1^\alpha + R_2^\alpha)^2} + \frac{3\gamma}{(R_2^\alpha)^4} \right) P_2^\alpha + \frac{2}{(R_1^\alpha + R_2^\alpha)^2} P_1^\alpha \right],\end{aligned}$$

а в спин-спиновой части Π_α^{s-s} матрицы поляризации константа

$$D^\alpha = D^\alpha(L, \gamma) = \frac{e_0^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{(R_1^\alpha + R_2^\alpha)^3}.$$

В дальнейшем для сокращения обозначений индекс α в константах C_i^α , D^α опущен.

Поскольку оператор дифференцирования вдоль кривой $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{\Lambda_\gamma^\alpha(L)} = 2\Omega^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (\varphi = \varphi_1 = \varphi_2),$$

спектральная задача (7) принимает вид

$$\left(-2i\Omega^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi} + \Pi|_{\Lambda_\gamma^\alpha(L)} \right) \mathbf{f}_\xi = \mu_\xi \mathbf{f}_\xi, \quad \mathbf{f}_\xi(\varphi + 2\pi) = \mathbf{f}_\xi(\varphi), \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad \mathbf{f}(\xi) \in \mathbb{C}^4. \quad (22)$$

Ее решения определяются следующими формулами ($k \in \mathbb{Z}$):

$$\begin{aligned}\text{а) } \quad \xi = \pm 1 : \quad & \mathbf{f}_\xi(\varphi) = e^{ik\varphi} v_\xi, \quad \mu_{\pm 1} = 2\Omega^\alpha k \pm \sqrt{(C_1 + C_2)^2 + 36\hbar^2 D^2} + \hbar D, \\ & v_{+1} = {}^t(1, 0, 0, F(\hbar)), \quad v_{-1} = {}^t(F(\hbar), 0, 0, 1), \\ & F(\hbar) = \frac{-C_1 - C_2 - \sqrt{(C_1 + C_2)^2 + 36\hbar^2 D^2}}{6\hbar D i}; \\ \text{б) } \quad \xi = 0 : \quad & \mathbf{f}_\xi^{(m)}(\varphi) = e^{ik\varphi} v_0^{(m)}, \\ & \mu_0^{(m)} = 2\Omega^\alpha k - (-1)^m \sqrt{(C_1 - C_2)^2 + 16\hbar^2 D^2} - \hbar D,\end{aligned}$$

где $m = 1, 2$ – номер вырожденного собственного значения $\xi = 0$ спектральной задачи (22), отвечающего нулевому значению проекции спина электронов на ось z : $m_s = 0$ с полным спином $S = 1$ для $m = 1$ и $S = 0$ для $m = 2$, соответственно,

$$\begin{aligned}v_0^{(1)} &= {}^t(0, -1, G(\hbar), 0), \quad v_0^{(2)} = {}^t(0, G(\hbar), 1, 0), \\ G(\hbar) &= \frac{C_2 - C_1 + \sqrt{(C_1 - C_2)^2 + 16\hbar^2 D^2}}{4\hbar D}.\end{aligned}$$

Без потери общности можно положить здесь $k = 0$, так как случай $k \neq 0$ приводит лишь к перенумерации квазиклассических уровней энергии (21) скалярной задачи в силу равенства $f^\alpha(l\hbar, \gamma) + 2\hbar\Omega^\alpha k + O(\hbar^2) = f^\alpha((l+k)\hbar, \gamma)$. Из этих формул нетрудно получить с точностью до $O(\hbar^3)$ спиновые поправки $\Delta E = \Delta E^{\text{s-o}} + \Delta E^{\text{s-s}} = \hbar\mu_\xi$ к квазиклассическим уровням энергии E^α ($\alpha = 1, 2, 3$) (21), где $\Delta E^{\text{s-o}}$ – энергия спин-орбитального взаимодействия, а $\Delta E^{\text{s-s}}$ – энергия взаимодействия спинов 2-х электронов:

$$\begin{aligned} \text{а) } \xi = \pm 1, \quad \alpha = 1, 2, 3: \quad & \Delta E^{\text{s-o}} = \xi\hbar(C_1 + C_2), \quad \Delta E^{\text{s-s}} = \hbar^2 D; \\ \text{б) } \xi = 0, \quad \alpha = 2, 3: \quad & \Delta E^{\text{s-o}(m)} = (-1)^m \hbar(C_2 - C_1), \quad \Delta E^{\text{s-s}(m)} = \hbar^2 D, \\ \text{в) } \xi = 0, \quad \alpha = 1: \quad & \Delta E^{\text{s-o}(m)} = 0, \quad \Delta E^{\text{s-s}(m)} = \Xi^{(m)} \hbar^2 D, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\Xi^{(1)} = 3, \quad \Xi^{(2)} = -5.$$

Тогда квазиклассические спектральные серии для исходной задачи (1), (2), отвечающие $\Lambda_\gamma^\alpha(L)$, имеют вид

$$\begin{aligned} E_{l, \nu_1, \nu_2, \pm 1}^\alpha(\hbar) &= f^\alpha(l\hbar, \gamma) + \hbar \left[\sum_{j=1}^2 \omega_j^\alpha(l\hbar, \gamma) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right) \pm (C_1 + C_2) \right] + \hbar^2 D + O(\hbar^3), \\ E_{l, \nu_1, \nu_2, 0}^{\alpha(m)}(\hbar) &= f^\alpha(l\hbar, \gamma) + \hbar \left[\sum_{j=1}^2 \omega_j^\alpha(l\hbar, \gamma) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right) - \right. \\ &\quad \left. - (-1)^m (C_1 - C_2) \right] - \hbar^2 D + O(\hbar^3), \quad \alpha = 2, 3, \quad m = 1, 2, \\ E_{l, \nu_1, \nu_2, 0}^{\alpha(m)}(\hbar) &= f^\alpha(l\hbar, \gamma) + \hbar \left[\sum_{j=1}^2 \omega_j^\alpha(l\hbar, \gamma) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right) \right] + \\ &\quad + \Xi^{(m)} \hbar^2 D + O(\hbar^3), \quad \alpha = 1, \quad m = 1, 2. \end{aligned}$$

Из полученных формул найдем тонкую структуру квазиклассических уровней (21) энергии гелиеподобного атома в симметричном ($\alpha = 1$) и несимметричных ($\alpha = 2, 3$) дважды возбужденных квазиклассических состояниях. В частности, из (23) для симметричных дважды возбужденных состояний при $\gamma = 0$ получаем формулу тонкого расщепления $\Delta E^{\text{s-o}}$ квазиклассических уровней (21), связанного со спин-орбитальным взаимодействием (в ридберговских единицах) в следующем виде:

$$\Delta E_{l, \nu_1, \nu_2, \xi}^{\text{s-o}} = \xi \frac{\alpha^2}{32} \frac{(3 - 4Z)(4Z - 1)^3}{l^5},$$

где α – постоянная тонкой структуры ($\alpha = e_0^2/\hbar c$), $\xi = \pm 1$, $l \gg 1$. Эта квазиклассическая формула по порядку величины расщепления совпадает с известным результатом [32] (см. формулу (40.6) в этой книге), где методом теории возмущений получено тонкое расщепление для гелиеподобного иона с произвольным Z , когда по крайней мере один внешний электрон находится в сильно возбужденном состоянии. Отличие состоит в несколько иной зависимости величины расщепления от заряда ядра Z .

Для этих же состояний величина расщепления, связанная со спин-спиновым взаимодействием электронов (в ридберговских единицах) имеет вид

$$\Delta E_{l,\nu_1,\nu_2,\xi}^{s-s} = S(\xi) \frac{\alpha^2}{16} \frac{(4Z-1)^3}{l^6},$$

$$\xi = \pm 1, 0, \quad S(\pm 1) = 1, \quad S(0) = 3 \quad \text{при } m = 1, \quad S(0) = -5 \quad \text{при } m = 2.$$

4. КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ СЕРИИ ОПЕРАТОРА ПАУЛИ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Вычислим спектральные серии гамильтониана $\hat{H}$ (2), когда внешнее однородное магнитное поле $B_0 \neq 0$ (без учета квадрупольного момента ядра атома гелия, $\gamma = 0$). В этом случае процедура редукции по диагональному действию группы $SO(2)$ на пространстве $\mathbb{R}_{\mathbf{x},\mathbf{y}}^4 \times \mathbb{R}_{\mathbf{p}_x,\mathbf{p}_y}^4 \times \{z_1 = z_2 = p_{z_1} = p_{z_2} = 0\}$ аналогична общей схеме редукции, описанной в разделе 2, и приводит к следующему результату. Существует лишь единственное симметричное ОНР $\Lambda_B(L)$, определяемое формулой (15), в которой частота движения электронов

$$\Omega^\alpha = \Omega = \frac{1}{t_0} \left(\frac{P}{R} \frac{a_0}{p_0} + \frac{\tilde{B}_0}{2} \right),$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e_0^2}, \quad p_0 = \frac{m_e e_0^2}{\hbar}, \quad t_0 = \frac{\hbar^3}{m_e e_0^4}, \quad \tilde{B}_0 = \frac{B_0 e_0 a_0^2}{\hbar},$$

импульс электронов на равновесной орбите

$$P_1^\alpha = P_2^\alpha = P = \sqrt{\frac{(4Z-1)a_0^3 + \tilde{B}_0^2 R^3}{4R a_0^2}} p_0,$$

а радиус равновесной окружности $R_1^\alpha = R_2^\alpha = R$ определяется из алгебраического уравнения

$$\frac{B_0^2 e_0^2 R^4}{c^2} + m_e e_0^2 R(4Z-1) - L^2 = 0, \quad L > 0. \quad (24)$$

Условие квантования ОНР $\Lambda_B(L)$, так же как и в случае $B_0 = 0$, $\gamma \neq 0$, имеет вид (20). Квазиклассические уровни энергии скалярного оператора $\hat{H}_0$, отвечающие (в пределе $\hbar \rightarrow 0$) семейству замкнутых фазовых кривых $\Lambda_B(L)$, определяются формулой

$$E = E_{l,\nu_1,\nu_2}(\hbar) = E_l^{(0)}(\hbar) + \hbar E_{l,\nu_1,\nu_2}^{(1)}(\hbar) + O(\hbar^2), \quad (25)$$

где $E_l^{(0)}$ – энергия электронов на равновесной орбите $\Lambda_B(L)$,

$$E_l^{(0)} = f(L = l\hbar) = -\frac{(4Z-1)e_0^2}{4R} + \frac{e_0 B_0 L}{2m_e} + \frac{e_0^2 B_0^2 R^2}{2m_e},$$

а $\hbar E_{l,\nu_1,\nu_2}^{(1)}(\hbar)$ – энергия малых радиальных осцилляций электронов с частотами $\omega_j(L) = \Omega \beta_j(L, 0)/2\pi$ при $L = l\hbar$ (показатели Флоке $\beta_j(L, 0) = \beta_j(R(L), 0)$ определены в (19) при $\gamma = 0$),

$$\hbar E_{l,\nu_1,\nu_2}^{(1)}(\hbar) = \hbar \sum_{j=1}^2 \omega_j(l\hbar) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right), \quad \nu_j \in \mathbb{Z}^+.$$

Матрица поляризации для семейства $\Lambda_B(L)$ есть матрица с постоянными коэффициентами следующего вида:

$$\Pi|_{\Lambda_B(L)} = C(\sigma_1^3 + \sigma_2^3) + \hbar D(\sigma_1^3 \sigma_2^3 - 2\sigma_1^1 \sigma_2^1 - 2\sigma_1^2 \sigma_2^2 - 3\sigma_1^2 \sigma_2^1 - 3\sigma_1^1 \sigma_2^2),$$

здесь

$$C = C(L) = \frac{e_0}{m_e c} B_0 + \frac{e_0^2}{2m_e^2 c^2} \frac{3 - 4Z}{4R^2} P,$$

$$D = D(L) = \frac{e_0^2}{16m_e^2 c^2} \frac{1}{R^3}.$$

Решения соответствующей спектральной задачи (7) для спинора $\mathbf{f}_\xi$ определяются формулами:

$$\begin{aligned} \text{а) } \quad \xi = \pm 1 : \quad & \mathbf{f}_\xi(\varphi) = e^{ik\varphi} v_\xi, \quad \mu_{\pm 1} = 2\Omega k \pm \sqrt{4C^2 + 36\hbar^2 D^2} + \hbar D, \\ & v_{+1} = {}^t(1, 0, 0, F(\hbar)), \quad v_{-1} = {}^t(F(\hbar), 0, 0, 1), \\ & F(\hbar) = \frac{-2C - \sqrt{4C^2 + 36\hbar^2 D^2}}{6\hbar D i}; \\ \text{б) } \quad \xi = 0 : \quad & \mathbf{f}_\xi^{(m)}(\varphi) = e^{ik\varphi} v_0^{(m)}, \quad \mu_\xi^{(m)} = 2\Omega^\alpha k + \Xi^{(m)} \hbar^2 D + O(\hbar^3), \end{aligned} \quad (26)$$

где $m = 1, 2$ – номер вырожденного собственного значения $\xi = 0$ спектральной задачи, отвечающего значению спинового квантового числа $m_s = 0$ с полным спином $S = 1$ и $S = 0$, соответственно,

$$v_0^{(1)} = {}^t(0, -1, 1, 0), \quad v_0^{(2)} = {}^t(0, 1, 1, 0), \quad \Xi^{(1)} = 3, \quad \Xi^{(2)} = -5, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

В п. б, так же, как в п. 3.2, можно положить $k = 0$. Тогда спиновые поправки $\Delta E = \Delta E^{s-o} + \Delta E^{s-f} + \Delta E^{s-s} = \hbar \mu_\xi$ к квазиклассическим уровням энергии (25) с точностью $O(\hbar^3)$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \text{а) } \quad \xi = \pm 1 : \quad & \Delta E^{s-o} + \Delta E^{s-f} = 2\xi \hbar C, \quad \Delta E^{s-s} = \hbar^2 D; \\ \text{б) } \quad \xi = 0 : \quad & \Delta E^{s-o(m)} + \Delta E^{s-f(m)} = 0, \quad \Delta E^{s-s(m)} = \Xi^{(m)} \hbar^2 D, \\ & \Xi^{(1)} = 3, \quad \Xi^{(2)} = -5. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $m = 1, 2$; ΔE^{s-o} – энергия спин-орбитального взаимодействия, ΔE^{s-f} – энергия взаимодействия внешнего магнитного поля со спинами электронов, а ΔE^{s-s} – энергия спин-спинового взаимодействия двух электронов.

Тогда квазиклассические спектральные серии исходной задачи (1), (2), порожденные семейством $\Lambda_B(L)$, задаются формулами

$$E_{l, \nu_1, \nu_2, \pm 1}(\hbar) = f(l\hbar) + \hbar \left[\sum_{j=1}^2 \omega_j(l\hbar) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right) \pm 2C \right] + \hbar^2 D + O(\hbar^3),$$

$$E_{l, \nu_1, \nu_2, 0}^{(m)}(\hbar) = f(l\hbar) + \hbar \sum_{j=1}^2 \omega_j(l\hbar) \left(\nu_j + \frac{1}{2} \right) + \Xi^{(m)} \hbar^2 D + O(\hbar^3).$$

Полученные формулы позволяют вычислить расщепление квазиклассических уровней энергии гелиеподобного иона с произвольным зарядом ядра Z под влиянием внешнего магнитного поля – эффект Зеемана с учетом диамагнетизма атома (нормальный эффект Зеемана – расщепление уровней δE^{o-f} в результате взаимодействия поля с орбитальным магнитным моментом электронов и аномальный эффект Зеемана – расщепление уровней δE^{s-f} за счет взаимодействия поля со спинами электронов) *при любом* значении напряженности поля B_0 , включая промежуточные поля $B_0 \sim 10^9$ Гс. Именно эта область полей (в которой кулоновское и магнитное взаимодействия одного порядка) наиболее трудна для получения аналитических результатов, в частности, методами теории возмущений (см., например, работу [27], (и имеющуюся в ней библиографию), в которой для полей в промежуточной области дан численный расчет нормального зеемановского расщепления на основе модификации метода Хартри–Фока с помощью B -сплайн функций). В нашем случае получение численных значений зеемановского расщепления $\delta E = \delta E^{o-f} + \delta E^{s-f}$ сводится к численному решению лишь одного алгебраического уравнения (24). Ниже в пп. 4.1, 4.2 получены явные (аналитические) формулы зеемановского расщепления в предельных случаях слабого ($B_0 \rightarrow 0$) и сильного ($B_0 \rightarrow \infty$) магнитных полей.

4.1. Эффект Зеемана в приближении слабого поля. По аналогии с одночастичной задачей для атома водорода в магнитном поле [33] введем ларморовский радиус $a_H = (c\hbar/e_0 B_0)^{1/2}$ и определим слабое магнитное поле в терминах отношения $(a_0/a_H)^4 = \varepsilon_w$, где $a_0 = \hbar^2/(m_e e_0^2)$ – боровский радиус электрона. Параметр $\varepsilon_w = \varepsilon_w/(4Z-1)^3$ эффективно мал для значений B_0 вплоть до 10^3 Гс. В этом случае найдем приближенное значение радиуса R из уравнения (24) при $\varepsilon_w \rightarrow 0$, полагая $L = l\hbar$, $l \neq 0$. Реальным параметром разложения в этом случае является параметр

$$q_w = \varepsilon_w l^6 = \left(\frac{l^3 B_0 \hbar^3}{cm_e^2 e_0^3} \right)^2 (4Z-1)^{-3} \ll 1,$$

тогда

$$R(L = l\hbar) = \frac{\hbar^2}{m_e e_0^2} l^2 \sum_{j=0}^{\infty} r_j^w q_w^j. \quad (28)$$

В частности, $r_0^w = 1$, $r_1^w = -1$. После подстановки (28) в (25) мы получим квазиклассические уровни энергии *оператора Шредингера в магнитном поле* $\hat{H}_0$ (2), отвечающие замкнутой фазовой кривой $\Lambda_B(L)$, в приближении слабого магнитного поля ($B_0 \rightarrow 0$) в виде асимптотического разложения по степеням параметра $q_w \ll 1$,

$$E_{l,\nu_1,\nu_2}(\hbar) = \frac{\hbar\omega_0}{l^2} (4Z-1)^2 \left[-\frac{1}{4} + \left(\nu_1 + \frac{1}{2} \right) (4|l|)^{-1} + \left(\nu_2 + \frac{1}{2} \right) (4|l|)^{-1} \right] + \frac{\omega_B \hbar l}{2} + \frac{\hbar\omega_0}{l^2} (4Z-1)^2 \sum_{j=1}^{\infty} C_j^w(\nu_1, \nu_2, l) q_w^j + O(\hbar^2), \quad (29)$$

где $\omega_0 = m_e e_0^4 / \hbar^3$ – частота движения электрона по боровской орбите в атоме водорода, а циклотронная частота $\omega_B = e_0 B_0 / m_e c$. В частности, первый коэффициент разложения имеет вид

$$C_1^w = -\frac{1}{4} - 5 \left(\nu_1 + \frac{1}{2} \right) (8|l|)^{-1} - 3 \left(\nu_2 + \frac{1}{2} \right) (8|l|)^{-1}.$$

Формула (29), во-первых, дает при $B_0 = 0$ квазиклассические уровни энергии гелиеподобного иона с произвольным зарядом ядра Z – спектральную серию, отвечающую в пределе $\hbar \rightarrow 0$ коррелированному движению двух электронов по равновесной окружности радиуса $R_0 = \hbar^2 l^2 / (m_e e_0^2)$, $\hbar l \sim 1$, в плоскости $z = 0$. С точностью до $O(\hbar^2) = O((\nu/l)^2)$, $\nu/l \ll 1$, где $\nu = \max(\nu_1, \nu_2)$, эти уровни можно представить в виде тройной ридберговской серии

$$E_N(h) = -\frac{\hbar\omega_0(4Z-1)^2}{N^2} \quad (30)$$

с “главным” квантовым числом $N = 2|l| + \nu_1 + \nu_2 + 1$. И, во-вторых, – расщепление этих уровней в слабом магнитном поле B_0 (нормальный эффект Зеемана с учетом диамагнетизма атома) с любой степенью точности по четным степеням B_0 . В частности, с точностью до $O(B_0^4)$, $B_0 \rightarrow 0$, это расщепление определяется формулой

$$\delta E^{\text{o-f}} = \frac{\omega_B \hbar l}{2} + \frac{\hbar\omega_0}{l^2} (4Z-1)^2 C_1^w q_w.$$

Подставляя разложение для радиуса (28) в (27), получим формулу для спиновых поправок в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Delta E^{\text{s-o}} + \Delta E^{\text{s-f}} &= \xi \hbar \omega_B + \frac{\xi}{32} \frac{m_e e_0^8}{\hbar^4 l^5 c^2} (3-4Z)(4Z-1)^2 \times \\ &\times \left[(4Z-1) + \left(6Z - \frac{3}{2} \right) q_w + O(q_w^2) \right]. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что расщепление квазиклассических уровней энергии гелиеподобного иона с произвольным зарядом ядра Z , обусловленное взаимодействием спинов электронов со слабым магнитным полем (аномальный эффект Зеемана с учетом диамагнетизма атома), имеет вид

$$\delta E^{\text{s-f}} = \xi \frac{e_0 \hbar}{m_e c} B_0 + \delta E_{\text{diam}}^{\text{s-f}},$$

где расщепление $\delta E_{\text{diam}}^{\text{s-f}}$ (в ридберговских единицах)

$$\delta E_{\text{diam}}^{\text{s-f}} = \frac{\xi}{32} \frac{\alpha^2}{l^5} (3-4Z)(4Z-1)^2 \left(6Z - \frac{3}{2} \right) q_w + O(q_w^2), \quad \alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c}, \quad \xi = \pm 1.$$

4.2. Эффект Зеемана в приближении сильного поля. Рассмотрим сильное магнитное поле такое, что боровский радиус $a_0 = \hbar^2 / m_e e_0^2$ много больше ларморовского радиуса $a_H = (\hbar / e_0 B_0)^{1/2}$. Условие $a_H \ll a_0$ эффективно выполняется для полей начиная с $B_0 \sim 4.7 \times 10^9$ Гс. Параметром разложения в этом случае является параметр q_s ,

$$q_s = \left(\frac{m_e^2 c e_0^3}{16 B_0} \right)^{\frac{1}{2}} (4Z-1) (|l| \hbar)^{-\frac{3}{2}} \ll 1,$$

тогда

$$R(L = l\hbar) = \left(\frac{c\hbar|l|}{e_0 B_0} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{j=0}^{\infty} r_j^s q_s^j. \quad (31)$$

В частности, $r_0^w = 1$, $r_1^w = -1/4$. После подстановки (31) в (25) получим квазиклассические уровни энергии оператора Шредингера в магнитном поле $\widehat{H}_0$, отвечающие замкнутой фазовой кривой $\Lambda_B(L)$, в приближении сильного магнитного поля ($B_0 \rightarrow \infty$) в виде разложения по степеням q_s :

$$E_{l,\nu_1,\nu_2}(\hbar) = \hbar\omega_B \sum_{j=0}^{\infty} C_j^s(\nu_1, \nu_2, l) q_s^{\frac{j}{2}} + O(\hbar^2).$$

Первые два коэффициента разложения имеют вид

$$C_0^s = \nu_1 + \nu_2 + 1 + 2|l|, \quad C_1^s = \frac{1}{4}(\nu_1 + \nu_2 + 1).$$

Подставляя разложение для радиуса (31) в (27), получим приближенную с точностью до $O(1/B_0)$, $B_0 \rightarrow \infty$, формулу для “аномального” расщепления уровней энергии в следующем виде ($\xi = \pm 1$):

$$\Delta E^{s-f} = \xi \hbar\omega_B + \frac{\xi}{32} \frac{e_0^{\frac{5}{2}} B_0^{\frac{1}{2}} l}{\sqrt{2m_e^2 c^5 \hbar |l|^3}} (3 - 4Z) \left[(4Z - 1) + \left(\frac{3Z}{2} - \frac{3}{8} \right) q_w \right].$$

Благодарности. Авторы выражают искреннюю благодарность И. В. Тютину за полезное обсуждение результатов работы.

Список литературы

- [1] В. П. Маслов. Теория возмущений и асимптотические методы. М.: МГУ, 1965.
- [2] В. П. Маслов, М. В. Федорюк. Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976.
- [3] Ж. Лере. Лагранжев анализ и квантовая механика. Математическая структура, связанная с асимптотическими разложениями и индексом Маслова. М.: Мир, 1981.
- [4] В. П. Маслов. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. М.: Наука, 1977.
- [5] В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов. ДАН СССР, сер. Математика. 1988. Т. 298. № 5. С. 1037.
- [6] В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов. ТМФ. 1992. Т. 92. С. 215.
- [7] I. Langmuir. Phys. Rev. 1921. V. 17. P. 339.
- [8] U. Fano. Rep. Prog. Phys. 1983. V. 46. P. 97.
- [9] D. Wintgen, A. Bürgers, K. Richter, G. Tanner. Prog. Theor. Phys. Suppl. 1994. V. 116. P. 121.
- [10] J. A. West, Z. D. Gaeta, C. R. Stroud, Jr. Phys. Rev. A. 1998. V. 58. № 1. P. 186.
- [11] J. Müller, J. Burgdörfer. Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. № 16. P. 2375.
- [12] J. Müller, X. Yang, J. Burgdörfer. Phys. Rev. A. 1994. V. 49. № 4. P. 2470.
- [13] K. Richter, D. Wintgen. Phys. Rev. Lett. 1995. V. 65. № 15. P. 167.
- [14] F. Benvenuto, G. Casati, D. L. Shepelyansky. Phys. Rev. A. 1996. V. 53. P. 737.
- [15] U. Eichmann, V. Lange, W. Sandner. Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 274; 1992. V. 68. P. 21.
- [16] K. Richter, D. Wintgen. J. Phys. B. 1990. V. 23. P. L197.
- [17] K. Richter, D. Wintgen. J. Phys. B. 1991. V. 24. P. L565.
- [18] M. C. Gutzwiller. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. N.Y.: Springer, 1990.
- [19] A. Bürgers, D. Wintgen. J. Phys. B. 1994. V. 27. P. L131.
- [20] J. Müller, J. Burgdörfer, D. Noid. Phys. Rev. A. 1992. V. 45. № 3. P. 1471.
- [21] P. Gaspard, S. A. Rice. Phys. Rev. A. 1993. V. 48. № 1. P. 54.
- [22] В. И. Арнольд. Математические методы классической механики. М.: Наука, 1983.

- [23] *J. E. Marsden, A. Weinstein.* Rep. Math. Phys. 1974. V. 5. P. 121.
- [24] *И. И. Соболевман.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1968.
- [25] *J. Trümper, W. Pietsch, C. Reppin, W. Voges, R. Staubert, E. Kendziorra.* Astrophys. J. 1978. V. 219. P. L105.
- [26] *R. J. Elliott, R. Loudon.* J. Phys. Chem. Solids. 1960. V. 15. P. 196.
- [27] *H. Qiao, B. Li.* Phys. Rev. A. 1999. V. 60. № 4. P. 3134.
- [28] *H. Ögelman.* The Lives of the Neutron Stars. NATO Adv. Stud. Inst. Ser. C: Math. Phys. Sci. V. 450. Eds. M. A. Alpar, Ü. Kiziloglu, J. van Paradijs. Dordrecht: Kluwer, 1995.
- [29] *W. Becker, J. Trümper.* Astron. Astrophys. 1997. V. 326. P. 682.
- [30] *V. G. Bezchastnov, G. G. Pavlov, J. Ventura.* Phys. Rev. A. 1998. V. 58. № 1. P. 180.
- [31] *А. В. Каранетян.* Устойчивость стационарных движений. М.: Эдиториал УРСС, 1998.
- [32] *Г. Бете, Э. Солнтер.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, 1969.
- [33] *V. V. Belov, V. M. Olivè, J. L. Volkova.* J. Phys. A. 1995. V. 28. P. 5799; P. 5811.
- [34] *В. В. Козлов.* Симметрии, топология и резонансы в гамильтоновой механике. Ижевск: Изд-во УГУ, 1995.
- [35] *B. Valiño, S. Yu. Dobrokhotov, N. N. Nekhoroshev.* УМН. 1984. Т. 39. № 3. С. 233.
- [36] *S. Yu. Dobrokhotov, A. I. Shafarevich.* Russ. J. Math. Phys. 1998. V. 5. № 2. P. 267.
- [37] *S. Yu. Dobrokhotov, V. M. Olivè, A. I. Shafarevich.* Russ. J. Math. Phys. 1997. V. 3. № 1. P. 133.
- [38] *В. В. Белов, О. С. Доброхотов, С. Ю. Доброхотов.* Матем. заметки. 2001. Т. 69. № 4. С. 483.
- [39] *А. А. Кириллов.* Элементы теории представлений. М.: Наука, 1979.
- [40] *Ю. М. Воробьев.* Квазиклассическое квантование изотропных подмногообразий в некоторых многочастичных задачах. Дисс. на соискание уч. степени канд. физ.-матем. наук. М.: МИЭМ, 1983.

Поступила в редакцию 5.X.2000 г.