Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

К. А. Свешников, Д. И. Хомовский, Частицы Шредингера и Дирака в квазиодномерных системах с “кулоновским” взаимодействием, *ТМФ*, 2012, том 173, номер 2, 293–313

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8349>

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: 44.207.124.84

26 апреля 2023 г., 13:34:41

© 2012 г.

К. А. Свешников*, Д. И. Хомовский*

ЧАСТИЦЫ ШРЕДИНГЕРА И ДИРАКА В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ С “КУЛОНОВСКИМ” ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Рассмотрены специфические особенности и принципиальные различия в поведении энергетических спектров шредингеровской и дираковской частиц в регуляризованном “кулоновском” потенциале $V_\delta(z) = -q/(|z| + \delta)$ как функции параметра обрезания δ в $(1 + 1)$ измерении. Показано, что в таком одномерном “атоме водорода” в релятивистском случае при $\delta \ll 1$ дискретный спектр становится квазипериодической функцией δ , причем этот эффект неаналитически зависит от константы связи и не имеет нерелятивистского аналога. Это свойство дираковской спектральной задачи явно демонстрирует наличие физически содержательного энергетического спектра при произвольно малом $\delta > 0$, но в то же время и отсутствие регулярного предельного перехода к $\delta \rightarrow 0$ при всех ненулевых q . Также показано, что аналогичным свойством квазипериодичности по параметру обрезания обладает и трехмерная кулоновская задача при $q = Z\alpha > 1$, т.е. когда необходимо специально уточнять область определения дираковского гамильтониана с нерегуляризованным потенциалом путем задания граничных условий при $r \rightarrow 0$ или другими способами.

Ключевые слова: релятивистские эффекты, уравнение Дирака, регуляризованный кулоновский потенциал, одномерный атом водорода.

1. ВВЕДЕНИЕ

Квазиодномерные системы с “кулоновским” взаимодействием $\text{const}/|z|$ в настоящее время привлекают большое внимание в связи с постоянно растущим количеством физических приложений [1]–[18]. Такие задачи естественным образом возникают в физических моделях различных квазиодномерных структур [1]–[8], а также как нулевое приближение для целого ряда двух- и трехмерных задач, в частности при описании “парения” электронов над сверхтекучей жидкостью [2], [9]–[11], пороговой ионизации атомов интенсивным лазерным излучением [12]–[15], поведения атомов в сверхсильных магнитных полях [16]–[18].

*Московский государственный университет, Москва, Россия.
E-mail: costa@bog.msu.ru, khomovskij@physics.msu.ru

В нерелятивистской квантовой механике задача о частице в потенциале

$$V(z) = -\frac{q}{|z|} \quad (1)$$

имеет специальное название “одномерный атом водорода” и является предметом активных обсуждений более 50 лет, начиная с известных работ Лоудона и Эллиота [1], [19]. Специфика этой задачи состоит в том, что гамильтониан

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{q}{|z|} \quad (2)$$

без дополнительного уточнения области его определения не является самосопряженным оператором, что проявляется в “падении на центр” нижнего четного энергетического уровня. Самосопряженным расширением уравнения Шредингера (УШ) с гамильтонианом (2) посвящен целый ряд работ [1], [2], [19]–[30]. В шредингеровском случае самосопряженность естественным образом восстанавливается через наложение дополнительных граничных условий при $z = 0$, но выбор граничных условий содержит произвол (как и само самосопряженное расширение) [20], [21], что в свою очередь отражается в структуре энергетического спектра. В частности, наиболее известное “каноническое” граничное условие $\psi(0) = 0$, рассмотренное в работах [1], [19], [26]–[30], соответствует очевидной физической картине, когда кулоновская сингулярность фактически играет роль непроницаемой стенки, как в известной учебной квантово-механической задаче о частице в одномерном ящике, разделенном δ -образной перегородкой [31]. При этом нижний четный уровень из спектра исключается, остальные энергетические уровни гамильтониана (2) становятся вырожденными по четности и соответствуют бальмеровской серии уровней в атоме водорода [1], [19], [32]. Отметим, что возможны и рассматриваются и другие граничные условия, при которых начало координат является для частицы как непроницаемым [21], так и проницаемым [21]–[25], а энергетический спектр становится отличным от бальмеровского, что находит применение в ряде актуальных физических приложений таких, как, например, описание свойств экситонных возбуждений в углеродных нанотрубках [7], [8].

Существо проблемы в задаче с гамильтонианом (2) легко видеть на энергетическом функционале

$$E[\psi] = \langle \psi | H | \psi \rangle = \int dz \left[\frac{1}{2m} \left| \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|^2 + V(z) |\psi|^2 \right]. \quad (3)$$

Поскольку в одном пространственном измерении кулоновская сингулярность неинтегрируема, необходимо специально обеспечивать конечность энергии частицы. Самым прямым и физически прозрачным является условие $\psi(0) = 0$, упомянутое выше. Более того, явное решение задачи со сглаженной сингулярностью показывает [30], что условие $\psi(0) = 0$ является наиболее естественным граничным условием, допускающим корректную квантово-механическую постановку задачи с гамильтонианом (2), а в работе [33] тот же вывод обоснован путем предельного перехода от трехмерной задачи. Альтернативные способы компенсации кулоновской расходимости через более сложные условия, уже не имеющие такой простой физической интерпретации, рассмотрены в работах [7], [8], [21]–[25].

Для целого ряда упомянутых выше физических приложений модели “одномерного атома водорода” актуальной проблемой является учет релятивистских эффектов, что требует перехода от шредингеровского описания частицы к уравнению Дирака (УД). Формальное решение УД для “одномерного атома водорода” никаких связанных состояний в таком потенциале не находит [34]. Этот вывод, однако, не может считаться окончательным, поскольку, как и в шредингеровском случае, для нерегуляризованного потенциала (1) необходимо предварительно уточнить область определения соответствующего дираковского гамильтониана с помощью граничных условий или другими способами задания функционального пространства, в котором действует гамильтониан. Но существующие методы построения самосопряженных расширений дираковского гамильтониана с точечным кулоновским источником не имеют пока такой прозрачной физической интерпретации, как каноническое условие $\psi(0) = 0$ для шредингеровского случая (см. работу [35] и приведенную там библиографию).

В связи с этим приобретает актуальность исследование зависимости спектра УД от параметров регуляризованного потенциала и структуры соответствующих предельных переходов, поскольку в УШ это в ряде случаев позволяет прояснить физический смысл граничных условий, восстанавливающих самосопряженность в нерегуляризованной задаче [1], [2], [19]–[30].

В настоящей работе рассматривается энергетический спектр частицы Дирака в такой одномерной задаче с регуляризованным “кулоновским” потенциалом

$$V_\delta(z) = -\frac{q}{|z| + \delta} \quad (4)$$

и исследуется его зависимость от параметра обрезания δ . Эта зависимость оказывается весьма специфической, не имеющей нерелятивистского аналога, и позволяет наглядно продемонстрировать все характерные особенности энергетического спектра дираковской частицы для произвольно малых значений $\delta > 0$, включая такие, как наличие вполне содержательного дискретного спектра и бесконечный рост числа нулей у волновой функции (ВФ) нижнего связанного состояния частицы над отрицательным континуумом. Последний результат напоминает известное в нерелятивистской квантовой механике качественное пояснение эффекта “падения на центр” [32], но теперь это свойство становится корректно определяемой характеристикой нижнего уровня дираковской частицы над отрицательным континуумом и проявляется как чисто релятивистский эффект.

Помимо этого, в работе будет показано, что на самом деле необходимость уточнения области определения гамильтониана в нерегуляризованной дираковской задаче для одномерного “атома водорода” по сравнению со шредингеровским случаем имеет существенно более общий характер и проявляется в отсутствии регулярного предельного перехода $\delta \rightarrow 0$ не только для дискретного, но и для непрерывного спектров, т. е. для спектральной задачи в целом. В качестве предварительного анализа рассмотрим выражение для дираковского функционала энергии

$$E[\psi] = \int dz \psi^+ [\alpha p + \beta m + V(z)] \psi. \quad (5)$$

Его конечность предполагает снова либо $\psi(0) = 0$, либо компенсацию кулоновской расходимости каким-либо другим способом, например кинетическим членом. Но в отличие от шредингеровского случая условие $\psi(0) = 0$ теперь не может быть получено через предельный переход от сглаженной сингулярности, поскольку оно в принципе не согласуется с осциллирующим поведением дираковской ВФ $\sim z^{\pm iq}$ в окрестности начала координат в нерегуляризованной задаче Дирака. Компенсации кинетическим членом также не происходит, что будет показано ниже с помощью явного решения. Поэтому при снятии регуляризации опускаться будут все уровни, как связанные состояния, так и непрерывный спектр, а процесс такого “падения” уровней при этом будет подчиняться вполне определенным нетривиальным закономерностям.

Следует отметить, что одномерное УД с потенциалом (4) рассматривалось в работе [36], где ставилась цель определить условия, при которых основной терм водородоподобного атома, находящегося в сверхсильном магнитном поле, приближается к нижней границе дираковского континуума. В настоящей работе мы рассматриваем существенно более общую задачу о поведении всего спектра стационарных состояний при изменении параметра обрезания, для чего используются другие способы решения самого уравнения, а полученные результаты существенно уточняют и дополняют выводы работы [36].

2. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦЫ ДИРАКА В ОДНОМЕРНОМ РЕГУЛЯРИЗОВАННОМ “КУЛОНОВСКОМ” ПОТЕНЦИАЛЕ

В рассматриваемом случае стационарное УД имеет вид ($\hbar = c = 1$)

$$(\alpha p + \beta m + V_\delta(z))\psi = E\psi. \quad (6)$$

В представлении $\alpha = \sigma_2$, $\beta = \sigma_3$ и в естественных единицах, когда масштабом энергии служит масса покоя частицы, а расстояния – ее комптоновская длина волны, из уравнения (6) для верхней и нижней компонент дираковского спинора $A(z)$ и $C(z)$ следует

$$A' = \left[\epsilon + 1 + \frac{q}{|z| + \delta} \right] C, \quad C' = - \left[\epsilon - 1 + \frac{q}{|z| + \delta} \right] A. \quad (7)$$

Сначала рассмотрим связанные состояния частицы с $|\epsilon| < 1$. В работе [36] ВФ связанных состояний выражаются через функции Уиттекера. В данном случае, однако, значительно удобнее использовать метод Фробениуса (см., например, книгу [37] и приведенную там библиографию), применение которого к такой системе позволяет представить ее решение на положительной полуоси $z \geq 0$ с точностью до общего постоянного множителя в следующем виде:

$$\begin{aligned} A(z) &= e^{-\gamma(z+\delta)} \left[\sqrt{1+\epsilon} x \frac{\partial}{\partial x} + q\sqrt{1-\epsilon} \right] \text{Re}[\lambda x^{iq} \Phi(b, c, x)], \\ C(z) &= e^{-\gamma(z+\delta)} \left[\sqrt{1-\epsilon} x \frac{\partial}{\partial x} - q\sqrt{1+\epsilon} \right] \text{Re}[\lambda x^{iq} \Phi(b, c, x)], \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\gamma = \sqrt{1 - \epsilon^2}, \quad b = iq - \frac{\epsilon q}{\gamma}, \quad c = 1 + 2iq, \quad (9)$$

$$x = 2\gamma(z + \delta), \quad (10)$$

$\Phi(b, c, x)$ – функция Куммера (вырожденная гипергеометрическая функция 1-го рода), $\lambda = e^{i\varphi}$ – пока не определенный фазовый коэффициент.

Выражения (8)–(10) составляют общее решение системы (7), из которого спектр связанных состояний находится с помощью условий регулярности при $|z| \rightarrow \infty$ и четности–нечетности, которые в терминах компонент дираковского спинора $A(z)$ и $C(z)$ формулируются как $A(z)$ -четная, $C(z)$ -нечетная либо наоборот. Далее четность уровня будем отождествлять с четностью верхней компоненты $A(z)$.

Условие регулярности на пространственной бесконечности приводит к уравнению

$$\operatorname{Re} \left[\lambda \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)} \right] = 0, \quad (11)$$

а условие четного (нечетного) продолжения через начало координат $z = 0$ имеет вид

$$\operatorname{Re} \{ \lambda (2\gamma\delta)^{iq} [q(\sqrt{1+\epsilon} - i\sqrt{1-\epsilon})\Phi_0 - b\sqrt{1-\epsilon}(\Phi_0(b+) - \Phi_0)] \} = 0 \quad (12a)$$

для четного случая и

$$\operatorname{Re} \{ \lambda (2\gamma\delta)^{iq} [q(\sqrt{1-\epsilon} + i\sqrt{1+\epsilon})\Phi_0 + b\sqrt{1+\epsilon}(\Phi_0(b+) - \Phi_0)] \} = 0 \quad (12b)$$

соответственно для нечетного. В формулах (12) при этом

$$\Phi_0 = \Phi(b, c, 2\gamma\delta), \quad \Phi_0(b+) = \Phi(b+1, c, 2\gamma\delta). \quad (13)$$

Исключая с помощью уравнения (11) фазовый множитель λ из формул (12), получаем трансцендентные уравнения для определения уровней энергии четных и нечетных связанных состояний в следующем виде:

$$(2\gamma\delta)^{-2iq} \frac{q(\sqrt{1+\epsilon} + i\sqrt{1-\epsilon})\Phi_0^* - b^*\sqrt{1-\epsilon}(\Phi_0^*(b+) - \Phi_0^*)}{q(\sqrt{1+\epsilon} - i\sqrt{1-\epsilon})\Phi_0 - b\sqrt{1-\epsilon}(\Phi_0(b+) - \Phi_0)} = \frac{\Gamma(c^*)\Gamma(b)}{\Gamma(c)\Gamma(b^*)} \quad (14a)$$

для четных уровней и

$$(2\gamma\delta)^{-2iq} \frac{q(\sqrt{1-\epsilon} - i\sqrt{1+\epsilon})\Phi_0^* + b^*\sqrt{1+\epsilon}(\Phi_0^*(b+) - \Phi_0^*)}{q(\sqrt{1-\epsilon} + i\sqrt{1+\epsilon})\Phi_0 + b\sqrt{1+\epsilon}(\Phi_0(b+) - \Phi_0)} = \frac{\Gamma(c^*)\Gamma(b)}{\Gamma(c)\Gamma(b^*)} \quad (14b)$$

для нечетных.

Уравнения (14) решаются численно для всех ненулевых значений параметра регуляризации, например, с помощью пакетов типа **Mathematica** или **MatLab**. Для предельно малых значений δ , однако, уравнения могут быть значительно упрощены и допускают вполне наглядный качественный анализ. Основное упрощение состоит в том, что при $\delta \ll 1$ третий аргумент в гипергеометрических функциях оказывается такого же порядка малости, поскольку для дискретного спектра $0 < \gamma < 1$. Наше решение уравнения (7) построено на функциях Куммера, поэтому для таких δ в уравнениях (14) величины Φ_0 , $\Phi_0(b+)$ без какой-либо существенной потери

Рис. 1. Поведение нижних четных (сплошная линия) и нечетных (штриховая линия) уровней связанных состояний дираковской частицы в потенциале (4) как функция параметра $X = -\ln \delta$.

точности можно заменить на единицы, что приводит к значительно более простым уравнениям для спектра:

$$(2\gamma\delta)^{-2iq} \frac{\sqrt{1+\epsilon} + i\sqrt{1-\epsilon}}{\sqrt{1+\epsilon} - i\sqrt{1-\epsilon}} = \pm \frac{\Gamma(c^*)\Gamma(b)}{\Gamma(c)\Gamma(b^*)}, \quad (15)$$

где знаки $\pm$ соответствуют четному и нечетному случаям соответственно. Легко видеть, что уравнение (15) инвариантно относительно мультипликативной замены параметра обрезания вида

$$\delta \rightarrow \delta e^{-\pi/q}, \quad (16)$$

т. е. энергетические спектры в задачах с параметрами $\delta_1 = \delta_0$ и $\delta_2 = \delta_0 e^{-\pi/q}$ практически (с точностью до замены $\Phi_0, \Phi_0(b+)$ на единицы) совпадают, если начальное δ_0 само по себе достаточно мало. Кроме того, при замене $\delta \rightarrow \delta e^{-\pi/2q}$ четные и нечетные уровни меняются местами. Подчеркнем, что такая симметрия спектра имеет место только при достаточно малых $\delta \ll 1$. Поведение энергетических уровней как функций переменной $X = -\ln \delta$ показано на рис. 1, где приведен результат численного решения уравнений (14) для двух нижних уровней – четного и следующего за ним нечетного – при константе связи $q = 1/137$.

Как и следовало ожидать, с уменьшением δ от стартового значения $\delta_0 = 1$ эти уровни последовательно один за другим опускаются вниз до порога отрицательного континуума с шагом $\simeq \pi/2q$ по переменной X , и с каждым шагом меняется четность нижнего уровня и увеличивается на 1 число нулей верхней и нижней компонент его ВФ. Эффект изменения четности и увеличения числа нулей нижнего уровня дискретного спектра легко пояснить следующим образом. При $\delta_0 \simeq 1$ и $q < 1$ спектр связанных состояний уравнения (6) по своей структуре весьма близок к дискретному спектру соответствующей нерелятивистской задачи (из этих соображений и выбирается начальное значение $\delta_0 = 1$), в котором основным состоянием является четный уровень с $\epsilon_0 \simeq 1 - O(q^2)$ (с учетом массы покоя), верхняя компонента которого $A(z)$ не имеет нулей. Каждый следующий уровень имеет другую четность и на один

нуль больше предыдущего для каждой из спинорных компонент, и уровни сгущаются к порогу верхнего континуума при $\epsilon = 1$. Теперь начинаем изменять δ в сторону уменьшения начиная с $\delta_0 = 1$. После того как исходное основное состояние от начального значения ϵ_0 спустится вниз до отрицательного континуума за интервал $\simeq \pi/2q$ изменения параметра X , нижним дискретным уровнем станет тот, который был первым нечетным при $\delta_0 = 1$, причем его энергия будет теперь с точностью $O(e^{-\pi/2q} \simeq e^{-215})$ при $q = 1/137$ совпадать с ϵ_0 . На следующем шаге по X , уже практически совпадающем с $\pi/2q$, он также опустится до порога нижнего континуума, а на его место встанет тот, который был следующим четным после основного при $\delta_0 = 1$ и имеет тем самым два нуля. Поскольку в кулоновском потенциале дискретных уровней всегда бесконечно много, при дальнейшем уменьшении δ такой процесс будет повторяться неограниченное число раз. Таким образом, при $\delta \rightarrow 0$ нижним связанным состоянием над отрицательным континуумом будет становиться либо четный, либо нечетный уровень с постоянно растущим числом нулей, а предела у такой последовательности и тем самым предельного спектра связанных состояний не существует.

Оба эти свойства – квазипериодичность спектра и рост числа нулей нижнего уровня над отрицательным континуумом при уменьшении δ – можно показать и другим способом. Для этого используем то обстоятельство, что при достижении дискретным уровнем порога отрицательного континуума $\epsilon_1 = -1$ его ВФ существенно упрощаются, и при $z \geq 0$ спинорные компоненты $A(z)$ и $C(z)$ с точностью до общего множителя могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} A(z) &= K_{2iq}(\sqrt{8q(z+\delta)}), \\ C(z) &= -\sqrt{\frac{z+\delta}{2q}} [K_{1+2iq}(\sqrt{8q(z+\delta)}) + K_{1-2iq}(\sqrt{8q(z+\delta)})], \end{aligned} \quad (17)$$

где $K_p(z)$ – функция Макдональда и использовано свойство $K_p(z) = K_{-p}(z)$. Четные уровни достигают нижнего континуума при таких значениях δ , когда $C(0) = 0$, а нечетные – соответственно при $A(0) = 0$. Квазипериодичность спектра при малых $\delta \ll 1$ при этом становится совершенно очевидной, поскольку $K_{i\nu}(z)$ при $z \rightarrow 0$ осциллирует как $\sin(\nu \ln z)$. В результате при $\delta \ll 1$ условие $A(0) = 0$ запишется как $\sin[q \ln(8q\delta)] = 0$, а $C(0) = 0$ – как $\cos[q \ln(8q\delta)] = 0$, и тем самым уровни достигают порога нижнего континуума с периодом $\pi/2q$ по переменной X .

Значения параметра $X = -\ln \delta$ для первых шести уровней чередующейся четности, полученные из решения соответствующих трансцендентных уравнений при $q = 1/137$, показаны в табл. 1. Эти результаты наглядно демонстрируют квазипериодичность по X с шагом $\pi/2q = 215.199$, которая становится все более точной с ростом X .

Таблица 1. Значения параметра $X = -\ln \delta$ для первых шести уровней чередующейся четности, при которых соответствующий уровень достигает порога отрицательного континуума.

уровень	1 – четн.	1 – нечетн.	2 – четн.	2 – нечетн.	3 – четн.	3 – нечетн.
$-\ln(\delta)$	212.127	427.326	642.525	857.724	1072.92	1288.12

Рис. 2. Поведение на пороге отрицательного континуума верхних спинорных компонент $A(z)$ на полуоси $z \geq 0$ для первых трех уровней – 1-го и 2-го четного (штриховые линии) и 1-го нечетного (сплошная линия) при $q = 1$.

Из явного вида (17) ВФ уровней при $\epsilon = \epsilon_1 = -1$ легко установить также и изменение четности и увеличение числа нулей каждого следующего уровня, достигшего отрицательного континуума. Действительно, с каждым следующим уровнем значение δ и тем самым начальное значение аргумента K -функций в выражениях (17) будут сдвигаться к нулю таким образом, чтобы каждая из спинорных компонент $A(z)$ и $C(z)$ приобрела на один нуль больше, и соответственно изменилась четность уровня. Поведение верхних спинорных компонент $A(z)$ для первых трех уровней на полуоси $z \geq 0$ для $q = 1$ показано на рис. 2. Необходимость выбора такого большого (в физическом смысле) значения константы связи обусловлена тем, что только при таких значениях q знакопеременность ВФ в окрестности нуля становится достаточно хорошо заметной на фоне гладкого экспоненциального убывания.

Поскольку в течение всей эволюции уровня от $\epsilon_0 \simeq 1$ до $\epsilon_1 = -1$ его четность и число нулей не меняются, четность и число нулей уровня на пороге отрицательного континуума однозначно определяют четность и число нулей его прообраза – нижнего дискретного уровня на интервале $\pi/2q$ по X вплоть до достижения этим уровнем порогового значения ϵ_1 . При этом на каждом следующем интервале $\pi/2q$ по X четность и число нулей уровней на пороге и тем самым их прообразов в дискретном спектре будут изменяться описанным выше образом.

Следует специально отметить, что такая периодичность в зависимости ВФ и спектра связанных состояний от параметра обрезания является чисто релятивистским эффектом, который отсутствует в аналогичной шредингеровской задаче, когда при снятии обрезания в отрицательную бесконечность опускается только нижний четный уровень. Релятивистскую природу этого эффекта легко показать, восстановив в формуле (16) в явном виде зависимость от исходных размерных параметров в константе связи q , а именно

$$q = \frac{e_1 e_2}{\hbar c}, \quad (18)$$

так что (квази)периодичность спектра по δ приобретает следующий вид:

$$\delta \rightarrow \delta e^{-\pi \hbar c / e_1 e_2}. \quad (19)$$

Рис. 3. Энергии основных состояний дираковской (кривая 1) и шредингеровской (кривая 2) частиц как функции параметра $X = -\ln \delta$ при $q = 1/137$.

Поскольку e^{-x} не имеет степенного разложения по $1/x$ при $x \rightarrow \infty$, из формулы (19) непосредственно следует, что в рамках квазирелятивистского разложения УД такая мультипликативная (квази)периодичность спектра по параметру обрезания не проявляется ни в каком конечном порядке разложения по $1/c$, а возникает как чисто непертурбативный релятивистский эффект.

Представляет также определенный интерес сравнение энергии основного состояния дираковской и шредингеровской частиц при различных значениях δ и одной и той же константе связи q , чтобы оценить вклад релятивистских эффектов, которые учитываются УД. Результаты сравнения представлены в табл. 2.

Таблица 2. Энергии основного состояния дираковской и шредингеровской частиц в потенциале (4) при различных δ и $q = 1/137$. Энергия шредингеровской частицы приведена с учетом массы покоя.

$-\ln(\delta)$	0	$\ln(10)$	$\ln(100)$	50	100	150	200
E_D	0.99933694	0.9982154	0.996249	0.75332	0.12898	-0.56724	-0.97614
E_{Sch}	0.99933692	0.9982152	0.996248	0.74332	0.03126	-1.33296	-3.16378

Из табл. 2 хорошо видно, что энергия связи основного состояния в шредингеровском случае всегда больше, чем для частицы Дирака. Этот результат показан на рис. 3 для интервала изменения δ от $\delta_0 = 1$ до момента достижения дираковским уровнем порога отрицательного континуума.

Такое различие в поведении основного состояния между шредингеровским и дираковским случаями легко понять, если учесть разницу в поведении их ВФ. В шредингеровском случае при уменьшении параметра обрезания ВФ основного состояния трансформируется в δ -образную функцию, локализованную в начале координат, поскольку именно на такой ВФ будет реализовываться минимум энергетического функционала (3). А в дираковском случае ВФ ведет себя иначе. При $\epsilon \geq 0$ область локализации дираковской ВФ определяется прежде всего экспоненциальным фактором $e^{-\gamma|z|}$. Когда уровень опускается от значения $\epsilon_0 \simeq 1 - O(q^2)$ вниз до $\epsilon = 0$, параметр γ изменяется от $\gamma_0 \ll 1$ до $\gamma = 1$ при $\epsilon = 0$. Тем самым область локализации

Рис. 4. Профили верхних спинорных компонент нормированной ВФ основного четного состояния для $q = 1$ при $\epsilon = 0.9$ (кривая 1), $\epsilon = 0$ (кривая 2), $\epsilon = -0.9$ (кривая 3) и $\epsilon = -1$ (пунктир).

ВФ уровня будет сначала сжиматься от “атомного” масштаба $\simeq 1/q$, соответствующего начальному положению уровня у границы положительного континуума, до $O(1)$ – размера порядка комптоновской длины частицы при $\epsilon = 0$, а затем при дальнейшем опускании уровня до отрицательного континуума продолжать сжиматься, но уже медленнее, до размера $\simeq \sqrt{3/128}/q$, определяемого асимптотикой ВФ (17) на границе отрицательного континуума, пропорциональной $e^{-\sqrt{8q|z|}}$. А поскольку вклад кулоновской сингулярности в энергию уровня дираковской частицы (5) определяется интегралом $\int dz V_\delta(z) \psi^+ \psi$, то он будет расти существенно медленнее, чем в шредингеровском случае. В результате полная энергия дираковского уровня вообще имеет другую кривизну, поскольку скорость роста кулоновского вклада будет максимальна при нулевой энергии, когда размер области локализации дираковской ВФ изменяется с максимальной скоростью, что полностью подтверждается результатами численных расчетов, приведенных на рис. 3. И такая разница кривизн есть снова результат релятивистских эффектов, учитываемых УД.

Качественно изменение профиля ВФ нижнего уровня на интервале $\pi/2q$ показано на рис. 4, где приведены профили верхних спинорных компонент нормированной ВФ основного четного состояния на полуоси $z \geq 0$, найденные прямым численным решением уравнений (7) при $q = 1$ для эволюции уровня начиная с $\epsilon = 0.9$, а также когда при уменьшении δ этот уровень последовательно достигает значений $\epsilon = 0$, $\epsilon = -0.9$ и $\epsilon = -1$. Как и для рис. 2, большое значение константы связи выбрано для того, чтобы изменение профиля ВФ с изменением энергии уровня можно было проследить во всех деталях.

Отметим также, что в случае релятивистского уравнения Клейна–Гордона (УКГ) потенциал (4), рассматриваемый как электростатический, приводит к еще более быстрому росту энергии связи, чем для шредингеровского случая, поскольку теперь спектральное уравнение будет содержать еще и квадратичный член $-q^2/(|z| + \delta)^2$ [38], [39]. В частности, в случае УКГ основное состояние имеет нулевую энергию (с учетом массы покоя) при значении параметра обрезания, приведенном к исполь-

зующим в этой работе безразмерным единицам, порядка 5×10^{-5} , т. е. энергия спадает до нуля гораздо быстрее, чем в дираковском и шредингеровском случаях. Этот результат иллюстрирует нетривиальное различие этих задач при малых значениях параметра обрезания. Более того, даже при больших значениях δ релятивистские поправки к энергии основного шредингеровского состояния для УД и УКГ будут иметь разные знаки.

3. ЭВОЛЮЦИЯ УРОВНЕЙ С НАЧАЛЬНОЙ ЭНЕРГИЙ $\epsilon > 1$ КАК ФУНКЦИЯ ПАРАМЕТРА ОБРЕЗАНИЯ

Теперь рассмотрим поведение уровней дираковской частицы в состояниях непрерывного спектра, которые при начальном значении параметра обрезания $\delta_0 = 1$ имеют энергию $\epsilon > 1$ и осциллирующую асимптотику на пространственной бесконечности. Для этого поместим частицу в ящик так, чтобы непрерывный спектр превратился в (квази)дискретный, что позволяет проследить за эволюцией отдельного уровня начиная с исходного значения энергии $\epsilon > 1$ при $\delta = \delta_0$. Для УД наиболее корректным способом удержания частицы в ящике со стенками при $z = \pm L$ являются граничные условия, используемые в релятивистских моделях кварковых мешков [40]:

$$(\pm i\alpha + \beta)\psi(\pm L) = 0. \quad (20)$$

Эти условия удобны также тем, что сохраняют четность, поэтому все уровни снова можно классифицировать по четности и использовать только одно граничное условие справа (или слева), которое в терминах спинорных компонент $A(z)$ и $C(z)$ принимает вид

$$A(L) + C(L) = 0. \quad (21)$$

Как и при решении уравнений (7) для $|\epsilon| < 1$, при $\epsilon > 1$ снова оказывается удобно воспользоваться методом Фробениуса и выразить ВФ непосредственно через вырожденные гипергеометрические функции Куммера, в результате чего на положительной полуоси $z \geq 0$ получим для них следующие выражения:

$$\begin{aligned} A(z) &= \text{Re}\{\lambda e^{-ik(z+\delta)} x^{iq} [iq(\sqrt{\epsilon-1} + \sqrt{\epsilon+1})\Phi + b\sqrt{\epsilon+1}(\Phi(b+) - \Phi)]\}, \\ C(z) &= -\text{Re}\{\lambda e^{-ik(z+\delta)} x^{iq} [q(\sqrt{\epsilon-1} + \sqrt{\epsilon+1})\Phi - ib\sqrt{\epsilon-1}(\Phi(b+) - \Phi)]\}, \end{aligned} \quad (22)$$

где опущен общий постоянный множитель,

$$k = \sqrt{\epsilon^2 - 1}, \quad b = iq \left(1 + \frac{\epsilon}{k}\right), \quad c = 1 + 2iq, \quad x = 2ik(z + \delta), \quad (23)$$

$$\Phi = \Phi(b, c, x), \quad \Phi(b+) = \Phi(b + 1, c, x), \quad (24)$$

а $\lambda = e^{i\varphi}$ является фазовым коэффициентом, который определяется из граничного условия (21) через значения функций Куммера при $x = 2ikL$. Далее, используем условия четности–нечетности решений и замену функций Куммера при $x = 2ik\delta$ и множителей $e^{\pm ik\delta}$ на единицы, которая при $k\delta \ll 1$ является вполне обоснованным упрощением для уровней в интервале энергий $|\epsilon| \ll 1/\delta$. В результате для таких

Рис. 5. Эволюция нижних четных (сплошные линии) и нечетных (штриховые линии) уровней положительного континуума по переменной $X = -\ln \delta$ при $L = 10$ (а), $L = 100$ (б) и $L = 1000$ (в).

уровней получаем трансцендентное уравнение вида

$$(Le^X)^{2iq} = \mp e^{2ikL} \frac{q(i+1)(\sqrt{\epsilon-1} + \sqrt{\epsilon+1})\Phi_L^* + b(\sqrt{\epsilon+1} - i\sqrt{\epsilon-1})(\Phi_L(b+)^* - \Phi_L^*)}{q(i-1)(\sqrt{\epsilon-1} + \sqrt{\epsilon+1})\Phi_L + b(\sqrt{\epsilon+1} + i\sqrt{\epsilon-1})(\Phi_L(b+) - \Phi_L)}, \quad (25)$$

где

$$\Phi_L = \Phi(b, c, 2ikL), \quad \Phi_L(b+) = \Phi(b+1, c, 2ikL) \quad (26)$$

и знаки $\mp$ относятся к четному и нечетному случаям соответственно.

Уравнение (25) снова обладает тем же свойством мультипликативной периодичности (16), что и уровни связанных состояний с $|\epsilon| < 1$, рассмотренные выше. Поведение нижних уровней с начальной энергией $\epsilon > 1$ до порога положительного континуума $\epsilon = 1$ как функций $X = -\ln \delta$ показано на рис. 5 для трех значений $L = 10, 100, 1000$ и $q = 1/137$. Три различных размера ящика позволяют показать все необходимые детали зависимости уровней от δ , что особенно четко видно при минимальном размере ящика $L = 10$ на рис. 5а, равно как и плавный переход к квазинепрерывному пределу на рис. 5в при $L = 1000$.

Следующий результат подтверждает предварительный вывод, сделанный на основе анализа дираковского функционала энергии (5), что кулоновская сингулярность в одномерном УД является доминирующим эффектом для всех уровней, включая

Рис. 6. Эволюция по $X = -\ln \delta$ нижних четных (сплошные линии) и нечетных (штриховые линии) уровней с положительной энергией; $L = 10$, $q = 1/137$.

как связанные состояния с $|\epsilon| < 1$, так и непрерывный спектр. В данном случае это проявляется в том, что уровни с начальным $\epsilon > 1$, достигнув в процессе уменьшения параметра обрезания порога положительного континуума $\epsilon = 1$, на этом не останавливаются и продолжают опускаться сначала в область $|\epsilon| < 1$, а при дальнейшем уменьшении δ пересекают порог отрицательного континуума $\epsilon = -1$ и уходят неограниченно глубоко вниз, причем этот процесс повторяется с периодичностью $\pi/2q$ по переменной X для каждого следующего уровня. Это непосредственно следует из решения уравнений для уровней частицы, удерживаемой на отрезке $[-L, +L]$ граничными условиями (20), сразу для всех энергетических интервалов. При $\epsilon > 1$ уровни определяются из уравнения (25), а при $|\epsilon| < 1$ и $\epsilon < -1$ — из уравнений

$$(Le^X)^{2iq} = \pm \frac{\sqrt{1+\epsilon} - i\sqrt{1-\epsilon}}{\sqrt{1+\epsilon} + i\sqrt{1-\epsilon}} \times \\ \times \frac{q[\sqrt{1-\epsilon} - \sqrt{1+\epsilon} - i(\sqrt{1-\epsilon} + \sqrt{1+\epsilon})]\Phi_L^* + b^*(\sqrt{1+\epsilon} + \sqrt{1-\epsilon})(\Phi_L(b+)^* - \Phi_L^*)}{q[\sqrt{1-\epsilon} - \sqrt{1+\epsilon} + i(\sqrt{1-\epsilon} + \sqrt{1+\epsilon})]\Phi_L + b(\sqrt{1+\epsilon} + \sqrt{1-\epsilon})(\Phi_L(b+) - \Phi_L)} \quad (27)$$

для $|\epsilon| < 1$, при этом $b = iq - eq/\gamma$, $\Phi_L = \Phi(b, c, 2\gamma L)$, и

$$(Le^X)^{2iq} = \\ = \mp e^{2ikL} \frac{q(1-i)(\sqrt{|\epsilon|+1} - \sqrt{|\epsilon|-1})\Phi_L^* - b(\sqrt{|\epsilon|+1} - i\sqrt{|\epsilon|-1})(\Phi_L(b+)^* - \Phi_L^*)}{q(1+i)(\sqrt{|\epsilon|+1} - \sqrt{|\epsilon|-1})\Phi_L + b(\sqrt{|\epsilon|+1} + i\sqrt{|\epsilon|-1})(\Phi_L(b+) - \Phi_L)} \quad (28)$$

для $\epsilon < -1$, при этом $b = iq(1 - |\epsilon|/k)$, $\Phi_L = \Phi(b, c, 2ikL)$. Верхние знаки в уравнениях (27), (28) соответствуют четным, а нижние — нечетным уровням.

Результат численного решения уравнений (25)–(28) для эволюции пяти уровней, которые при начальном значении $\delta = \delta_0$ были нижними положительно-частотными, представлен на рис. 6. Необходимо отметить, что непосредственно при $\epsilon = \pm 1$

прямое численное решение уравнений (25)–(28) невозможно из-за сингулярностей, обусловленных бесконечно малыми знаменателями, поэтому вычисления проводились на такой сетке по X , которая обеспечивает переход через пороговые значения с минимальным возможным шагом, и последующей интерполяцией. Гладкость полученных интерполяционных кривых в окрестности пороговых точек и отсутствие их пересечения друг с другом гарантирует, что каждая из них есть результат эволюции по δ своего начального уровня.

4. ТРЕХМЕРНАЯ АНАЛОГИЯ ЭФФЕКТА КВАЗИПЕРИОДИЧНОСТИ

Такая квазипериодичность спектра дираковской частицы по параметру обрезания в регуляризованном кулоновском потенциале (4) не есть исключительно свойство одного пространственного измерения. На самом деле почти аналогичная картина будет иметь место и в двух, и в трех пространственных измерениях для таких значений заряда, когда при снятии регуляризации необходимо специально уточнять область определения дираковского гамильтониана.

В качестве примера рассмотрим энергетический спектр частицы в кулоновском потенциале, обрезанном простейшим образом

$$V(r) = -\frac{Z\alpha}{r}, \quad r > \delta, \quad V(r) = -\frac{Z\alpha}{\delta}, \quad r \leq \delta, \quad (29)$$

для случая трех пространственных измерений при $q = Z\alpha > j + 1/2$, где j – полный момент частицы. В этом разделе мы не будем рассматривать области связанных состояний с $|\epsilon| < 1$ и непрерывного спектра с $|\epsilon| > 1$ по отдельности, а покажем сразу общую картину эволюции отдельных уровней начиная с исходного значения энергии $\epsilon > 1$ при $\delta = \delta_0$. Для этого, как и в предыдущем разделе, будем рассматривать дираковскую частицу в шаре радиуса R . Соответствующие граничные условия удержания теперь имеют вид [40]

$$(i\vec{n}\vec{\alpha} + \beta)\psi(R) = 0, \quad (30)$$

где $\vec{n} = \vec{r}/r$ – внешняя нормаль.

Поскольку при этих условиях будет сохраняться полный момент частицы j , то в стандартном представлении для матриц Дирака верхний и нижний спиноры дираковской ВФ будут содержать шаровые спиноры Ω_{jlm_j} и $\Omega_{jl'm_j}$ различной четности, $l + l' = 2j$, и радиальные функции $if_j(r)$ и $g_j(r)$:

$$\psi_{jm_j} = \begin{pmatrix} if_j(r)\Omega_{jlm_j} \\ g_j(r)\Omega_{jl'm_j} \end{pmatrix}. \quad (31)$$

При этом $f_j(r)$ и $g_j(r)$ вещественны, а условия (30) принимают вид

$$f_j(R) + g_j(R) = 0. \quad (32)$$

Далее, действуя в полной аналогии с одномерной задачей, при $r > \delta$ используем метод Фробениуса и представляем $f_j(r)$ и $g_j(r)$ в виде

$$\begin{aligned} f_j(r) &= \left(\frac{e^{-\gamma r}}{r} \right) \left[\sqrt{1+\epsilon} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \right) + q\sqrt{1-\epsilon} \right] \operatorname{Re}[\lambda x^{i\kappa_j} \Phi(b, c, x)], \\ g_j(r) &= \left(\frac{e^{-\gamma r}}{r} \right) \left[\sqrt{1-\epsilon} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \mp \left(j + \frac{1}{2} \right) \right) - q\sqrt{1+\epsilon} \right] \operatorname{Re}[\lambda x^{i\kappa_j} \Phi(b, c, x)], \end{aligned} \quad (33)$$

где знаки $\pm$ соответствуют решениям УД различной четности $(-1)^{j+1/2}$ верхнего спинора, которую далее и будем отождествлять с четностью соответствующего уровня; опущен общий множитель; λ , как и ранее, – фазовый коэффициент, который определяется теперь из условий (32), а остальные параметры определяются следующим образом.

При $|\epsilon| < 1$

$$\gamma = \sqrt{1-\epsilon^2}, \quad \kappa_j = \sqrt{q^2 - \left(j + \frac{1}{2} \right)^2}, \quad b = i\kappa_j - \frac{\epsilon q}{\gamma}, \quad c = 1 + 2i\kappa_j, \quad x = 2\gamma r, \quad (34)$$

а если $|\epsilon| > 1$, то $\gamma \rightarrow ik$, $x = 2ikr$, где $k = \sqrt{\epsilon^2 - 1}$, и для $\epsilon > 1$ $\sqrt{1-\epsilon} \rightarrow i\sqrt{\epsilon-1}$, $b = i(\kappa_j + \epsilon q/k)$, а для $\epsilon < -1$ $\sqrt{1+\epsilon} \rightarrow i\sqrt{|\epsilon|-1}$, $b = i(\kappa_j - |\epsilon|q/k)$.

При $r \leq \delta$ радиальные функции решения УД с четностью $(-1)^{j-1/2}$ имеют вид

$$f_j(r) = \frac{A_j J_j(\xi r)}{\sqrt{r}}, \quad g_j(r) = \frac{B_j J_{j+1}(\xi r)}{\sqrt{r}}, \quad B_j = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon + q/\delta - 1}{\epsilon + q/\delta + 1}} \frac{A_j}{j+1}, \quad (35a)$$

а с противоположной четностью $(-1)^{j+1/2}$ –

$$f_j(r) = \frac{C_j J_{j+1}(\xi r)}{\sqrt{r}}, \quad g_j(r) = \frac{D_j J_j(\xi r)}{\sqrt{r}}, \quad C_j = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon + q/\delta + 1}{\epsilon + q/\delta - 1}} \frac{D_j}{j+1}; \quad (35b)$$

при этом $\xi = \sqrt{(\epsilon + q/\delta)^2 - 1}$.

Определяя фазовый коэффициент λ из условий (32) и сшивая затем внутреннее и внешнее решения при $r = \delta$, получим трансцендентное уравнение для энергетического спектра, которое в общем случае выглядит достаточно громоздко, но, как и в одномерном случае, при $\delta \ll 1$ может быть существенно упрощено за счет свойств функций Куммера и условия для допустимого интервала энергий $|\epsilon| \ll 1/\delta$. Последнее, однако, при $\delta \ll 1$ не является существенным. Окончательный результат после ряда алгебраических преобразований имеет следующий вид.

Для $|\epsilon| < 1$

$$\begin{aligned} & (Re^X)^{2i\kappa_j} \times \\ & \times \frac{\sigma_j [\sqrt{1+\epsilon}(i\kappa_j - (j+1/2)) \mp q\sqrt{1\mp\epsilon}] \pm 2(j+1)[\sqrt{1\mp\epsilon}(i\kappa_j + (j+1/2)) \pm q\sqrt{1\pm\epsilon}]}{\sigma_j [\sqrt{1\pm\epsilon}(i\kappa_j + (j+1/2)) \pm q\sqrt{1-\epsilon}] \pm 2(j+1)[\sqrt{1\mp\epsilon}(i\kappa_j - (j+1/2)) \mp q\sqrt{1\pm\epsilon}]} = \\ & = -\frac{(\sqrt{1+\epsilon} - \sqrt{1-\epsilon})(q/\gamma \pm (j+1/2))\Phi_R^* + b^*\Phi_R(b+)^*(\sqrt{1+\epsilon} + \sqrt{1-\epsilon})}{(\sqrt{1+\epsilon} - \sqrt{1-\epsilon})(q/\gamma \pm (j+1/2))\Phi_R + b\Phi_R(b+)(\sqrt{1+\epsilon} + \sqrt{1-\epsilon})}, \end{aligned} \quad (36a)$$

где $\Phi_R = \Phi(b, c, 2\gamma R)$, $\Phi_R(b+) = \Phi(b+1, c, 2\gamma R)$.

Для $\epsilon > 1$

$$\begin{aligned} & (Re^X)^{2i\kappa_j} \times \\ & \times \frac{\sigma_j[\sqrt{\epsilon \pm 1}(i\kappa_j - (j+1/2)) + iq\sqrt{\epsilon \mp 1}] + 2(j+1)[q\sqrt{\epsilon \pm 1} - i\sqrt{\epsilon \mp 1}(i\kappa_j + (j+1/2))]}{\sigma_j[\sqrt{\epsilon \pm 1}(i\kappa_j + (j+1/2)) + iq\sqrt{\epsilon \mp 1}] - 2(j+1)[q\sqrt{\epsilon \pm 1} - i\sqrt{\epsilon \mp 1}(i\kappa_j - (j+1/2))]} = \\ & = \mp e^{2ikR} \frac{(i\sqrt{\epsilon-1} + \sqrt{\epsilon+1})(iq/k \pm (j+1/2))\Phi_R^* - b^*\Phi_R(b+)^*(i\sqrt{\epsilon-1} - \sqrt{\epsilon+1})}{(i\sqrt{\epsilon-1} - \sqrt{\epsilon+1})(iq/k \mp (j+1/2))\Phi_R + b\Phi_R(b+)(i\sqrt{\epsilon-1} + \sqrt{\epsilon+1})}, \end{aligned} \quad (36б)$$

при этом $b = i(\kappa_j + \epsilon q/k)$, $\Phi_R = \Phi(b, c, 2ikR)$, $\Phi_R(b+) = \Phi(b+1, c, 2ikR)$.

При $\epsilon < -1$

$$\begin{aligned} & (Re^X)^{2i\kappa_j} \times \\ & \times \frac{\sigma_j[i\sqrt{|\epsilon| \mp 1}(i\kappa_j - (j+1/2)) + q\sqrt{|\epsilon| \pm 1}] + 2(j+1)[iq\sqrt{|\epsilon| \mp 1} - \sqrt{|\epsilon| \pm 1}(i\kappa_j + (j+1/2))]}{\sigma_j[i\sqrt{|\epsilon| \mp 1}(i\kappa_j + (j+1/2)) + q\sqrt{|\epsilon| \pm 1}] - 2(j+1)[iq\sqrt{|\epsilon| \mp 1} - \sqrt{|\epsilon| \pm 1}(i\kappa_j - (j+1/2))]} = \\ & = \pm e^{2ikR} \frac{(i\sqrt{|\epsilon|-1} + \sqrt{|\epsilon|+1})(iq/k \pm (j+1/2))\Phi_R^* + b^*\Phi_R(b+)^*(i\sqrt{|\epsilon|-1} - \sqrt{|\epsilon|+1})}{(i\sqrt{|\epsilon|-1} - \sqrt{|\epsilon|+1})(iq/k \mp (j+1/2))\Phi_R - b\Phi_R(b+)(i\sqrt{|\epsilon|-1} + \sqrt{|\epsilon|+1})}, \end{aligned} \quad (36в)$$

где $b = i(\kappa_j - |\epsilon|q/k)$, $\Phi_R = \Phi(b, c, 2ikR)$, $\Phi_R(b+) = \Phi(b+1, c, 2ikR)$.

При этом во всех уравнениях (36)

$$\sigma_j = \sigma_j(q) = \frac{J_{j+1}(q)}{J_j(q)}, \quad (37)$$

и знаки $\pm$ и $\mp$ соответствуют уровням с четностью $(-1)^{j\mp 1/2}$.

Как и в $(1+1)$ измерении, в трехмерном случае эффект квазипериодичности проявляется и при достижении уровнями дискретного спектра порога отрицательного континуума $\epsilon = -1$. В бесконечном объеме при $\epsilon = -1$ и $r > \delta$ радиальная часть ВФ частицы снова выражается через функции Макдональда, а именно радиальные функции уровней с четностью $(-1)^{j\mp 1/2}$ с точностью до общего множителя можно представить в виде

$$\begin{aligned} f_j(r) &= \frac{K_{2i\kappa_j}(\sqrt{8qr})}{r}, \\ g_j(r) &= -\frac{K_{1+2i\kappa_j}(\sqrt{8qr}) + K_{1-2i\kappa_j}(\sqrt{8qr})}{\sqrt{2qr}} \mp \frac{j+1/2}{qr} K_{2i\kappa_j}(\sqrt{8qr}). \end{aligned} \quad (38)$$

Значения δ , при которых уровни с заданными j и четностью будут достигать порога отрицательного континуума, определяются теперь из условий спивки уравнений (35) и (38), которые при $\delta \ll 1$ сводятся к уравнениям

$$\kappa_j \operatorname{ctg}[\kappa_j \ln(8q\delta)] = j + \frac{1}{2} - q \frac{\sigma_j(q)}{2(j+1)} \quad (39а)$$

для четности $(-1)^{j-1/2}$ и

$$\kappa_j \operatorname{ctg}[\kappa_j \ln(8q\delta)] = q \frac{2(j+1)}{\sigma_j(q)} - \left(j + \frac{1}{2}\right) \quad (39б)$$

Рис. 7. Эволюция по $X = -\ln \delta$ нижних $S_{1/2}$ - (сплошные линии) и $P_{1/2}$ - (штриховые линии) уровней с положительной энергией. $R = 10$, $Z = 140$, $j = 1/2$.

для четности $(-1)^{j+1/2}$.

Из уравнений (36) и (39) непосредственно следует, что в области значений зарядов $Z\alpha > j + 1/2$ и малых $\delta \ll 1$ кулоновские уровни энергии дираковской частицы в трехмерном случае, как и в одномерном, при фиксированном j и четности будут периодическими функциями параметра $X = -\ln \delta$ с периодом

$$\tau_j = \frac{\pi}{\kappa_j} = \frac{\pi}{\sqrt{q^2 - (j + 1/2)^2}}. \quad (40)$$

На уровне общих свойств УД это есть еще одна манифестация необходимости специального уточнения класса функций, на котором действует гамильтониан в нерегуляризованной задаче при таких зарядах, поскольку периодичность спектра по X означает отсутствие регулярного предела при $\delta \rightarrow 0$, и, как и в одномерном случае, этот эффект снова является существенно релятивистским.

Эволюция нижних уровней с начальной положительной энергией при изменении δ показана на рис. 7, 8. На рис. 7 для $Z = 140$ приведены нижние $S_{1/2}$ - и $P_{1/2}$ -уровни, отличающиеся по четности, но имеющие одинаковый практически максимально возможный период (40) по $X = -\ln \delta$. На рис. 8 показана эволюция нижних $P_{3/2}$ -уровней, но уже для $Z = 280$, так как при $Z = 140$ уровни с $j = 3/2$ еще не обладают свойством квазипериодичности. Легко видеть, что для $P_{3/2}$ при этом период становится ровно в 2 раза меньше.

Следует также отметить, что для других точно решаемых способов обрезания кулоновского потенциала вся разница по сравнению с рассмотренным случаем (29) будет заключаться лишь в изменении зависимости параметра σ_j от q . Эта зависимость определяется исключительно свойствами “внутреннего” решения УД при $r \leq \delta$ и влияет лишь на детали поведения уровней в пределах периода эволюции спектра по δ , но не на сам период (40). Период определяется не зависящими от вида регуляризации свойствами “внешнего” решения при $r \geq \delta$. Скорее всего, такая (квази)периодичность спектра по δ есть общее свойство регуляризованного кулоновского потенциала при достаточно общих условиях для конкретного способа регуляризации

Рис. 8. Эволюция по $X = -\ln \delta$ нижних $P_{3/2}$ -уровней с положительной энергией. $R = 10$, $Z = 280$, $j = 3/2$.

типа степени гладкости, хотя это утверждение пока не имеет строгого доказательства.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что такая (квази)периодичность дираковского спектра по параметру обрезания имеет сразу несколько аспектов. Прежде всего, она показывает, что для нерегуляризованного одномерного УД с “кулоновским” потенциалом (1) предельного спектра не существует для всех значений константы связи q . Как и для одномерного УШ [1], [2], [19]–[30], самосопряженное расширение спектральной задачи для одномерного УД с нерегуляризованным потенциалом (1), как у симметрического оператора в гильбертовом пространстве, в принципе всегда возможно [41]–[43]. В частности, в работе [35] показано, как на этой основе можно математически корректно определить дираковский оператор для точечного кулоновского источника с зарядом $Z > 137$ в случае $(3 + 1)$ измерений. Однако наш анализ показывает, что для УД в $(1 + 1)$ измерении придать физический смысл такому самосопряженному расширению будет еще сложнее, чем для трехмерного случая при $Z > 137$, поскольку в одномерном случае доопределение дираковского оператора требуется для всех значений q .

В то же время при сколь угодно малом $\delta > 0$ такой одномерный “атом водорода” будет иметь вполне содержательный энергетический спектр, ничем принципиально не отличающийся от той картины, которая будет наблюдаться при “физических” значениях $\delta \sim 1$. Качественная разница между этими двумя случаями будет проявляться на уровне структуры волновых функций, прежде всего числа их нулей. Нижним состоянием дискретного спектра при $\delta < e^{-\pi/2q}$ оказывается уровень с несколькими узлами и четностью любого знака. Подчеркнем, что аналогичным свойством будет обладать кулоновская спектральная задача и при большем числе пространственных измерений для $Z\alpha > 1$, т. е. когда необходимо специально уточнять класс функций, на котором действует нерегуляризованный дираковский гамильтониан. Такая периодичность релятивистских кулоновских спектров по параметру обрезания до

сих пор, насколько известно авторам, еще нигде и никем не отмечалась и не имеет близкого аналога среди других задач квантовой механики.

Заметим также, что при наличии уровней, опустившихся в отрицательный континуум из положительно-частотной области, последовательная интерпретация спектральной задачи для УД может быть получена только в терминах вторично квантованного дираковского поля. Это полностью согласуется с тем обстоятельством, что (квази)периодичность одночастичного дираковского спектра по δ есть существенно релятивистский эффект. Детальное обсуждение физического содержания такого свойства УД в регуляризованном кулоновском потенциале представляется преждевременным. В квантовой электродинамике при значениях δ , когда самый нижний (четный без узлов в одномерном случае или $1S_{1/2}$ в трехмерном случае) дискретный уровень достигает порога нижнего континуума, становятся существенными эффекты поляризации электрон-позитронного вакуума. Наиболее известный эффект такого типа, рассмотренный в работах [44], [45], предсказывает спонтанное рождение электрон-позитронных пар и перестройку вакуума при заряде ядра $Z > 170$ (последняя оценка – $Z \geq 173$ [46]–[48]). Но имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные, прежде всего по физике тяжелых ионов, не позволяют пока сделать однозначное заключение о наличии такого эффекта [47]–[50]. Кроме того, вакуумные средние, в терминах которых описывается поляризация вакуума в квантовой теории поля, всегда содержат неоднозначность, связанную с перенормировкой возникающих при их вычислении расходимостей. Поэтому, как специально подчеркивалось в работе [35], одночастичная кулоновская задача для УД может иметь смысл и при достижении нижним уровнем порога отрицательного континуума. В таком случае эффект квазипериодичности может иметь и физические следствия, если допустить возможность существования сверхтяжелых ядер (фактически нуклонных кластеров) с $Z \sim 200 - 300$ и более. В наиболее реалистичном трехмерном случае этот эффект очень существенно зависит от величины полного момента j , поскольку значением j определяется пороговая величина зарядов ядра, при которых возникает периодичность, и сам период (40). Поэтому далее обсуждаем только $S_{1/2}$ - и $P_{1/2}$ -состояния, для которых и пороговый заряд, и период будут наименьшими. Для реальных зарядов, которые могут быть получены при столкновениях тяжелых ионов в рамках современных экспериментов, $Z \simeq 160 - 180$ и тем самым $q \simeq 1.2 - 1.3$, поэтому даже для $S_{1/2}$ - и $P_{1/2}$ -уровней период $\tau_{1/2} \simeq 4 - 5$, т. е. периодичность спектра может наблюдаться только при изменении размеров возникающего нуклонного кластера примерно на два порядка. Но если бы заряд был хотя бы порядка 200, то $\tau \simeq 3$, и периодичность спектра возникала при изменении размеров кластера в 20 раз, а при заряде $\sim 250 - 300$ – всего в 4–5 раз, что уже может приводить к наблюдаемым эффектам.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Федеральной целевой программы “Кадры” (госконтракт № 02.740.11.0243).

Список литературы

- [1] R. J. Elliott, R. Loudon, *J. Phys. Chem. Solids*, **15**:3–4 (1960), 196–207.
- [2] M. W. Cole, M. H. Cohen, *Phys. Rev. Lett.*, **23**:21 (1969), 1238–1241.

- [3] M. I. Dykman, P. M. Platzman, P. Seddighrad, *Phys. Rev. B*, **67**:15 (2003), 155402, 15 pp., arXiv: cond-mat/0209511.
- [4] T. D. Imbo, U. P. Sukhatme, *Phys. Rev. Lett.*, **54**:20 (1985), 2184–2187.
- [5] M. Ghalim, S. Barmaki, F. Mastour, “Large multiphoton ionization of hydrogen atom in an intense femto-second laser: A classical, one-dimensional computer model”, *Modeling Complex Systems: Sixth Granada Lectures on Computational Physics*, AIP Conference Proceedings, **574**, eds. P. L. Garrido, J. Marro, AIP, Melville, NY, 2001, 280–280.
- [6] C. M. Wong, J. D. McNeill, K. J. Gaffney, N.-H. Ge, A. D. Miller, S. H. Liu, C. B. Harris, *J. Phys. Chem. B*, **103**:2 (1999), 282–292.
- [7] H. D. Cornean, P. Duclos, T. G. Pedersen, *Few-Body Syst.*, **34**:1–3 (2004), 155–161.
- [8] A. Jorio, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, *Carbon Nanotubes. Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications*, Topics in Applied Physics, **111**, Springer, Berlin, 2008.
- [9] C. M. Care, *J. Phys. C*, **5**:14 (1972), 1799–1805.
- [10] M. W. Cole, *Phys. Rev. B*, **2**:10 (1970), 4239–4252.
- [11] M. M. Nieto, *Phys. Rev. A*, **61**:3 (2000), 034901, 4 pp., arXiv: quant-ph/9908059.
- [12] Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, Д. Л. Шепелянский, *УФН*, **140**:3 (1983), 355–392.
- [13] R. V. Jensen, S. M. Susskind, M. M. Sanders, *Phys. Rep.*, **201**:1 (1991), 1–56.
- [14] Ue-Li Pen, T. F. Jiang, *Phys. Rev. A*, **46**:7 (1992), 4297–4305.
- [15] A. Lopez-Castillo, C. R. de Oliveira, *Chaos, Solitons and Fractals*, **15**:5 (2003), 859–869.
- [16] W. Rösner, G. Wunner, H. Herold, H. Ruder, *J. Phys. B*, **17**:1 (1984), 29–52.
- [17] М. А. Либерман, Б. Йоханссон, *УФН*, **165**:2 (1995), 121–142.
- [18] X. Guan, B. Li, K. T. Taylor, *J. Phys. B*, **36**:17 (2003), 3569–3590.
- [19] R. Loudon, *Am. J. Phys.*, **27**:9 (1959), 649–655.
- [20] W. Fisher, H. Leschke, P. Müller, *J. Math. Phys.*, **36**:5 (1995), 2313–2323, arXiv: cond-mat/9501081.
- [21] C. R. de Oliveira, A. A. Verri, *Ann. Phys.*, **324**:2 (2009), 251–266, arXiv: 0806.2764.
- [22] M. Andrews, *Am. J. Phys.*, **34**:12 (1966), 1194–1195.
- [23] P. Kurasov, *J. Phys. A*, **29**:8 (1996), 1767–1771.
- [24] M. Moshinsky, *J. Phys. A*, **26**:10 (1993), 2445–2350.
- [25] R. G. Newton, *J. Phys. A*, **27**:13 (1984), 4717–4718.
- [26] S. Nouri, *Phys. Rev. A*, **65**:6 (2002), 062108, 5 pp.
- [27] I. Tsutsui, R. Fülöp, T. Cheon, *J. Phys. A*, **36**:1 (2003), 275–287, arXiv: quant-ph/0209110.
- [28] B. Jaramillo, R. P. Martinez-y-Romero, H. N. Núñez-Yépez, A. L. Salas-Brito, *Phys. Lett. A*, **374**:2 (2009), 150–153.
- [29] M. K. Kostov, M. W. Cole, G. D. Mahan, *Phys. Rev. B*, **66**:7 (2002), 075407, 5 pp., arXiv: cond-mat/0204094.
- [30] F. Gesztesy, *J. Phys. A*, **13**:3 (1980), 867–875.
- [31] З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, т. 1, Мир, М., 1974.
- [32] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики*, т. 3: *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, М., 1989.
- [33] C. R. de Oliveira, *Phys. Lett. A*, **374**:28 (2010), 2805–2808.
- [34] R. E. Moss, *Am. J. Phys.*, **55**:5 (1987), 397–401.
- [35] Б. Л. Воронов, Д. Т. Гитман, И. В. Тютин, *ТМФ*, **150**:1 (2007), 41–84.
- [36] В. П. Крайнов, *ЖЭТФ*, **64**:3 (1973), 800–803.
- [37] С. Ю. Славянов, В. Лай, *Специальные функции. Единая теория, основанная на анализе особенностей*, Невский диалект, СПб., 2002.
- [38] G. Barton, *J. Phys. A*, **40**:5 (2007), 1011–1031.
- [39] R. L. Hall, *Phys. Lett. A*, **372**:1 (2007), 12–15, arXiv: 0707.1018.

- [40] A. Chodos, R. L. Jaffe, K. Johnson, C. B. Thorn, V. F. Weisskopf, *Phys. Rev. D*, **9**:12 (1974), 3471–3495.
- [41] J. von Neumann, *Mat. Ann.*, **102** (1929), 49–131.
- [42] M. H. Stone, *Linear Transformations in Hilbert Space and their Applications to Analysis*, American Mathematical Society Colloquium Publications, **15**, AMS, Providence, RI, 1932.
- [43] C. R. de Oliveira, *Intermediate Spectral Theory and Quantum Dynamics*, Progress in Mathematical Physics, **54**, Birkhauser, Basel, 2009.
- [44] Ya. B. Zel'dovich and V. S. Popov, *УФН*, **105**:3 (1971), 403–440.
- [45] А. А. Гриб, С. Г. Мамаев, В. М. Мостепаненко, *Вакумные квантовые эффекты в сильных полях*, Энергоатомиздат, М., 1988.
- [46] W. Greiner, B. Müller, J. Rafelski, *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*, Springer, Berlin, 1985.
- [47] W. Greiner, J. Reinhardt, *Quantum Electrodynamics*, Springer, Berlin, 2003.
- [48] W. Greiner, “Structure of vacuum and elementary matter: From superheavies via hypermatter to antimatter—the vacuum decay in supercritical fields”, Chapter 8, *Current Trends in Atomic Physics*, Advances in Quantum Chemistry, **53**, eds. S. Salomonson E. Lindroth, 2008, 99–150.
- [49] W. Greiner, S. Schramm, *Am. J. Phys.*, **76**:6 (2008), 509–526.
- [50] R. Ruffini, G. Vereshchagin, S.-S. Xue, *Phys. Rep.*, **487**:1–4 (2010), 1–140, arXiv: 0910.0974.

Поступила в редакцию 24.04.2012,
после доработки 5.06.2012