

ОБ ЭНЕРГИИ «ОДНОМЕРНОГО» ДВУХЭЛЕКТРОННОГО АТОМА

В. В. Скобелев*

*Московский политехнический университет
105066, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 26 октября 2017 г.

С использованием теории возмущений и давно известного для «трехмерного» атома вариационного метода вычислена энергия основного и первого возбужденного состояний «одномерного» двухэлектронного атома в конфигурации «одномерного ортоголея», который, в принципе, может быть получен экспериментально, как это уже сделано в случае бозе-конденсата Na, или реализован в сверхсильном магнитном поле $B \gg (2\alpha)^2 B_0$ ($B_0 = m^2 c^3 / e\hbar \approx 4.41 \cdot 10^{13}$ Гс). «Постоянная экранирования» σ для основного состояния в таком атоме оказалась равной $\sigma \approx 0.20$, а для возбужденного — $\sigma \approx 0.17, 0.18$ в зависимости от относительной четности PP' электронных состояний, что несколько меньше, чем в «двумерном» и «трехмерном» вариантах (в этих случаях для основного состояния она почти одинакова и равна $\sigma \approx 0.3$). Найдены также частоты основных спектральных линий «одномерного» атома He, являющиеся дублетом с расщеплением по относительной четности PP' . Наличие в спектре излучения магнитаров близких частот $\omega_{1,2} \approx \{1.15; 1.17\} \alpha^2 (c/\lambda_C)$ ($\alpha = e^2/\hbar c$, $\lambda_C = \hbar/mc$) этого дублета, соответствующих «одномерному ортоголею», указывало бы на существование сверхсильного магнитного поля в таких астрофизических объектах.

DOI: 10.7868/S0044451018030069

1. ВВЕДЕНИЕ

В нашей работе [1] была вычислена энергия основного состояния «двумерного» двухэлектронного атома, который, в принципе, может быть получен экспериментально, как это было сделано в классическом опыте авторов работы [2] с реализацией системы «двумерных» атомов Na в конденсированном состоянии с помощью дискообразных «ловушек», нарушающих однородность пространства. В этом же эксперименте были получены и «одномерные» атомы Na в конденсированном состоянии в цилиндрических «ловушках» с магнитным полем. По аналогии с «двумерным» вариантом, вполне возможно получение в эксперименте «одномерного» двухэлектронного атома.

Существуют также и другие способы получения «одномерных» двухэлектронных атомов, основанные, например, на эффективном «замораживании» реального «трехмерного» атома на линии $e_1 Z e_2$ или $Z e_1 e_2$ при использовании схемы лазерного возбуж-

дения в комбинации с внешним электрическим полем [3] — так называемого FPA (frozen planetary atom; символы Z и $e_{1,2}$ в этой полуклассической интерпретации соответствуют ядру и электронам).

Численные расчеты в рамках модели FPA были выполнены в работах [4, 5], причем в работе [5] «движение» «внутреннего электрона e_1 » трактовалось как одномерный колебательный процесс между «ядром» и «внешним электроном e_2 » в предположении доминирования конфигурации $Z e_1 e_2$ над $e_1 Z e_2$. Очевидно, такая модель атома соотносится с реальностью так же, как и наивная планетарная модель атома водорода «по Бору» с точной теорией Шредингера, не говоря уже о сомнительной правомерности разделения электронов в конфигурации $Z e_1 e_2$ на «внутренний» (e_1) и «внешний» (e_2) в основном состоянии «двухэлектронного» атома. В данной же работе мы используем точные методы квантовой механики для вычисления энергии двухэлектронного атома с истинно «одномерной» электронной структурой, предположительно реализуемой в магнитном поле в эксперименте типа [2] или в сверхсильном магнитном поле (см. ниже формулу (2)), с учетом спиновых эффектов.

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

В доступной нам литературе мы не обнаружили подобного реалистичного подхода к проблеме «одномерного» двухэлектронного атома.

Как и в работе [1], следует предварительно прокомментировать особенности получения бозе-конденсата в одном пространственном измерении (1), а также дополнительно специфику образования «одномерной» электронной структуры двухэлектронного атома в магнитном поле (2).

1. Основная формула статистики Бозе–Эйнштейна в n -мерном однородном пространстве может быть записана в виде (см. также [1])

$$C_n = \frac{2^{n/2-1}}{(2\pi)^n} \Omega_n \Gamma_S \lambda_{aC}^{-n} \left(\frac{T}{m_a}\right)^{n/2} \times \int_0^\infty \frac{dx x^{n/2-1}}{e^{x+\mu/T} - 1}. \quad (1)$$

Здесь концентрация C_n нерелятивистского бозонного газа с массами атомов m_a определяется как $C_n \equiv N_n/V_n$ ($V_n = \prod_{i=1}^n L_i$), а также использованы обозначения: $\mu \leq 0$ и T — химический потенциал и температура, $\lambda_{aC} \equiv m_a^{-1}$, $\Omega_n = 2\pi^{n/2}/\Gamma(n/2)$ — полный угол в n -мерном пространстве [6], Γ_S — спиновый статистический вес.

При $\mu = 0$, $n \geq 3$ из уравнения (1), как обычно, можно найти температуру вырождения T_n , а в интересующем нас случае $n = 1$, как и в случае $n = 2$ [1], интеграл расходится, однако при этом можно найти асимптотический вид зависимости $\mu(T)$ при $T \rightarrow 0$ (см., например, [7] и приведенные там ссылки на оригинальные работы):

$$\mu(T) = -\mu_{01} \left(\frac{T}{T_{01}}\right)^2, \quad \mu_{01} > 0. \quad (1a)$$

Данное соотношение означает, что значению $\mu = 0$ формально соответствует «температура вырождения» $T_1 = 0$, т. е. конденсированное состояние фактически отсутствует. Это, однако, относится только к случаю однородного пространства, как видно из общей формулы (1), полученной в этом предположении. В фундаментальном же эксперименте [2] при наличии, как было упомянуто, нарушающих эту однородность цилиндрических магнитных «ловушек» был продемонстрирован переход «обычного» бозе-конденсата в «нашем» пространстве $n = 3$ в «одномерный» в подпространстве $n = 1$ «трехмерного» пространства с температурой вырождения $T_1 \neq 0$.

2. Как отмечено в нашей работе [8], при условии доминирования взаимодействия спинового магнитного момента электрона с магнитным полем над его

кулоновским взаимодействием с ядром в ситуации водородоподобного атома, находящегося в магнитном поле, должно выполняться условие ограничения на величину поля:

$$B \gg (Z\alpha)^2 B_0, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}, \quad (2)$$

$$B_0 = \frac{m^2 c^3}{e\hbar} \approx 4.41 \cdot 10^{13} \text{ Гс},$$

причем уравнения Дирака и Шредингера становятся пространственно-одномерными, а ориентация спина электрона фиксирована (против поля). Магнитное поле при этом явно в уравнениях не фигурирует, его роль, как и в случае наличия только одного магнитного поля, сводится к компенсации энергии нулевых колебаний за счет отрицательного вклада в энергию при ориентации спинового магнитного момента по полю и, по этой причине, с «эффективно-одномерным» характером «движения» электрона. Заметим, что эта ситуация имеет место только для заряженных частиц с половинным спином.

Решение «одномерного» уравнения Шредингера, через которое выражается и соответствующее решение [8] уравнения Дирака, впервые было найдено в работе [9] и приведено также в книге [10], а в наших целях его будет удобно представить в виде

$$\Psi_n^{(P)} = K_n \begin{cases} \chi_n, & z > 0, \\ P\chi_n, & z < 0, \end{cases} \quad (3)$$

$$\chi_n \equiv \{\chi_n(z), \chi_n(\xi)\} = e^{-|\xi|/2n} \frac{|\xi|}{n} \times F\left(1-n, 2; \frac{|\xi|}{n}\right), \quad K_n = \frac{1}{\sqrt{2nz_0}}, \quad (3a)$$

$$\xi = \frac{2z}{z_0}, \quad z_0 = \frac{\hbar^2}{m(Ze^2)} = \lambda_C (Z\alpha)^{-1}, \quad (3b)$$

$$\lambda_C = \frac{\hbar}{mc},$$

$$K_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi_n^2 dz = 2K_n^2 \int_0^{\infty} \chi_n^2 dz = 1, \quad (3c)$$

а энергия, как и в «трехмерном» варианте, равна

$$E_n = -\frac{(Ze^2)^2 m}{2\hbar^2 n^2}. \quad (4)$$

Здесь учтено, что на всей координатной оси z состояние, характеризуемое функцией $\Psi_n^{(P)}$, двукратно вырождено по четности $P = \pm 1$, так что оно

задается совокупностью M двух квантовых чисел: $M = \{n, P\}$.

С другой стороны, очевидно, если в рамках обычно используемого в такой ситуации подхода пренебречь взаимодействием электронов в двухэлектронном атоме, то их спины должны быть в одном состоянии с ориентацией против поля, как и в водородоподобном атоме, т.е. спиновая часть волновой функции системы двух электронов в таком «одномерном» атоме симметрична относительно перестановки спиновых переменных (в «трехмерном» варианте это соответствует триплетному состоянию, в случае гелия называемого ортогелием). В «одномерном» варианте термин «триплетный» является, разумеется, условным, так как изменение ориентации суммарного спина невозможно «по определению». Поскольку мы имеем дело с системой тождественных фермионов, следовательно, координатная часть должна быть антисимметричной. Но это возможно только при различных наборах «одномерных» квантовых чисел $M = \{n, P\}$, $M' = \{n', P'\}$.

В общем случае, как известно [11], в двухэлектронном атоме следует учитывать кулоновское взаимодействие «размазанных» электронов с соответствующим вкладом в энергию (как и в работе [1], используем в основном обозначения книги [11]), равным

$$K = e^2 \int d\Gamma |\Psi_M(\mathbf{r})|^2 \int d\Gamma' |\Psi_{M'}(\mathbf{r}')|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad (4a)$$

и так называемое обменное взаимодействие

$$A = e^2 \int d\Gamma \Psi_M(\mathbf{r}) \Psi_{M'}(\mathbf{r}) \times \int d\Gamma' \Psi_{M'}^*(\mathbf{r}') \Psi_M^*(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (4b)$$

с набором квантовых чисел M и «элементом объема» $d\Gamma$ в этих формулах (в «трехмерном» варианте $M = \{n, l, m\}$, $d\Gamma \rightarrow dV$; в рассматриваемом в работе «одномерном» случае набор квантовых чисел есть $M = \{N, P\}$, а $d\Gamma \rightarrow dz$).

Для «одномерного» атома соотношения (4a), (4b) записываются следующим образом:

$$K = e^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz |\Psi_n^{(P)}(z)|^2 \times \int_{-\infty}^{\infty} dz' |\Psi_{n'}^{(P')}(z')|^2 \frac{1}{|z-z'|}, \quad (5a)$$

$$A = e^2 \int_{-\infty}^{\infty} dz [\Psi_n^{(P)}(z)] [\Psi_{n'}^{(P')}(z)] \times \int_{-\infty}^{\infty} dz' [\Psi_n^{(P)}(z')]^* [\Psi_{n'}^{(P')}(z')]^* \frac{1}{|z-z'|}. \quad (5b)$$

С использованием представления (2), как, в частности, указано в работе [1], выражения (5a), (5b) можно преобразовать к виду

$$K = 2e^2 K_n^2 K_{n'}^2 \int_0^{\infty} dz \chi_n^2(z) \int_0^{\infty} dz' \chi_{n'}^2(z') \times \left[\frac{1}{|z-z'|} + \frac{1}{z+z'} \right] \equiv K_- + K_+, \quad (6a)$$

$$A = 2e^2 K_n^2 K_{n'}^2 \int_0^{\infty} dz \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \times \int_0^{\infty} dz' \chi_n(z') \chi_{n'}(z') \left[\frac{1}{|z-z'|} + PP' \frac{1}{z+z'} \right] \equiv A_- + PP' A_+. \quad (6b)$$

Как отмечено в нашей работе [1], интегралы по dz' (dz) в K_- , A_- при любом фиксированном z (z') логарифмически расходятся в окрестности $z' = z$, причем есть возможность устранения этой расходимости с логарифмической по $(Z\alpha)$ точностью обрезанием интегралов на значении $|z-z'| \sim \lambda_C$, когда из-за поляризации электронно-позитронного вакуума «нарушается» закон Кулона [12].

В абстрактном «одномерном» пространстве возможна и параллельная ориентация спинов (в основном состоянии и в «трехмерном» пространстве при $Z = 2$, как было замечено, это ортогелий), как в реальном случае наличия сверхсильного магнитного поля (2) в «трехмерном» пространстве, подпространством которого является «одномерное», и, в принципе, антипараллельная (в «трехмерном» — парагелий), что, очевидно, нельзя осуществить в «одномерном» пространстве, индуцируемом магнитным полем как подпространство «трехмерного».

В первом случае, как уже упоминалось, спиновая часть волновой функции симметрична, а координатная — антисимметрична, т.е. при разных наборах квантовых чисел $M = \{n, P\}$ поправка E' к энергии (3) за счет взаимодействия электронов равна $E' = K - A$ [10, 11], а во втором случае $E' = K + A$.

Расходимость присутствует во втором, на практике пока нереализуемом варианте с необходимостью указанной процедуры «регуляризации», а в

первом, соответствующем реальному случаю наличия сверхсильного магнитного поля (2), согласно (6a), (6b), получаем

$$E' = 2e^2 K_n^2 K_{n'}^2 \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' \left\{ [\chi_n^2(z) \chi_{n'}^2(z') - \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \chi_n(z') \chi_{n'}(z')] \frac{1}{|z-z'|} + [\chi_n^2(z) \chi_{n'}^2(z') - PP' \chi_n(z) \chi_{n'}(z) \chi_n(z') \chi_{n'}(z')] \frac{1}{|z+z'|} \right\}. \quad (7)$$

Как можно видеть, логарифмическая расходимость при $z = z'$ в первом слагаемом в фигурных скобках отсутствует, так как выражение в квадратных скобках при «сингулярном факторе» $1/|z - z'|$ обращается в нуль для этих значений переменных интегрирования.

В эксперименте с бозе-конденсатом из двухэлектронных атомов типа проведенного авторами работы [2] с атомами Na условие ограничения величины поля, по-видимому, является менее жестким, чем даваемое сильным неравенством (2).

2. ЭНЕРГИЯ «ОДНОМЕРНОГО» ДВУХЭЛЕКТРОННОГО АТОМА В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ

В основном состоянии $n = n' = 1$ и, согласно общим рассуждениям в разд. 1, при $P' = -P$ и параллельных спинах (в «одномерном» варианте для простоты изложения состояние с параллельными спинами будем именовать «ортогелием», независимо от значения Z ; термины же «собственно ортогелий» и «гелий» оставляем для значения $Z = 2$) отличный от нуля вклад дает только второе слагаемое в фигурных скобках (7), а с переходом к безразмерной переменной ξ согласно (3), (3a), (3b), получаем с учетом вида функции $\chi_1(\xi) = \xi e^{-\xi/2}$:

$$E' = \alpha(Z\alpha)mc^2 I, \quad (8)$$

$$I = \frac{1}{2} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \xi^2 \int_0^\infty d\xi' e^{-\xi'} \xi'^2 \frac{1}{\xi + \xi'}. \quad (8a)$$

Вычисление интеграла (8a) дает значение $I = 0.40$.

Таким образом, непосредственно по теории возмущений энергия основного состояния «собственно одномерного ортогелия» равна

$$E \rightarrow E_{pert} = (2E_1 + E')|_{Z=2} \approx -3.20\alpha^2 mc^2. \quad (9)$$

Как и в «трехмерном» случае [11], применимость теории возмущений к расчету поправки E' к энергии вызывает сомнения, поскольку необходимое для этого соотношение $|E'| \ll |E_1|$, строго говоря, не выполняется.

В оригинальных работах [13, 14] для «трехмерного» случая было продемонстрировано, что в этой ситуации следует применить более адекватный вариационный метод.

Дальнейшие выкладки принципиально не отличаются от выкладок в работе [1], в которой была определена энергия основного состояния «двухмерного» двухэлектронного атома. Именно, сначала найдем среднее по «пробным» волновым функциям $\Psi_1^{(P)}$ (3) основного состояния значение $\langle \hat{H} \rangle$ полного гамильтониана \hat{H} двухэлектронного атома, ограничиваясь простейшим случаем. Тогда, как и в «трехмерном» варианте теории двухэлектронного атома (см. также [11]), единственным параметром варьирования является атомный номер Z , используем для него с этой целью обозначение Z' в функции $\chi_1(\xi)$ (3a):

$$\langle \hat{H} \rangle = 2\langle \hat{T} \rangle + 2\langle \hat{\Pi} \rangle + \langle \hat{\Pi}' \rangle. \quad (10)$$

Здесь $\langle \hat{T} \rangle$, $\langle \hat{\Pi} \rangle$ — средние значения кинетической и потенциальной (в поле ядра) энергий электрона в двухэлектронном атоме по «пробным» функциям $\Psi_1^{(P)}$ с упомянутой заменой в них $Z \rightarrow Z'$ и, для удобства, с переобозначением переменной $\xi \rightarrow \xi' = 2z/z'_0$, $z'_0 = \hbar^2/m(Z'e^2)$.

С учетом вида оператора

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{z_0^2} 4 \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (11)$$

и очевидного соотношения $\xi' = \xi(z_0/z'_0)$ получаем тогда после несложных вычислений с упомянутым ранее значением $\chi \rightarrow \chi_1(\xi') = \xi' e^{-\xi'/2}$ в состоянии $n = 1$ и при любом P в (2):

$$\langle \hat{T} \rangle = \frac{1}{2} (Z'\alpha)^2 mc^2. \quad (11a)$$

Кроме того, учитывая представление

$$\hat{\Pi} = -\frac{(Ze^2)}{|z|} = -\frac{2}{z_0} \frac{(Ze^2)}{|\xi|},$$

в этом же состоянии имеем

$$\langle \hat{\Pi} \rangle = -(Z\alpha)(Z'\alpha)mc^2. \quad (11b)$$

Как и должно быть, при $Z' \rightarrow Z$ получаем

$$\langle \hat{T} \rangle = -E_1, \quad \langle \hat{\Pi} \rangle = 2E_1, \quad \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{\Pi} \rangle = E_1.$$

Значение же $\langle \hat{P}' \rangle$ есть E' (8), (8а) с заменой $Z \rightarrow Z'$.

Таким образом, полная энергия $E(Z')$ «одномерного» двухэлектронного атома как функция параметра варьирования Z' равна

$$E(Z') \equiv \langle \hat{H} \rangle = \alpha^2 mc^2 \{ Z'^2 - 2ZZ' + IZ' \}, \quad (12)$$

причем выражение в скобках совпадает с соответствующим выражением в «двумерном» [1] и «трехмерном» [10, 11] вариантах теории (кроме последнего слагаемого, коэффициент при Z' в котором зависит от размерности пространства).

Согласно основной идее применяемого метода варьирования, минимальное значение $E(Z_{eff}) \equiv E_{min}$, достигаемое при $Z' = Z_{eff}$ (обозначение книги [10]), дает приблизительно энергию основного состояния. Имеем тогда

$$\begin{aligned} \frac{dE(Z')}{dZ'} = 0 &\rightarrow Z' - Z + \frac{1}{2}I = 0, \\ Z' &\rightarrow Z_{eff} = Z - \frac{1}{2}I. \end{aligned} \quad (13)$$

Подставляя это значение Z_{eff} в (12), находим для полной энергии основного состояния

$$E \approx -\alpha^2 mc^2 (Z - \sigma)^2 \quad (14)$$

со значением «постоянной экранирования» (поскольку выражение (14) получается из энергии атома $E = 2E_1 = -\alpha^2 mc^2 Z^2$ без учета взаимодействия электронов заменой $Z \rightarrow Z - \sigma$, отсюда и применяемый термин)

$$\sigma \rightarrow \sigma^{(1)} = \frac{1}{2}I = 0.20. \quad (14a)$$

Для «двумерного» и «трехмерного» атомов эти величины приблизительно одинаковы [1, 11] и равны $\sigma^{(2,3)} \approx 0.3$.

При этом значение энергии однократной ионизации $E_i = E_1 - E$ есть

$$E_i = \frac{1}{2} \alpha^2 mc^2 [2(Z - \sigma)^2 - Z^2]. \quad (15)$$

Для «одномерного» He ($Z = 2$) получается $E_i^{(1)} \approx 1.24\alpha^2 mc^2$, в то время как для «двумерного» — $E_i^{(2)} \approx 3.56\alpha^2 mc^2$ (см. по этому поводу формулу (13) работы [1]), а для «трехмерного» — $E_i^{(3)} \approx 0.85\alpha^2 mc^2$ [11].

В этих значениях E_i (и $\sigma^{(k)}$) не обнаруживается какой-либо закономерности, связывающей их с размерностью пространства. Например, в соответствии со «здравым смыслом», по-видимому, должны были

бы выполняться условия $E_i^{(1)} \left(\begin{smallmatrix} < \\ > \end{smallmatrix} \right) E_i^{(2)} \left(\begin{smallmatrix} < \\ > \end{smallmatrix} \right) E_i^{(3)}$, но этого нет. Можно лишь утверждать, что $E_i^{(2)} > E_i^{(1,3)}$ и $\sigma^{(1)} < \sigma^{(2,3)}$.

Значение энергии «собственно одномерного ортогогелия», рассчитанное вариационным методом по формуле (14) с учетом (14а), равно

$$E \rightarrow E_{var} \approx -3.24\alpha^2 mc^2 \quad (16)$$

и практически не отличается от результата (9) по теории возмущений. Стоит отметить, что эта же ситуация имеет место и в «трехмерном» варианте [11], несмотря на формальное несоблюдение условия применимости теории возмущений, как это отмечено выше.

3. ЭНЕРГИЯ «ОДНОМЕРНОГО» ДВУХЭЛЕКТРОННОГО АТОМА В ПЕРВОМ ВОЗБУЖДЕННОМ СОСТОЯНИИ. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Для первого возбужденного состояния имеем

$$E_{pert}^{(ex)} = E_1 + E_2 + E'_{12}, \quad (17)$$

где $E_{1,2}$ — рассчитываемая по формуле (4) энергия электрона в поле ядра, $E'_{12} = K_{12} - A_{12}$ — энергия их взаимодействия в «триплетном» состоянии «одномерного ортогогелия».

Согласно соотношениям (6а), (6б), кулоновский и обменный вклады при выражении через безразмерную переменную интегрирования с учетом вида функций

$$\chi_1(\xi) = \xi e^{-\xi/2}, \quad \chi_2(\xi) = \frac{\xi}{2} \left(1 - \frac{\xi}{4} \right) e^{-\xi/4}$$

в этом случае равны

$$\begin{aligned} K_{12} &= \frac{1}{32} \alpha(Z\alpha) mc^2 \times \\ &\times \left\{ \int_0^\infty d\xi \xi^2 \left(1 - \frac{\xi}{4} \right)^2 e^{-\xi/2} \int_0^\infty d\xi' \xi'^2 e^{-\xi'} \times \right. \\ &\times \left. \left[\frac{1}{|\xi - \xi'|} + \frac{1}{\xi + \xi'} \right] \right\} \equiv K_{-12} + K_{+12}, \quad (17a) \end{aligned}$$

$$A_{12} = \frac{1}{32} \alpha(Z\alpha) mc^2 \left\{ \int_0^\infty d\xi \xi^2 \left(1 - \frac{\xi}{4}\right) e^{-(3/4)\xi} \times \right. \\ \left. \times \int_0^\infty d\xi' \xi'^2 \left(1 - \frac{\xi'}{4}\right) e^{-(3/4)\xi'} \left[\frac{1}{|\xi - \xi'|} + \right. \right. \\ \left. \left. + PP' \frac{1}{\xi + \xi'} \right] \right\} \equiv A_{-12} + PP' A_{+12}, \quad (17b)$$

причем по отдельности, как упоминалось в разд. 1, вклады K_{-12} , A_{-12} обращаются в ∞ .

С другой стороны, как частный случай общего соотношения (7) имеем

$$E'_{12} = \frac{1}{32} \alpha(Z\alpha) mc^2 \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\xi' \times \\ \times \left\{ \left[\xi^2 \left(1 - \frac{\xi}{4}\right)^2 e^{-\xi/2} \xi'^2 e^{-\xi'} - \xi^2 \left(1 - \frac{\xi}{4}\right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \xi'^2 \left(1 - \frac{\xi'}{4}\right) e^{-(3/4)(\xi + \xi')} \right] \frac{1}{|\xi - \xi'|} + \right. \\ \left. + \left[\xi^2 \left(1 - \frac{\xi}{4}\right)^2 e^{-\xi/2} \xi'^2 e^{-\xi'} - PP' \xi^2 \left(1 - \frac{\xi}{4}\right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \xi'^2 \left(1 - \frac{\xi'}{4}\right) e^{-(3/4)(\xi + \xi')} \right] \frac{1}{\xi + \xi'} \right\}.$$

В более компактной форме это выражение можно записать в виде

$$E'_{12} = \frac{1}{32} \alpha(Z\alpha) mc^2 \left\{ I'_{12}^{(-)} + I'_{12}^{(+)} \right\}. \quad (18)$$

Как уже упоминалось, интеграл

$$I'_{12}^{(-)} = \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\xi' \xi^2 \xi'^2 \left(1 - \frac{\xi}{4}\right) e^{-(3/4)(\xi + \xi')} \times \\ \times \left[\left(1 - \frac{\xi}{4}\right) e^{-(1/4)(\xi' - \xi)} - \left(1 - \frac{\xi'}{4}\right) \right] \frac{1}{|\xi - \xi'|} \quad (18a)$$

является, как (естественно) и зависящий от относительной четности PP' электронных состояний интеграл

$$I'_{12}^{(+)} = \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\xi' \xi^2 \xi'^2 \left(1 - \frac{\xi}{4}\right) e^{-(3/4)(\xi + \xi')} \times \\ \times \left[\left(1 - \frac{\xi}{4}\right) e^{-(1/4)(\xi' - \xi)} - PP' \left(1 - \frac{\xi'}{4}\right) \right] \times \\ \times \frac{1}{|\xi + \xi'|}, \quad (18b)$$

конечным, так как выражение в квадратных скобках (18a) при $\xi = \xi'$ обращается в нуль с отсутствием расходимости в этой «кулоновской» точке.

Численный расчет дает

$$I'_{12}^{(-)} \approx 4.52, \quad (19a)$$

$$I'_{12}^{(+)} \approx \left\{ \begin{array}{ll} 2.39, & PP' = 1 \\ 2.71, & PP' = -1 \end{array} \right\}. \quad (19b)$$

Как следует из (19a), (19b), значение относительной четности PP' электронных состояний сравнительно мало влияет на энергию взаимодействия E'_{12} электронов в первом возбужденном состоянии «одномерного ортогогелия», которая, согласно (18), (19a), (19b), имеет вид

$$E'_{12} = I'_{12} \alpha(Z\alpha) mc^2, \quad (20)$$

$$I'_{12} \approx \frac{1}{32} \left\{ \begin{array}{ll} 6.91, & PP' = 1 \\ 7.23, & PP' = -1 \end{array} \right\}. \quad (20a)$$

Таким образом, полная энергия (17) в первом возбужденном состоянии по теории возмущений в зависимости от значения относительной четности $PP' = \pm 1$ приблизительно равна

$$E_{pert(\pm)}^{(ex)} \approx -\frac{1}{8} \left[5Z - \left\{ \begin{array}{ll} 1.73, & PP' = 1 \\ 1.81, & PP' = -1 \end{array} \right\} \right] \times \\ \times \alpha(Z\alpha) mc^2. \quad (21)$$

В частности, для гелия получаем

$$E_{pert(\pm)}^{(ex)} \approx - \left[2.50 - \left\{ \begin{array}{ll} 0.43, & PP' = 1 \\ 0.45, & PP' = -1 \end{array} \right\} \right] \times \\ \times \alpha^2 mc^2. \quad (22)$$

Отсюда видно, что, строго говоря, первым возбужденным состоянием «собственно одномерного ортогогелия» следует называть состояние с относительной четностью $PP' = 1$ и энергией

$$E_{pert(+)}^{(ex)} \approx -2.07 \alpha^2 mc^2, \quad (22a)$$

а состояние с относительной четностью $PP' = -1$ и энергией

$$E_{pert(-)}^{(ex)} \approx -2.05 \alpha^2 mc^2 \quad (22b)$$

— вторым возбужденным состоянием, так как $E_{pert(+)}^{(ex)} < E_{pert(-)}^{(ex)}$, хотя соответствующие энергетические уровни и являются чрезвычайно близкими, образуя дублет.

4. ЭНЕРГИЯ «ОДНОМЕРНОГО» ДВУХЭЛЕКТРОННОГО АТОМА В ПЕРВОМ ВОЗБУЖДЕННОМ СОСТОЯНИИ. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

Схема рассуждений аналогична расчету энергии основного состояния вариационным методом в разд. 2. Именно, формула вида (10) записывается теперь как

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle_1 + \langle \hat{T} \rangle_2 + \langle \hat{\Pi} \rangle_1 + \langle \hat{\Pi} \rangle_2 + \langle \hat{\Pi}' \rangle, \quad (23)$$

где

$$\langle \hat{T} \rangle_1 = \frac{(Z'\alpha)^2 mc^2}{2}, \quad \langle \hat{T} \rangle_2 = \frac{(Z'\alpha)^2 mc^2}{8} \quad (23a)$$

— средние значения кинетической энергии в состояниях соответственно $n = 1, 2$, так что

$$\langle \hat{T} \rangle_1 + \langle \hat{T} \rangle_2 = \frac{5}{8} (Z'\alpha)^2 mc^2. \quad (24a)$$

Аналогично можно получить для суммарной потенциальной энергии электронов в поле ядра:

$$\langle \hat{\Pi} \rangle_1 + \langle \hat{\Pi} \rangle_2 = -\frac{5}{4} (Z\alpha)(Z'\alpha) mc^2, \quad (24b)$$

а значение $\langle \hat{\Pi}' \rangle$, очевидно, определяется формулой (20) с заменой $Z \rightarrow Z'$.

Тогда полная энергия как функция параметра варьирования записывается в аналогичном выражении (12) виде

$$E(Z') \equiv \langle \hat{H} \rangle = \frac{5}{8} \alpha^2 mc^2 \{ Z'^2 - 2ZZ' + 2\sigma_{PP'} Z' \}, \quad (25)$$

причем, согласно (20), (20a), введено обозначение

$$\sigma_{PP'} \approx \left\{ \begin{array}{ll} 0.17, & PP' = 1 \\ 0.18, & PP' = -1 \end{array} \right\}. \quad (25a)$$

Найденное из (25) процедурой варьирования значение энергии первого возбужденного состояния «одномерного ортогогелия» равно

$$E_{var} = -\frac{5}{8} \alpha^2 mc^2 Z_{eff}^2, \quad (26a)$$

$$Z_{eff} = Z - \sigma_{PP'}. \quad (26b)$$

Значение E_{var} получается из энергии атома $E_a^{(0)}$ без учета взаимодействия электронов

$$E_a^{(0)} = E_1 + E_2 = -\frac{5}{8} \alpha^2 mc^2 Z^2$$

заменой $Z \rightarrow Z_{eff}$, т.е. величина $\sigma_{PP'}$ (25a) есть «постоянная экранирования» в рассматриваемом

возбужденном состоянии «одномерного ортогогелия», слабо зависящая от относительной четности PP' электронных состояний.

Тогда находим, что, согласно вариационному методу, значения энергии «собственно одномерного ортогогелия» $E_{var(\pm)}^{(ex)}$ в возбужденном состоянии в зависимости от относительной четности $PP' = \pm 1$ таковы:

$$E_{var(+)}^{(ex)} \approx -2.09 \alpha^2 mc^2, \quad (27a)$$

$$E_{var(-)}^{(ex)} \approx -2.07 \alpha^2 mc^2. \quad (27b)$$

Таким образом, оба применяемых в работе метода для возбужденного состояния, как и в аналогичной ситуации для основного (разд. 2), дают приблизительно одинаковый результат: выражения (27a), (27b) практически совпадают с выражениями (22a), (22b) по теории возмущений, оставляя при этом энергетический уровень дублета с $PP' = 1$ в качестве первого возбужденного состояния, а с $PP' = -1$ — второго.

5. ВЫВОДЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Из результатов разд. 2, 4 следует, что «постоянная экранирования» σ в основном (14a) и возбужденном (25a) состояниях «одномерного ортогогелия» приблизительно одинакова и с целью оценки ее можно положить равной $\sigma \approx 0.2$ независимо от значения PP' в возбужденных состояниях. Но тогда вероятность однофотонного перехода, например, «собственно одномерного ортогогелия» из возбужденных состояний, по крайней мере, по порядку величины должна совпадать с вероятностью W_{21} перехода $n = 2 \rightarrow n = 1$ в «одномерном» водородоподобном атоме (формула (17a) нашей работы [10]) с заменой в последней $Z \rightarrow Z - \sigma$ со значениями $Z = 2$, $\sigma \approx 0.2$. В таком случае нетрудно получить значение ширины $\Delta\omega \approx W_{21}$ спектральных линий основного дублета «собственно одномерного ортогогелия»: $\Delta\omega \sim 10^{-7} \alpha^2 (c/\lambda_C)$. Частоты линий дублета при использовании вариационного метода, в соответствии с (16), (27a), (27b), равны $\omega_{1,2} \approx \{1.15; 1.17\} \alpha^2 (c/\lambda_C)$, поэтому «перекрытия» линий нет и, в принципе, он наблюдаем.

Обнаружение такого дублета в спектре излучения магнитаров с большой степенью достоверности означало бы наличие сверхсильных магнитных полей (2) в окрестности этих астрофизических объектов, а также подтвердило бы статус четности $P = \pm 1$ электронного состояния в «одномерном» ато-

ме гелия как «хорошего» квантового числа, по крайней мере, в рассмотренных низших возбужденных состояниях атома.

С другой стороны, постановка соответствующего эксперимента в лабораторных условиях также была бы весьма желательной для проверки наших результатов, в том числе для установления адекватности методов теории возмущений или вариационного применительно к данной проблеме (в «трехмерном» варианте, например, вариационный метод при близких значениях получаемых результатов для энергии, как это следует из прецизионных экспериментов, оказывается все же более точным [10, 11]).

Заметим также, что на другой способ идентификации сверхсильных магнитных полей магнитаров по почти двукратному уменьшению ширины α -линии серии Лаймана в сравнении со случаем отсутствия магнитного поля было указано в нашей работе [8].

Я благодарю С. В. Копылова за помощь в численных расчетах, а также В. П. Красина за информационную поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Скобелев, ЖЭТФ **152**, 1241 (2017).
2. A. Gorlitz et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 130402 (2001).
3. U. Eichmann, V. Lange, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **64**, 274 (1990).
4. K. Richter and D. Wintgen, Phys. Rev. Lett. **65**, 1965 (1990).
5. A. Lopez-Castillo, M. A. M. de Aguiar, and A. M. Ozorio de Almeida, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **29**, 197 (1996).
6. Н. Я. Виленкин, *Специальные функции и теория представлений групп*, Наука, Москва (1965).
7. В. В. Скобелев, Изв. вузов, физика **57**(8), 33 (2014).
8. В. В. Скобелев, ЖЭТФ **151**, 1031 (2017).
9. R. London, Amer. J. Phys. **27**, 649 (1959).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. III, *Квантовая механика, Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
11. А. А. Соколов, Ю. М. Лоскутов, И. М. Тернов, *Квантовая механика*, Учпедгиз, Москва (1962).
12. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
13. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **63**, 291 (1930).
14. E. A. Hylleraas, Z. Phys. **63**, 771 (1930).