

АТОМ ВОДОРОДА: УЧЕТ СОБСТВЕННОГО ПОЛЯ ЭЛЕКТРОНА

Л. В. Бигуаа^{1,*}, В. В. Кассандров^{2,**}

¹ Центр квантовых технологий Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова, Москва

² Институт гравитации и космологии Российского университета
дружбы народов, Москва

Обосновывается необходимость «непертурбативного» учета взаимодействия электрона с собственным электромагнитным полем в канонической проблеме релятивистской квантовой механики относительно атома водорода. Математически задача сводится к нахождению спектра всюду регулярных аксиально-симметричных решений самосогласованной системы уравнений Дирака и Максвелла — классического аналога операторных уравнений квантовой электродинамики — в присутствии внешнего кулоновского потенциала. Показано, что только нахождение определенных классов решений, «нелинейных» аналогов *s*- и *p*-состояний, возможно при использовании метода разложения в ряд по параметру постоянной тонкой структуры α . В нулевом приближении по $\alpha \rightarrow 0$ имеет место редукция к самосогласованной нерелятивистской системе уравнений Шредингера–Пуассона. Для последней численными и вариационными методами получены решения, отвечающие основному и большому набору возбужденных состояний. Спектр энергий связи с очень хорошей точностью воспроизводит «боровскую» зависимость $W_n = W/n^2$. При этом энергия ионизации W оказывается универсальной, но примерно вдвое меньше наблюдаемой. Обсуждается проблема вычисления релятивистских поправок к энергиям уровней и связь рассматриваемой модели с представлениями и методами квантовой электродинамики.

We substantiate the need for account of the proper electromagnetic field of the electron in the canonical problem of hydrogen in relativistic quantum mechanics. From a mathematical viewpoint, the goal is equivalent to determination of the spectrum of everywhere regular solutions to the self-consistent system of Dirac and Maxwell equations (with external Coulomb potential). We demonstrate that only particular classes of solutions, “nonlinear” analogues of *s*- and *p*-states, can be obtained through decomposition of a solution in a series, with respect to the fine structure constant parameter α . In the zero approximation at $\alpha \rightarrow 0$ the reduction to the self-consistent non-relativistic system of the Schrödinger–Poisson equations takes place. For the latter, using both numerical

*E-mail: leon.006w@yandex.ru

**E-mail: vkassan@sci.pfu.edu.ru

and variational methods, we obtain the solutions corresponding to the ground and set of excited states. Spectrum of the bound energies with remarkable precision reproduces the “Bohrian” dependence $W_n = W/n^2$. For this, the ionization energy W proves to be universal yet about two times smaller than its observed value. The problem of account for relativistic corrections to the bound energies and links of the model with representations and methods of quantum electrodynamics are considered.

PACS: 03.50.-z; 03.65.-w; 03.65.-Pm

1. АТОМ ВОДОРОДА И КЛАССИЧЕСКИЕ ПОЛЕВЫЕ МОДЕЛИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

Хорошо известно, что именно успешное описание спектра излучения водородного атома сначала в теории Бора, а затем решениями уравнения Шредингера послужило одной из главных мотиваций начального развития квантовой теории. Позже П. Дирак почти идеально описал наблюдаемый спектр водорода, используя свое релятивистское обобщение уравнения Шредингера. Обнаруженное впоследствии небольшое расхождение с экспериментом («лэмбовский» сдвиг между уровнями $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ в атоме водорода) было интерпретировано как эффект взаимодействия электрона с вакуумными флюктуациями электромагнитного поля и объяснено в рамках квантовой электродинамики (КЭД) с использованием аппарата вторичного квантования.

Тем не менее задача описания атома водорода до сих пор привлекает внимание исследователей и, в некотором смысле, является пробным «оселком» для многих новых теоретических конструкций. Можно, в частности, получить спектр энергии чисто алгебраическими методами [1]. Широкое хождение имеют теории «суперсимметричного» атома водорода [2]. Более того, в рамках классических представлений спектр можно объяснить отсутствием излучения при движении электрона по определенным, «устойчивым» орбитам. Такой эффект может быть связан с балансом излучения и поглощения энергии из гипотетического случайного электромагнитного фона, в рамках представлений *стохастической электродинамики* [3], либо имеет место в солитонных моделях атома водорода [4].

Из трудностей, связанных с описанием атома водорода и встречаемых канонической релятивистской квантовой механикой и КЭД, можно отметить «странную» сингулярность $r^{-\alpha}$, $\alpha = e^2/\hbar c \approx 0,007$ дираковской волновой функции в нуле для *s*- и *p*-состояний, возникающую вопреки исходному требованию регулярности решений. Не вполне корректным представляется и учет магнитного поля протона лишь по теории возмущений, поскольку в окрестности нуля магнитный потенциал имеет порядок $1/r^2$ и доминирует над кулоновским. Такая проблема поднималась, в частности, в работе [5]

(см. также [6]), где рассматривалась связанные с этим возможность построения *магнитной теории ядерных сил*.

Особую остроту имеет, однако, проблема учета собственного электромагнитного поля электрона. С точки зрения квантовых представлений электрон в атоме водорода представляет собой *пространственно-распределенную* в соответствии с плотностью вероятности $\Psi^+\Psi$ -систему, элементы которой взаимодействуют не только с полем ядра, но и между собой. Поскольку заряд электрона равен по модулю заряду протона, поле последнего на больших расстояниях оказывается *экранированным*.

Известно, что для *многоэлектронных* атомов учет самосогласованного коллективного поля электронов представляется необходимым и феноменологически реализуется, например, в методе Хартри–Фока. Однако единая многоэлектронная волновая функция ничем принципиально не отличается от одноэлектронной. При этом учет самодействия пространственно распределенной плотности заряда электрона вовсе не противоречит принятым в настоящее время представлениям о его «точечности» (см. в этой связи дискуссию в [7, 8]).

Заметим еще, что аналогичный эффект *гравитационного* самодействия «свободной» квантовой частицы предлагался в работах [9–11] и др. в контексте гипотезы об объективном характере процесса *редукции* волновой функции частицы.

Следует отметить, что проблема учета собственного поля (собственной энергии) электрона и его влияния на наблюдаемые уровни энергии является одной из центральных в контексте КЭД (см., например, [12]). Согласно господствующим представлениям эффект связан с взаимодействием электрона с *вторично квантованным* электромагнитным полем «вакуумных флуктуаций» [13]. Вычисление его величины по теории возмущений (см., например, [14]) приводит к бесконечным значениям сдвига уровней энергии, после перенормировки массы сводящимся, однако, к прекрасно согласующимся с экспериментом значениям *радиационных поправок* («лэмбовскому сдвигу» и др.).

Между тем известны попытки воспроизвести все основные результаты КЭД без использования процедуры вторичного квантования. Так, подход А. О. Барута [15–17] основан на анализе самосогласованной системы уравнений Дирака–Максвелла, изучаемой в данной работе, и по существу является чисто классическим. Тем не менее с использованием теории возмущений и простой процедуры регуляризации удается в точности воспроизвести все радиационные поправки, обычно вычисляемые в формализме КЭД.

Однако эффект влияния собственного поля электрона, как выше отмечено, является «непертурбативным» и не сводится к радиационным поправкам. Его учет полностью меняет математическую структуру модели, делая ее *существенно нелинейной*. Можно предполагать, что возникновение расходи-

мостей в подходе Барута (и, соответственно, в самой КЭД) связано именно с отсутствием точного решения исходной классической системы Дирака–Максвелла, которое могло бы выступать в роли начального приближения в используемой схеме теории возмущений [18].

Мы естественно приходим, таким образом, к рассмотрению регулярных решений самосогласованной, эффективно нелинейной системы связанных уравнений Дирака и Максвелла (при наличии дополнительного внешнего кулоновского поля протона). Заметим, что системы уравнений такого типа уже рассматривались ранее в контексте построения интересного класса *классических солитонных моделей элементарных частиц*.

Такого рода модели основаны на хорошо проверенных линейных уравнениях поля — Шредингера, Клейна–Гордона, Дирака, Максвелла*. При этом эффективная нелинейность возникает только как следствие взаимодействия между различными полями, вид которого вполне определен требованием калибровочной инвариантности.

Основоположником такого подхода может считаться Н. Розен, который в работе [19] рассмотрел стационарные сферически-симметричные, так называемые *частицеподобные* (т. е. всюду регулярные с конечными нетеровскими интегралами движения) решения системы уравнений Клейна–Гордона и Максвелла с минимальным электромагнитным взаимодействием между ними.

Позже подобный подход был перенесен на (математически гораздо более сложную) систему уравнений Дирака–Максвелла с минимальным электромагнитным взаимодействием между полями [20–23]. Особенно интересно, что эта система является *классическим аналогом операторных уравнений квантовой электродинамики*. Было показано, в частности, что в рамках такой модели можно единым образом описать заряженные фермионы *любого полуцелого спина* [21, 24].

Однако реальные свойства частиц непосредственно проявляются лишь при их движении во внешних, в частности, электромагнитных полях. Рассмотрение соответствующих *нестационарных* частицеподобных решений весьма затруднительно. В этой связи стационарные решения системы уравнений Дирака–Максвелла *в присутствии внешнего кулоновского потенциала*, отвечающие в рассматриваемом подходе атому водорода с учетом собственного поля электрона, опять-таки оказываются физически привлекательными, а математически вполне доступными для исследования.

Для *водородоподобных* атомов регулярные решения *нерелятивистского* аналога рассматриваемой системы — самосогласованной системы уравнений Шредингера–Пуассона — обсуждались в работе [18], однако именно

*Либо на полевых структурах с «естественной» структурой нелинейности — уравнениях Янга–Миллса и/или Эйнштейна.

для случая «чистого» водорода ($Z = 1$) искомого решения не удалось получить. Предварительное рассмотрение и нахождение частицеподобных (в современной терминологии *солитоноподобных*) решений в *релятивистской* модели Дирака–Максвелла для атома водорода было предпринято в работе [25] (см. также [26]). В настоящей статье мы уточняем и развиваем результаты этих предшествующих работ.

2. УРАВНЕНИЯ ПОЛЯ И ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕШЕНИЙ

В пространстве Минковского M с метрикой $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}\{+1, -1, -1, -1\}$ и координатами $\{X^\mu\}$, $\mu = 0, 1, 2, 3$, рассматривается самосогласованная система уравнений Дирака–Максвелла, соответствующая лагранжиану вида

$$L = -\frac{1}{16\pi}F^2 + \frac{\hbar c}{2}\{i\bar{\Psi}\gamma^\mu\partial_\mu\Psi - i\partial_\mu\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi - 2k\bar{\Psi}\Psi\} + eA_\mu\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi. \quad (1)$$

Здесь $\partial_\mu := \partial/\partial X^\mu$, $\{\gamma^\mu\}$ — 4×4 -матрицы Дирака в каноническом представлении; Ψ — дираковский биспинор, $\bar{\Psi} := \Psi^+\gamma^0$; $\{A_\mu\}$ — 4-потенциалы электромагнитного (ЭМ) поля; $F^2 = F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ — основной инвариант, выраженный через тензор напряженности ЭМ-поля $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$.

Предполагается, что скалярный потенциал A_0 включает, помимо регулярной части, еще и фиксированную сингулярную часть $A_0^{\text{ex}} = e/R$, где e — элементарный заряд. Эта часть отвечает внешнему кулоновскому полю протона.

Что касается величин \hbar, k , то они, вообще говоря, представляют собой некоторые *масштабные коэффициенты*, численное значение которых следует фиксировать из сравнения характеристик некоторого *эталонного* решения (отвечающего, например, невозбужденному состоянию атома водорода) с экспериментальными значениями. Из соответствия квантовой теории следует, однако, ожидать, что эти величины отвечают каноническим константам — постоянной Планка ($\hbar = h/2\pi$) и комптоновской длине электрона $k = mc/\hbar$, где m — масса электрона.

Варьируя действие $S = \int Ld^4x$ по $\bar{\Psi}$ и A_μ и наложив на потенциалы калибровочное условие Лоренца $\partial_\mu A^\mu = 0$, получаем уравнения поля вида

$$i\gamma^\mu(\partial_\mu - i(e/\hbar c)(A_\mu + A_\mu^{\text{ex}})\Psi - k\Psi = 0, \quad \square A^\mu = 4\pi e\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi, \quad (2)$$

где $A_\mu^{\text{ex}} = \{e/R, 0, 0, 0\}$.

Наложим теперь на искомые решения системы (2) условие *электронейтральности* $|Q| = e$, т. е. условие равенства модуля заряда электронного

распределения $Q = -e \int \Psi^+ \Psi d^3X$ заряду протона e . Выполнение такого условия эквивалентно следующему:

$$\int \Psi^+ \Psi d^3X = 1 \quad (3)$$

и автоматически гарантирует нормировку «волновой функции» электронного распределения, хотя изначально поле Ψ можно рассматривать как классическое*.

Используя масштабные преобразования координат (переводящие длины к комптоновской шкале) и полевых функций вида

$$X_\mu \mapsto \frac{x_\mu}{k}, \quad A_\mu \mapsto \frac{ke}{\alpha} a_\mu, \quad \Psi \mapsto \left(\frac{k^3}{4\pi\alpha} \right)^{1/2} \psi, \quad (4)$$

приходим к лагранжиану

$$l = -\frac{1}{16\pi} f^2 + \frac{1}{8\pi} \{ i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - i\partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi - 2\bar{\psi} \psi + 2(a_\mu + a_\mu^{\text{ex}}) \bar{\psi} \gamma^\mu \psi \}, \quad (5)$$

$$a_\mu^{\text{ex}} = \left\{ \frac{\alpha}{r}, 0, 0, 0 \right\},$$

и соответствующим ему уравнениям поля

$$i\gamma^\mu (\partial_\mu - i(a_\mu + a_\mu^{\text{ex}}))\psi - \psi = 0, \quad \square a^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi, \quad (6)$$

не содержащим никаких размерных параметров. Единственный *безразмерный* параметр — постоянная тонкой структуры $\alpha := e^2/\hbar c \approx 1/137$ — входит при этом только в выражение для кулоновского потенциала $a_0^{\text{ex}} = \alpha/r$ и в условие электронейтральности/нормировки, которое в безразмерных переменных принимает вид

$$\frac{1}{4\pi} \int \psi^+ \psi d^3x = \alpha. \quad (7)$$

Заметим теперь для дальнейшего, что размерные характеристики, отвечающие первоначальному лагранжиану (1), связаны с соответствующими безразмерными величинами, извлекаемыми из (5) и выписанными в разд. 4, следующим образом:

- для лагранжиана

$$L = \frac{\hbar ck^4}{\alpha} l; \quad (8)$$

* В линейной задаче нормировка достигается умножением на подходящую константу, что не влияет на энергетические уровни. В нашем нелинейном случае для выполнения условия нормировки необходима нетривиальная процедура (подробнее см. разд. 5), а характеристики нормированных и ненормированных решений различны.

- для энергии

$$W = \frac{\hbar c k}{\alpha} w \equiv \frac{mc^2}{\alpha} w; \quad (9)$$

- для вектора полного углового момента

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{\alpha} \mathbf{j}; \quad (10)$$

- для электрического заряда (при выполнении (7))

$$Q = -e; \quad (11)$$

- для вектора магнитного момента

$$\mathbf{M} = \frac{e}{k\alpha} \mathbf{m} \equiv \frac{1}{\alpha} \left(\frac{e\hbar}{mc} \right) \mathbf{m}. \quad (12)$$

В дальнейшем нашей основной задачей будет получение регулярных решений системы уравнений (6) в калибровке Лоренца и с условием электронейтральности (7); при этом мы ограничимся рассмотрением *стационарных* решений вида

$$\psi^T = \{\kappa^T(\mathbf{r}), \chi^T(\mathbf{r})\} e^{-i\omega t}, \quad a_\mu = \{\phi(\mathbf{r}), \mathbf{a}(\mathbf{r})\}, \quad (13)$$

где κ, χ — 2-спиноры; ϕ, \mathbf{a} — скалярный и векторный электромагнитные потенциалы соответственно, а символ T отвечает операции транспонирования.

3. α -РАЗЛОЖЕНИЕ И НЕРЕЛЯТИВИСТСКИЙ ПРЕДЕЛ $\alpha \rightarrow 0$

В стационарном случае (13) основная система уравнений (6) принимает вид

$$\begin{aligned} \Sigma \cdot (i\nabla - \mathbf{a})\chi &= (\omega + \phi + \alpha/r - 1)\kappa, \\ \Sigma \cdot (i\nabla - \mathbf{a})\kappa &= (\omega + \phi + \alpha/r + 1)\chi, \\ \Delta\phi &= \kappa^+\kappa + \chi^+\chi, \\ \Delta\mathbf{a} &= \kappa^+\Sigma\chi + \chi^+\Sigma\kappa \end{aligned} \quad (14)$$

с условием электронейтральности $(4\pi)^{-1} \int (\kappa^+\kappa + \chi^+\chi) d^3x = \alpha$. Здесь $\Sigma = \{\Sigma_a\}$, $a = 1, 2, 3$, — набор матриц Паули в стандартном представлении.

Произведем теперь еще одно преобразование координат и полевых функций [25], переводящее масштабы длин к «боровским» и позволяющее затем

осуществить разложение решений по малому параметру α . А именно, введем новые координаты \mathbf{X} , 2-спиноры K, N и потенциалы Φ, \mathbf{A} (не путать с начальными размерными) следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \frac{\mathbf{X}}{\alpha(1+\omega)}, \quad \kappa = \alpha^2(1+\omega)^{3/2}K, \quad \chi = \alpha^3(1+\omega)^{3/2}N, \\ \phi &= \alpha^2(1+\omega)\Phi, \quad \mathbf{a} = \alpha^3(1+\omega)\mathbf{A}, \end{aligned} \quad (15)$$

после чего система (14) примет форму

$$\begin{aligned} \Sigma \cdot (i\nabla - \alpha^2 \mathbf{A})N &= \left(-\varepsilon + \Phi + \frac{1}{R}\right) K, \\ \Sigma \cdot (i\nabla - \alpha^2 \mathbf{A})K &= \left(1 + \alpha^2 \left(\Phi + \frac{1}{R}\right)\right) N, \\ \Delta\Phi &= K^+K + \alpha^2 N^+N \end{aligned} \quad (16)$$

с дополнительным уравнением для магнитного потенциала

$$\Delta\mathbf{A} = K^+ \Sigma N + N^+ \Sigma K, \quad (17)$$

а условие электронейтральности примет вид $(4\pi)^{-1} \int (K^+K + \alpha^2 N^+N) d^3X = 1$. Здесь «приведенная частота»

$$\varepsilon := \frac{1-\omega}{\alpha^2(1+\omega)}, \quad (18)$$

причем из анализа асимптотик следует (см. ниже), что убывающие на бесконечности решения (16) могут существовать лишь при $|\omega| < 1$, так что параметр ε всегда положителен.

Новая форма уравнений (16) удобна тем, что с учетом малости параметра α позволяет согласованным образом рассмотреть «нулевое» приближение по $\alpha \rightarrow 0$. Действительно, отбрасывая члены $\sim \alpha^2$, получим для первых трех уравнений (16) и условия электронейтральности

$$\begin{aligned} i\Sigma \cdot \nabla K &= N, \\ i\Sigma \cdot \nabla N &= \left(-\varepsilon + \Phi + \frac{1}{R}\right) K, \\ \Delta\Phi &= K^+K, \quad (4\pi)^{-1} \int K^+K d^3X = 1. \end{aligned} \quad (19)$$

Система (19) замкнута, содержит единственный подлежащий определению параметр ε и не включает в себя членов с магнитным потенциалом. Напротив, последний может быть определен по предварительно найденным решениям предельной системы (19) интегрированием уравнения (17). При этом сама система (19) после подстановки выражения для 2-спинора N из первого

уравнения во второе сводится к одному уравнению второго порядка для основного 2-спинора K . После несложных преобразований получим следующую окончательную форму системы в основном приближении по α :

$$\begin{aligned}\Delta K &= \left(\varepsilon - \Phi - \frac{1}{R} \right) K, \\ \Delta \Phi &= K^+ K, \quad (4\pi)^{-1} \int K^+ K d^3 X = 1.\end{aligned}\tag{20}$$

Система (20) по структуре близка (но не тождественна) к самосогласованной системе уравнений Шредингера–Ньютона, заслужившей в свое время внимание благодаря вышеупомянутым идеям Л. Дайоси [9], Р. Пенроза [10] и др. о возможной самогравитирующей природе процесса редукции волновой функции квантовой частицы. В частности, в работах [11, 28] численным методом был получен спектр стационарных сферически-симметричных регулярных решений системы Шредингера–Ньютона.

От нашей системы уравнений (20) система Шредингера–Ньютона отличается отсутствием внешнего кулоновского (ニュートンовского) потенциала и знаком потенциала в первом из уравнений типа (20) (что связано с разными знаками гравитационного и электростатического взаимодействий). Нетрудно видеть, что на самом деле (20) представляет собой самосогласованную систему уравнений Шредингера–Пуассона (расписанную для случая стационарных решений), так что переход к пределу $\alpha \rightarrow 0$ и системе (19) либо (20) по существу представляет собой *нерелятивистское приближение исходной системы Дирака–Максвелла*.

Именно решения в этом приближении и будут ниже основным предметом изучения. Вопрос же о нахождении *релятивистских поправок* весьма сложен, поскольку, как мы увидим ниже, приводит в общем случае к бесконечной цепочке уравнений для радиальных функций.

Следует отметить, что система уравнений типа (20) неоднократно предлагалась в качестве физически оправданной альтернативы линейному уравнению Шредингера. Еще сам Э. Шредингер обсуждал необходимость рассматривать «пространственное распределение» заряда электронов, в том числе и в случае многоэлектронных атомов [27, с. 116], и возможность введения в этой связи «потенциала нейтрализации» [27, с. 175], т. е. потенциала собственного поля электронов. Подробное освещение этих вопросов можно найти в статье [7].

Впервые, насколько известно авторам, попытка получить сами регулярные решения системы (20) и соответствующие им значения энергий связи были предприняты в работах [25] и [18]. В последней эти решения находились для низших s -состояний (с $n = 1, 2, 3$) при различных значениях заряда Ze ядра водородоподобных атомов; при этом использовался метод последовательных итераций, а в качестве первого приближения выбирались волновые функции канонической линейной квантово-механической задачи.

Однако полученные сдвиги уровней, как и следовало ожидать, оказались значительными, и для соответствия наблюдаемым значениям авторами предлагалось использовать аналог процедуры перенормировки. Между тем корректность самой процедуры нахождения решений вызывает сомнения*. Так или иначе, но именно для наиболее важного случая «самого» водорода ($Z = 1$) величину сдвига определить не удалось.

Мы в работах [25, 26] и ниже используем более надежный метод численного решения системы типа (20), подкрепляя его вариационным методом (в классе тех же пробных функций линейной квантово-механической задачи). Кроме того, используя найденные решения, можно определить магнитный потенциал и момент электрона в различных состояниях атома водорода, интегрируя уравнение (17).

4. АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНЫЕ РЕШЕНИЯ. ВЫДЕЛЕНИЕ УГОЛОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ И ПРОБЛЕМА «ЗАЦЕПЛЕНИЯ» ГАРМОНИК

Строго говоря, подлежащая изучению система уравнений (19) не имеет сферически-симметричных решений в силу спинорной природы функций K, N , а также присутствия магнитного потенциала поля электрона, вычисляемого по дополнительному уравнению (17). Однако саму по себе конечную систему (20) можно привести к уравнению для одной сферической гармоники, отвечающей основному 2-спинору K , и соответствующему ей потенциальному Φ . Действительно, предполагая последний сферически-симметричным, видим, что угловая зависимость в уравнениях для спинорных функций в (19) может быть выделена любой парой соответствующих шаровых спиноров, т. е. вполне аналогично линейной задаче квантовой механики.

Правда, соответствующая плотность электрического заряда $\sim K^+K$ в правой части (19) вовсе не обязана при этом быть сферически-симметричной, так что эта система оказывается незамкнутой и требует введения дополнительных гармоник потенциала (отвечающих квадрупольному и высшим четным моментам). В свою очередь, неизбежное возникновение этих гармоник требует введения соответствующих пар шаровых спиноров более высоких порядков и т. д. Такое положение дел ведет к необходимости рассмотрения бесконечной цепочки уравнений для радиальных функций, обосновать

*Не ясно, проверялось ли сохранение условия нормировки волновой функции в процессе итераций. Кроме того, выражение для энергии связи помимо члена, отвечающего собственным значениям «обычной» квантово-механической энергии ϵ , должно включать и собственную энергию поля электрона, см. ниже (35).

обрыв которой трудно в силу отсутствия какого-либо малого параметра. Этот вопрос был в свое время подробно рассмотрен в [24].

Единственную возможность получить замкнутую систему уравнений дает выбор таких исходных пар шаровых спиноров, для которых соответствующая плотность электрического заряда оказывается сферически-симметричной (в дальнейшем для упрощения записи мы переобозначаем радиальную переменную как $R \mapsto r$).

Тем самым выбор угловой зависимости полевых функций оказывается ограниченным следующими двумя возможностями, отвечающими, с точки зрения канонической квантовой механики, s - и p -состояниям с собственными значениями оператора *орбитального* момента количества движения $l = 0, 1$ соответственно:

Анзац **A**:

$$\Phi = \phi(r), \quad K = k(r) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad N = in(r) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (21)$$

или, после перестановки $K \leftrightarrow N$, — анзац **B**:

$$\Phi = \phi(r), \quad K = ik(r) \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad N = n(r) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Заметим, что, помимо двух приведенных выше типов угловой зависимости, возможны еще две подстановки:

$$\Phi = \phi(r), \quad K = k(r) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad N = in(r) \begin{pmatrix} -\sin \theta e^{-i\varphi} \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (23)$$

или

$$\Phi = \phi(r), \quad K = ik(r) \begin{pmatrix} -\sin \theta e^{-i\varphi} \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad N = n(r) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

сопряженные анзацам **A** и **B** соответственно. Нетрудно, однако, проверить, что они приводят к тому же виду системы (20), а соответствующие решения отличаются только знаками *проекций* магнитного момента и полного момента количества движения. Поэтому мы не будем отдельно рассматривать их в дальнейшем.

Для обеих подстановок **A** и **B** основная система уравнений (19) и следующая из нее система (20) оказываются совместными и замкнутыми. А именно,

для случая **A** получаем

$$\begin{aligned} k' &= n, \quad n' + \left(\frac{2}{r}\right) n = \left(\varepsilon - \phi - \left(\frac{1}{r}\right)\right) k \\ &\mapsto k'' + \left(\frac{2}{r}\right) k' = \left(\varepsilon - \phi - \left(\frac{1}{r}\right)\right) k, \\ \phi'' + \left(\frac{2}{r}\right) \phi' &= k^2, \quad \int k^2 r^2 dr = 1, \\ \lambda'' + \left(\frac{2}{r}\right) \lambda' - \left(\frac{2}{r^2}\right) \lambda &= 2kk', \end{aligned} \tag{25}$$

а для случая **B** будем иметь

$$\begin{aligned} k' + \left(\frac{2}{r}\right) k &= -n, \quad n' = -\left(\varepsilon - \phi - \left(\frac{1}{r}\right)\right) k \\ &\mapsto k'' + \left(\frac{2}{r}\right) k' - \left(\frac{2^2}{r}\right) k = \left(\varepsilon - \phi - \left(\frac{1}{r}\right)\right) k, \\ \phi'' + \left(\frac{2}{r}\right) \phi' &= k^2, \quad \int k^2 r^2 dr = 1, \\ \lambda'' + \left(\frac{2}{r}\right) \lambda' - \left(\frac{2}{r^2}\right) \lambda &= -2k \left(k' + \left(\frac{2}{r}\right) k\right), \end{aligned} \tag{26}$$

где (\prime) обозначает дифференцирование по радиальной переменной r , а интегрирование здесь и в дальнейшем ведется по полубесконечному интервалу $[0, \infty)$.

Что касается дополнительного последнего уравнения в (25) и (26), оно представляет собой уравнение для φ -компоненты магнитного потенциала $A_\varphi = \lambda(r) \sin \theta$, отвечающее (17). Причем r --, θ -компоненты плотности токов, отвечающих подстановкам (21), (22), тождественно равны нулю, так что и для соответствующих компонент магнитного потенциала можно положить $A_r = A_\theta = 0$.

Нетрудно получить выражение для магнитного момента искомых регулярных решений системы уравнений (25). Действительно, интегрируя последнее уравнение с весом r^3 и учитывая условие электронейтральности и асимптотическое поведение $\lambda \sim \mu/r^2$, где μ — магнитный момент распределения, получим

$$\int ((\lambda' - \lambda/r)r^3)' dr = -3\mu = \int (k^2)' r^3 dr = -3 \int k^2 r^2 dr = -3, \tag{27}$$

откуда будем иметь $\mu = 1$, или в размерных единицах (12) с учетом преобразования (15),

$$|\mathbf{M}_A| = \left(\frac{e\hbar}{mc}\right) \frac{1}{1+\omega} \approx \frac{e\hbar}{2mc}. \tag{28}$$

Действительно, поскольку в силу (18)

$$1 + \omega = \frac{2}{1 + \varepsilon\alpha^2} \approx 2(1 - \varepsilon\alpha^2), \quad (29)$$

магнитный момент, с точностью до чрезвычайно малых поправок $\sim \alpha^2$, имеет каноническое дираковское значение*.

Проделывая те же операции интегрирования и восстановления размерности для магнитного момента решений второго класса (26), получим $\mu = 1/3$, так что вместо (28) теперь имеем

$$|M_B| \approx \frac{1}{3} \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right). \quad (30)$$

Такое значение магнитного момента представляется совершенно неожиданным и любопытным, но трудно поддается физической интерпретации.

Найдем теперь представление для (безразмерных) энергии и углового момента регулярных решений. Используя известное выражение для симметричного тензора энергии-импульса $T^{(\mu\nu)}$, отвечающего системе уравнений типа (6)

$$\begin{aligned} T^{(\mu\nu)} = (4\pi)^{-1} & \left(-\eta_{\beta\rho} F^{\mu\beta} F^{\nu\rho} + \frac{1}{4} \eta^{\mu\nu} F^2 \right) + \\ & + (16\pi)^{-1} (i\bar{\psi}\gamma^\mu \partial^\nu \psi - i\partial^\nu \bar{\psi}\gamma^\mu \psi + i\bar{\psi}\gamma^\nu \partial^\mu \psi - \\ & - i\partial^\mu \bar{\psi}\gamma^\nu \psi + 2a^\mu \bar{\psi}\gamma^\nu \psi + 2a^\nu \bar{\psi}\gamma^\mu \psi), \end{aligned} \quad (31)$$

для энергии стационарных регулярных решений получим

$$w = \frac{\omega}{4\pi} \int \psi^+ \psi d^3x - \frac{1}{8\pi} \int (\nabla\phi)^2 d^3x. \quad (32)$$

С другой стороны, с учетом выполняющейся для стационарных регулярных решений так называемой «теоремы Лауэ» [29] ($\int T^{(aa)} d^3x = 0$, $a = 1, 2, 3$) будем иметь $w = \int T_\mu^\mu d^3x$, и для энергии (32) получим [21, 24] другое представление через (легко вычисляемый с учетом уравнений поля) след тензора энергии-импульса T_μ^μ ,

$$w = \frac{1}{4\pi} \int \bar{\psi}\psi d^3x. \quad (33)$$

*Как мы увидим ниже, численное значение параметра ε для всех регулярных решений само по себе мало ($\varepsilon \ll 1$), так что отклонение магнитного момента от дираковского значения на много порядков меньше наблюдаемой и предсказываемой КЭД величины ($\alpha/2\pi$).

Переходя к «боровским» масштабам (15), учитывая условие электронейтральности и выражение (29) для ω , а затем восстанавливая размерность в соответствии с (9), получим вместо (32)

$$W = mc^2 \left(\frac{1 - \varepsilon\alpha^2}{1 + \varepsilon\alpha^2} - \frac{\alpha^2}{1 + \varepsilon\alpha^2} \int (\phi')^2 r^2 dr \right) = mc^2 - W_B. \quad (34)$$

Здесь энергия связи W_B с точностью до поправок порядка α^2 равна

$$W_B = 4R \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \int (\phi')^2 r^2 dr \right), \quad (35)$$

где величина $R := mc^2\alpha^2/2 \equiv me^4/2\hbar^2$ отвечает (при параметре m , равном массе электрона) *постоянной Ридберга*. Приведенная частота ε и энергия собственного электрического поля электрона (второй член в (35)) должны при этом определяться из решения граничной задачи для системы уравнений (25) либо (26).

Аналогично, другое представление энергии (33) после перехода к размерным величинам дает для энергии связи \tilde{W}_B

$$\tilde{W}_B = 4R \int n^2 r^2 dr. \quad (36)$$

Равенство выражений (35) и (36) представляет собой интегральное тождество, которое выполняется для любых регулярных решений системы (25) либо (26). Это было использовано при оценке точности численного решения соответствующей краевой задачи (см. разд. 5).

В заключение выведем представление полного углового момента регулярных решений. В силу симметричности тензора энергии-импульса (31) тензор полного углового момента $M^{\mu[\nu\lambda]}$ имеет вид

$$M^{\mu[\nu\lambda]} := x^\nu T^{(\mu\lambda)} - x^\lambda T^{(\mu\nu)}, \quad (37)$$

так что сохраняющийся 3-вектор углового момента \mathbf{j} дается выражением

$$\mathbf{j} = \int \mathbf{r} \times \mathbf{p} \, d^3x, \quad (38)$$

в котором плотность вектора импульса \mathbf{p}^c определяется компонентами $T^{(0c)}$ тензора энергии-импульса

$$\mathbf{p} := \frac{1}{4\pi}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}) - \frac{1}{8\pi} \left(\mathbf{a}\psi^+ \psi + (\omega + \phi)\psi^+ \mathbf{s}\psi + \frac{i}{2}(\psi^+ \nabla \psi - \nabla \psi^+ \psi) \right), \quad (39)$$

где $\mathbf{s}^c := i\gamma^0\gamma^c$. Используя уравнения поля (6), интегрированием по частям получим

$$\mathbf{j} = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{r} \times (i\nabla\psi^+\psi - i\psi^+\nabla\psi) d^3x + \frac{1}{8\pi} \int \psi^+ \Lambda\psi d^3x, \quad (40)$$

где $\Lambda^c := (i/2)\varepsilon_{abc}\gamma^a\gamma^b$. В случае аксиальной симметрии единственная отличная от нуля компонента момента импульса принимает тогда вид

$$j = j_3 = \frac{1}{4\pi} \int \psi^+ \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2}\Lambda_3 \right) \psi d^3x. \quad (41)$$

После перехода к нерелятивистскому пределу для решений обоих классов **A** и **B** будем иметь

$$j = \frac{1}{2} \int k^2 r^2 dr = \frac{1}{2} \quad (42)$$

с учетом условия равенства электрического заряда элементарному. В размерных единицах имеем, как и ожидалось *, $J = \hbar/2$. Для решений, задаваемых анзациями (23), (24), проекция углового момента J будет иметь противоположный знак, $J = -\hbar/2$.

5. ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И «БОРОВСКИЙ» СПЕКТР ЭНЕРГИЙ СВЯЗИ

Ниже предметом исследования будут всюду регулярные решения системы (25), которая после введения «приведенного» потенциала

$$U := \varepsilon - \phi \quad (43)$$

и без рассмотрения дополнительного уравнения для магнитного потенциала λ примет вид

$$\begin{aligned} k' &= n, \quad n' + \left(\frac{2}{r}\right)n = \left(U - \left(\frac{1}{r}\right)\right)k \\ &\mapsto k'' + \left(\frac{2}{r}\right)k' = \left(U - \left(\frac{1}{r}\right)\right)k, \\ U'' + \left(\frac{2}{r}\right)U' &= -k^2. \end{aligned} \quad (44)$$

*Связь полного момента импульса с электрическим зарядом регулярных аксиально-симметричных решений имеет универсальный характер и для случая отсутствия внешнего потенциала была получена в [24] в виде $J = (Q/e)m\hbar$, $m = 1, 2, \dots$ Таким образом, модели рассматриваемого класса могут в принципе описывать заряженные фермионы любого полуцелого спина.

Асимптотики интересующих нас решений имеют вид

$$k \sim \beta \left(1 - \frac{r}{2} + \dots\right), \quad n \sim -\frac{\beta}{2} + \dots, \quad U \sim \delta - \frac{\beta^2 r^2}{6} + \dots \quad (45)$$

при малых $r \sim 0$ и

$$k \sim A e^{-\sqrt{\varepsilon}r}, \quad n \sim -\sqrt{\varepsilon}k, \quad U \sim \varepsilon + \frac{q}{r}, \dots \quad (46)$$

при больших $r \rightarrow \infty$.

Предполагая существование таких решений с произвольным числом узлов $N = 0, 1, 2, \dots$ по основной функции $k(r)$, приходим к *нелинейной* краевой задаче на «собственные» значения: при заданном $\delta = U(0)$ подобрать такие $\beta = k(0)$, при которых на больших расстояниях от центра функция $k(r)$ убывает, асимптотически приближаясь к нулю; при этом автоматически потенциал $U(r)$ медленно убывает в соответствии с асимптотикой (46), из которой определяется, в том числе, и «собственное значение» ε .

При численном интегрировании используем известный (см., например, [11]) метод «вилки», сужая интервал значений β по следующему критерию. Если функция $k(r)$ «срывается» и начинает возрастать, $n(r_0) = k'(r_0) > 0$ при некотором значении аргумента $r = r_0$, следует уменьшить исходное значение β . Наоборот, если (для безузлового решения с $N = 0$) при некотором r_0 функция $k(r)$ становится отрицательной, $k(r_0) < 0$, значение β следует увеличить. В результате определяем приближенное собственное значение β_0 , при котором «срыв» решения в ту или иную сторону происходит при достаточно больших r_0 . Находя в этой точке значения $q \approx -r_0^2 U'(r_0)$, определяем нормировочный интеграл — заряд $q \approx \int k^2 r^2 dr$.

После этого вся процедура повторяется при другом исходном значении δ потенциала U , что приводит к регулярному решению с другим значением нормировочного интеграла q . В итоге получаем приближенные значения β_0, δ_0 , соответствующие уже *нормированному* (и, соответственно, электрически нейтральному) безузловому регулярному решению системы уравнений (44), имеющему вид, представленный на рис. 1 (радиус обрыва $r_0 \sim 90$). Вид приведенного электростатического потенциала U представлен на рис. 2.

Далее при найденном β_0 интегрируем уравнение для магнитного потенциала в (25), подбирая такое значение γ_0 «производной λ' в нуле», при котором на больших расстояниях от центра возрастающий член в асимптотике $\lambda \sim Hr + \mu/r^2$ приближенно обращается в нуль; тогда отсюда определяем и магнитный момент распределения $\mu = r_0^2 \lambda(r_0)$, убеждаясь, что с хорошей точностью $\mu \approx 1$ (см. выше (28)). Искомый вид магнитного потенциала для безузлового решения представлен на рис. 3.

Наконец, используя все найденные значения $\{\beta_0, \delta_0, \gamma_0\}$, численным интегрированием находим все интересующие нас интегральные характеристики

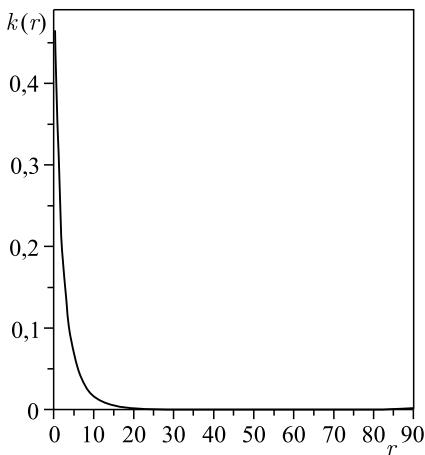


Рис. 1. Вид безузлового регулярного решения, отвечающего анзапу **A**

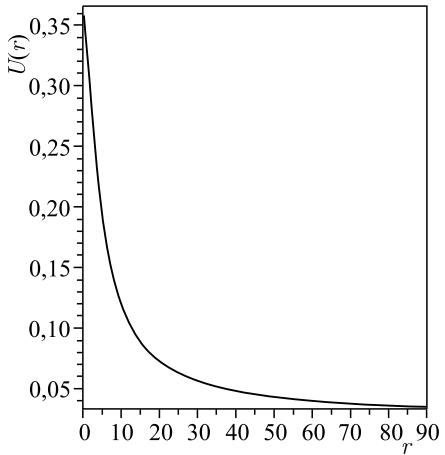


Рис. 2. Вид приведенного электростатического потенциала для безузлового решения, отвечающего анзапу **A**

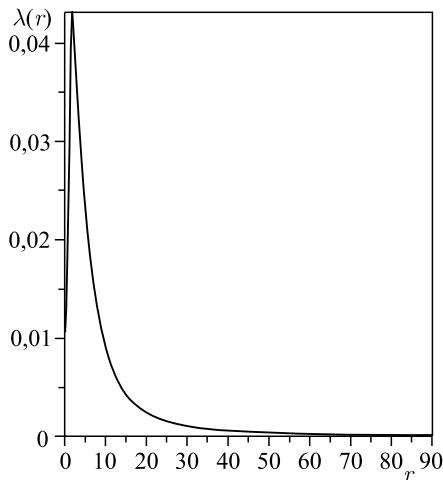
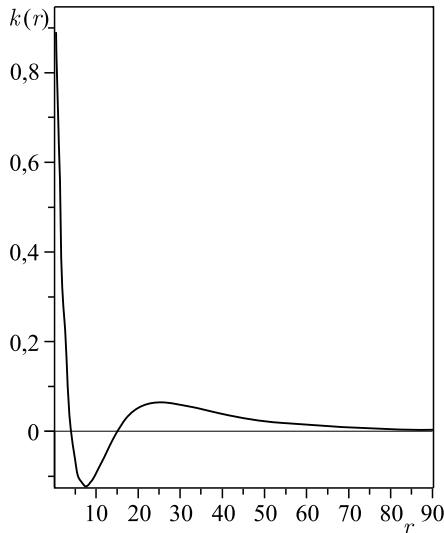


Рис. 3. Вид магнитного потенциала для безузлового решения, отвечающего анзапу **A**

безузлового решения, попутно проверяя точность определения по выполнению интегральных тождеств (ср., например, (35) с (36)). Наконец, по асимптотике потенциала U определяем и собственное значение для «приведенной частоты» $\varepsilon \approx U(r_0) + r_0 U'(r_0)$, вычисляя затем энергию связи по формуле (35).

Нетрудно понять, что аналогичная процедура может быть применена для нахождения регулярных решений с произвольным заданным числом узлов

Рис. 4. Вид двухузлового ($N = 2$) регулярного решения, отвечающего ансамблю А

N основной функции $k(r)$. Для этого следует только сужать соответствующий интервал значений β_N , предварительно позволяя функции $k(r)$ поменять знак N раз. В качестве примера на рис. 4 представлено нормированное регулярное решение с числом узлов $N = 2$.

В табл. 1 представлены результаты численного расчета параметров и характеристик нормированных регулярных решений системы (44) (и соответствующих им решений (25)) с числом узлов $N = 0–10$. Из таблицы и рис. 5 видно, что с очень хорошей точностью значения энергии связи W_B воспроизводят каноническое «боровское» распределение

$$W_n = W/n^2, \quad n = N + 1 = 1, 2, \dots \quad (47)$$

В шестом столбце табл. 1 выписаны соответствующие значения энергий связи W^{var} , полученные *вариационным* методом. При этом варьирование производилось в классе пробных функций, соответствующих канонической линейной задаче квантовой механики (когда потенциал собственного поля $\phi(r)$ в первом из уравнений (44) не учитывается, так что $U(r) = \varepsilon = \text{const}$):

$$k_N = \text{const } L_N^{(1)}(x) e^{-x/2}, \quad x := \frac{r}{N}, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \quad (48)$$

где $L_N^{(1)}(x)$ — обобщенные полиномы Лагерра степени N по x , а собственные значения соответствующей линейной задачи

$$\varepsilon_N = \frac{1}{4(N+1)^2}. \quad (49)$$

Таблица 1. Параметры и характеристики регулярных решений ансамба А

n	$\beta = k(0)$	$\delta = U(0)$	$\varepsilon = U(\infty)$	W_n	W_n^{var}	$W_n \cdot n^2$	$W_n^{\text{var}} \cdot n^2$
1	0,492787	0,365947	0,02311	0,1218	0,1182	0,1218	0,1182
2	0,17379	0,09042	0,004515	0,03030	0,03056	0,1212	0,1222
3	0,09471	0,04005	0,001338	0,01335	0,01366	0,1201	0,1229
4	0,06135	0,02243	0,0006103	0,007443	0,007696	0,1191	0,1231
5	0,04382	0,01431	0,0003339	0,004757	0,004930	0,1189	0,1233
6	0,03333	0,009921	0,0002028	0,003200	0,003425	0,1187	0,1233
7	0,02639	0,007278	0,0001344	0,002418	0,002517	0,1185	0,1233
8	0,02158	0,005366	0,00009089	0,001849	0,001927	0,1183	0,1234
9	0,01808	0,004394	0,00006706	0,001461	0,001523	0,1183	0,1234
10	0,01542	0,003556	0,00004866	0,001182	0,001234	0,1182	0,1234
11	0,01336	0,002937	0,00003744	0,0009755	0,001020	0,1180	0,1234
...
51	$4,745 \cdot 10^{-5}$...	0,1234
101	$1,210 \cdot 10^{-5}$...	0,1234

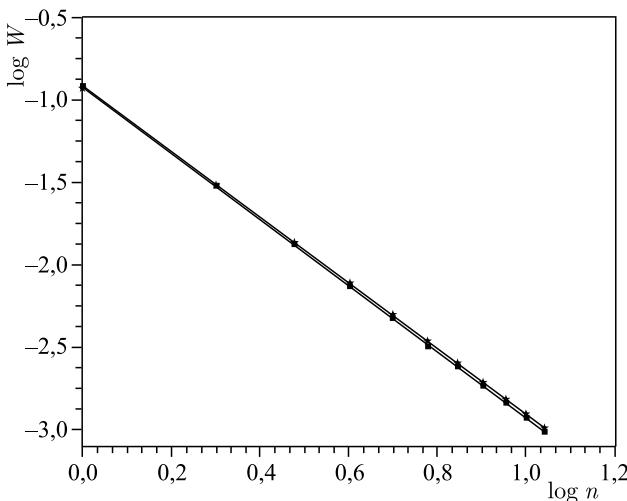


Рис. 5. Зависимость энергии связи W_n регулярных решений ансамба А от «главного квантового числа» $n = N + 1$ согласно численному (квадраты) и вариационному (звездочки) методам

Для потенциала собственного поля соответствующие пробные функции $\phi_n(r)$ находились интегрированием второго уравнения в (44) с правой частью, соответствующей (48), так что

$$\phi''_N + \frac{2}{r}\phi'_N = k_N^2. \quad (50)$$

Варьирование соответствующего функционала действия производилось по двум параметрам пробных функций (48) и (50) — амплитудному и масштабному. При этом хорошее согласие результатов, полученных численным и вариационным методами, связано с тем, что включение собственного потенциала поля электрона не изменяет *качественного* поведения функций и их асимптотик как вблизи нуля, так и при больших значениях радиальной переменной.

Для решений с большим числом узлов $N = 50$ ($n = 51$) и $N = 100$ ($n = 101$) вычисления производились только вариационным методом, при этом величина энергии связи по-прежнему с очень хорошей точностью соответствует «боровскому» закону (47).

Из табл. 1 (см. последний столбец) видно, что среднее значение постоянной W в (47) примерно равно $W \approx 0,120$. Спектр размерной энергии связи (35) либо, эквивалентно, (36) принимает тогда вид

$$W_B = 4RW/n^2 \approx 0,48R/n^2, \quad (51)$$

так что значение эффективной постоянной Ридберга R оказывается *примерно вдвое меньше экспериментально наблюдаемого*.

Совершенно аналогично находится численным и вариационным методами спектр регулярных решений с угловой зависимостью, отвечающей анзацу \mathbf{B} , см. (22). При этом вместо системы для радиальных функций (44) имеем из (19) следующую:

$$\begin{aligned} k' + \left(\frac{2}{r}\right)k &= -n, \quad n' = -\left(U - \left(\frac{1}{r}\right)\right)k \\ \mapsto k'' + \left(\frac{2}{r}\right)k' - \left(\frac{2}{r^2}\right)k &= \left(U - \left(\frac{1}{r}\right)\right)k, \\ U'' + \left(\frac{2}{r}\right)U' &= -k^2 \end{aligned} \quad (52)$$

с асимптотиками вида

$$k \sim \beta r - \dots, \quad n \sim -3\beta + \dots, \quad U \sim \delta - \frac{1}{20}\beta r^4 \quad (53)$$

при $r \sim 0$; при $r \rightarrow \infty$ имеем

$$k \sim A e^{-\sqrt{\varepsilon}r}, \quad n \sim \sqrt{\varepsilon}k, \quad U \sim \varepsilon + \frac{q}{r}. \quad (54)$$

Варьирование проводилось в классе пробных функций $k(r)$, опять-таки отвечающих частному значению «орбитального» квантового числа $l = 1$ решений линейной задачи канонической квантовой механики, а именно ($2l + 1 = 3$):

$$k_N = \text{const} L_N^{(3)}(x) e^{-x/2}, \quad x := \frac{r}{N}, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \quad (55)$$

Таблица 2. Параметры и характеристики регулярных решений ансамбля В

n	$\beta = k(0)$	$\delta = U(0)$	$\varepsilon = U(\infty)$	W_n	W_n^{var}	$W_n \cdot n^2$	$W_n^{\text{var}} \cdot n^2$
2	0,020682	0,07992	0,001025	0,02664	0,02534	0,1066	0,1014
3	0,013741	0,03797	0,000705	0,01266	0,01272	0,1139	0,1145
4	0,009477	0,02178	0,000400	0,007256	0,007407	0,1161	0,1185
5	0,006960	0,001405	0,000253	0,004682	0,004813	0,1174	0,1203
6	0,005366	0,009791	0,000168	0,003264	0,003369	0,1175	0,1213
7	0,007205	0,004292	0,000116	0,002402	0,002487	0,1177	0,1219
8	0,003530	0,005524	0,0000861	0,001842	0,001910	0,1179	0,1222
9	0,002966	0,004367	0,0000618	0,001455	0,001512	0,1179	0,1225
10	0,002540	0,003539	0,0000492	0,001180	0,001227	0,1179	0,1227
11	0,002205	0,002925	0,0000379	0,0009751	0,001015	0,1180	0,1228
12	0,001938	0,002458	0,0000285	0,0008194	0,0008535	0,1180	0,1229
...
52	$4,563 \cdot 10^{-5}$...	0,1234
102	$1,186 \cdot 10^{-5}$...	0,1234

в которой собственные значения равны

$$\varepsilon_N = \frac{1}{4n^2}, \quad n = N + l + 1 = N + 2, \quad (56)$$

в то время как собственный потенциал определялся пробными функциями, находящимися интегрированием прежнего уравнения (50) с правой частью, определяемой уже (55).

В табл. 2 приведены результаты численных и вариационных исследований спектра основного и возбужденных состояний регулярных решений системы (52), опять взаимно подтверждающие друг друга. Из нее и рис. 6 следует, что боровское распределение

$$W_n = W/n^2, \quad n = N + 2 = 2, 3, \dots \quad (57)$$

снова выполняется с достаточно хорошей точностью, особенно для решений с большим количеством узлов N . Более того, величина W снова имеет значение $W \approx 0,120$, так что эффективная постоянная Ридберга оказывается универсальной, а именно, примерно равной ее значению для ансамбля А (и примерно вдвое меньшей ее экспериментального значения).

Вид безузлового регулярного решения системы уравнений (52) приведен на рис. 7 (радиус обрыва $r_0 \sim 200$). Соответствующий магнитный потенциал представлен на рис. 8.

Заметим, наконец, что значения энергий состояний классов А и В с однаковым значением «главного квантового числа» $n = N + l + 1$ близки

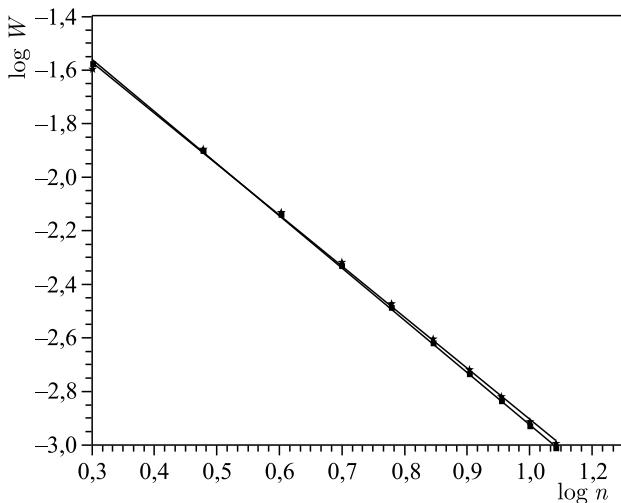


Рис. 6. Зависимость энергии связи W_n регулярных решений анзаца \mathbf{B} от «главного квантового числа» $n = N + 2$ согласно численному (квадраты) и вариационному (звездочки) методам

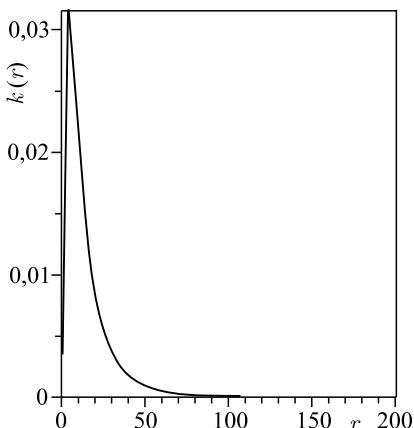


Рис. 7. Вид безузлового регулярного решения, отвечающего анзацу \mathbf{B}

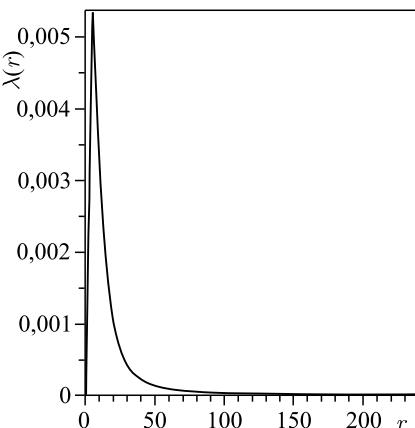


Рис. 8. Вид магнитного потенциала для безузлового решения, отвечающего анзацу \mathbf{B}

друг к другу, особенно при больших значениях n . Все же разница между ними, в частности между энергиями аналогов состояний $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ (при $n = 2$, $l = 0, 1$ соответственно), на много порядков превышает экспериментально наблюдаемую (отвечающую «лэмбовскому сдвигу»).

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Как уже отмечалось, учет собственного электрического поля электрона в атоме водорода выглядит вполне оправданным, если не неизбежным как с общефизической точки зрения, так и в соответствии с представлениями КЭД. Однако математическая структура системы уравнений Дирака-Максвелла становится при этом совершенно отличной от канонической: эта система является уже нелинейной и самосогласованной.

Спектр регулярных состояний такой системы может быть достаточно надежно определен численным и вариационным методами лишь для «нелинейных аналогов» s - или p -состояний. Действительно, только в этих случаях последовательные члены возникающей цепочки уравнений для радиальных функций имеют возрастающий порядок малости по параметру постоянной тонкой структуры. В нерелятивистском приближении $\alpha \rightarrow 0$ только главные гармоники, отвечающие орбитальному квантовому числу $l = 0, 1$, и дают вклад в значения энергии связи. Учет релятивистских поправок, определяемых для тех же решений гармониками с высшими значениями l и соответствующими гармониками электрического и магнитного потенциалов поля электрона, вполне возможен, но требует большого объема вычислений и здесь не рассматривался (оценочные результаты получены в [25]).

Таким образом, представленные в статье решения и спектр энергий связи фактически следует сравнивать с решениями уравнения Шредингера s - и p -типов при наличии кулоновского поля. При этом удивительным образом совершенно другая структура рассматриваемой нелинейной модели с очень хорошей точностью воспроизводит каноническое «боровское» распределение, причем тем лучше, чем большее значение «главного квантового числа» рассматривается. Более того, эффективная «постоянная Ридберга» оказывается при этом очень близкой по значению для обоих классов решений и тем самым может считаться универсальной. Кроме этого, замечательным образом условие нормировки спинорной «волновой функции» выполняется как прямое следствие естественного условия электронейтральности, а проекция полного момента количества движения оказывается точно равной $\pm \hbar/2$.

На этом, однако, совпадения с квантовой механикой и экспериментом заканчиваются. Само численное значение «постоянной Ридберга» примерно в два раза меньше наблюдаемого, а «лэмбовский сдвиг» оказывается на много порядков больше наблюдаемого. Помимо этого, магнитный момент распределений, отвечающих «аналогам» p -состояний, странным образом оказывается *второе меньше магнитного момента электрона*.

Можно, разумеется, в духе работы [18] преобразовать обнаруженный спектр уровней с помощью «классического аналога» процедуры перенормировки, которая уже не имела бы дела с «вычитанием бесконечностей» в духе КЭД, а свелась бы к простому приравниванию *наблюдаемой* массы электрона

удвоенной исходной массе «голой» частицы t в уравнении Дирака. Однако этот «трюк», очевидно, не решает всех проблем соответствия полученных результатов с экспериментом, в том числе с величиной магнитного момента анзаца **B** и аномально большой разницей в энергиях уровней $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$.

В общем, складывается впечатление, что получение полного соответствия с экспериментом, включая радиационные поправки, вполне возможно в рамках чисто классической полевой модели атома водорода, лишенной каких-либо расходимостей и не использующей технику вторичного квантования. Однако для этого необходим учет некоторого дополнительного фактора, например, самодействия по спинорному полю [30] или возможной суперсимметричной структуры рассматриваемой самосогласованной модели [2]. Мы оставляем для дальнейшего более подробное обсуждение этих вопросов.

7. ДОПОЛНЕНИЕ

В процессе рецензирования обнаружилась статья А. Ф. Раньяды и Х. М. Усона [31], близкая как по постановке задачи и методам исследования, так и по полученным результатам *. А именно, рассматривалась по существу та же модель атома водорода с учетом собственного электрического поля электрона, представленная самосогласованной системой уравнений Дирака-Максвелла с лагранжианом (1). Искались те же стационарные регулярные решения, отвечающие нелинейным аналогам s - и p -состояний и нашим анзацам **A** и **B** соответственно.

При этом вместо прямой редукции к нерелятивистскому случаю, основанной на преобразовании (15) и последующем α -разложении (см. разд. 3), авторы [31] использовали громоздкую процедуру численного интегрирования исходной системы (14) (в не обоснованном ими предположении о малости членов с магнитным потенциалом в уравнениях для спинорных гармоник).

Тем не менее для трех первых уровней $1s$, $2s$, $3s$ и двух уровней $1p$, $2p$ полученные в [31] результаты с очень хорошей точностью совпадают с приведенными выше (см. табл. 1 и 2). Например, для энергии E основного состояния $1s$, согласно формуле (26) статьи [31], имеем с точностью до поправок $\sim \alpha^4$

$$E = mc^2(1 - 0,243894\alpha^2), \quad (58)$$

что, как и в нашей работе, отвечает энергии связи $W_B \approx R/2$ и примерно вдвое меньше экспериментального значения. Для первых трех s -уровней с хорошей точностью имеет место «боровская» зависимость энергии связи (47)

* Авторы глубоко благодарны рецензенту за внимательное отношение, важные указания и пересылку статьи [31].

(у нас — для 10 первых уровней при численном, и вплоть до $n = 100$ при вариационных методах). Для двух первых p -состояний, рассмотренных в [31], результаты также хорошо коррелируют с приведенными выше.

Таким образом, вывод авторов статьи [31] вполне аналогичен нашему. А именно, несмотря на физически обоснованную постановку задачи, полученные результаты не улучшают, а нарушают согласие с линейной квантово-механической задачей и экспериментом.

В этой связи, как и в последующей работе [18], для формального согласования с наблюдаемыми параметрами авторы [31] предлагают применить «классический аналог» процедуры перенормировки, переопределяя соответствующим образом константу взаимодействия e и «затравочную» массу m . При этом для первых трех s -уровней удается обеспечить правильные как разности энергий, так и их абсолютные значения. В случае p -состояний результаты согласования, по утверждению авторов, не вполне удовлетворительны.

Однако, как уже было отмечено выше (см. разд. 6), в рассматриваемой модели *перенормировка заряда / массы в принципе не способна решить проблему согласования с экспериментом*. Очевидно, например, она не может изменить ни отношение значений магнитных моментов частицы в s - и p -состояниях $M_s/M_p = 3$, ни аномально большую разницу энергий связи между $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ -состояниями. Заметим, что в работе [31] такие эффекты вообще не были обнаружены. Более того, сами *абсолютные* значения механического J и магнитного M моментов частицы меняются при предложенной в [31] перенормировке. Например, для s -состояний будем иметь

$$J = X J_0, \quad M = X M_0, \quad J_0 := \frac{\hbar}{2}, \quad M_0 = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c}, \quad X := \frac{e_0}{e} \equiv \frac{m_0}{m}, \quad (59)$$

где e_0, m_0 — масса и заряд электрона; e, m — «затравочные» масса и заряд, т. е. соответствующие масштабные множители в исходном лагранжиане (1). При этом для формального согласования энергии s - и p -состояний с экспериментом для перенормированного множителя X следует принять $* X^2 \approx 2$. Такое преобразование масштабов приводит, следовательно, к неправильным значениям механического и магнитного моментов, что не было замечено в [31].

Наконец, перенормировка заряда/массы нарушает условие нормировки спинорного поля частицы (3), не позволяя уже рассматривать его в качестве «волновой функции», а также нарушает соответствие модели линейной квантовой теории вообще. Резюмируя сказанное выше, следует признать, что в рассматриваемой здесь и в [31] форме модель Дирака–Максвелла, будучи математически корректной и чрезвычайно богатой по внутренним свойствам,

*Более точное значение, согласно нашим расчетам (ср. с (51)): $X^2 \approx 1/0,48 \approx 2,078$, а согласно данным по трем первым s -уровням в работе [31] — $X^2 \approx 2,0453$.

с физической точки зрения неудовлетворительна и должна быть существенно видоизменена.

Отметим в связи с этим, что в статье [31] сделан важный вывод о *пренебрежимо малом влиянии на спектр водорода самодействия по спинорному полю* (предлагавшемуся выше и нами, см. разд. 6). Основанием для такого вывода явились как результаты численного интегрирования, так и качественные доводы о большой пространственной протяженности дираковского поля ($> 10^{-8}$ см) в атоме водорода, т. е. в области, где нелинейный член пренебрежимо мал. Таким образом, следует использовать другие возможности для модификации модели. Мы предполагаем обсудить и рассмотреть некоторые из них в дальнейшем.

Благодарности. Авторы благодарны А. Б. Пестову, Ю. П. Рыбакову и Б. Н. Фролову за полезные обсуждения и библиографические указания. Работа выполнена при поддержке «Университетской программы 5-100» Российского университета дружбы народов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зайцев Г. А. Алгебраические проблемы математической и теоретической физики. М.: Наука, 1974. С. 158–163.
2. Wipf A., Kirchberg A., Lange D. Algebraic Solution of the Supersymmetric Hydrogen // Bulg. J. Phys. 2006. V. 11. P. 206–216; arXiv:0511.1231 [hep-th].
3. de la Peria L., Cetto A. M., Valdes-Hernandes A. The Zero-Point Field and the Emergence of the Quantum // Intern. J. Mod. Phys. E. 2014. V. 23, No. 09. P. 145009.
4. Рыбаков Ю. П. Солитоны и квантовая механика // Динамика сложных систем. 2009. № 4. С. 3–15;
Rybakov Yu. P., Saha B. Interaction of a Charged 3D Soliton with a Coulomb Center // Phys. Lett. A. 1996. V. 222. P. 5–13; arXiv:9603004 [atom-ph].
5. Vigier J.-P. An Electromagnetic Theory of Strong Interactions // Phys. Lett. A. 2003. V. 319. P. 246–250.
6. Samsonenko N. V., Tahti D. V., Ndahayo F. On the Barut–Vigier Model of the Hydrogen Atom // Phys. Lett. A. 1996. V. 220. P. 297–301.
7. Власов А. Д. Атом Шредингера // УФН. 1993. Т. 163, № 2. С. 98–103.
8. Питаевский Л. П. К вопросу об «атоме Шредингера» // Там же. № 8. С. 119–120.
9. Diosi L. Gravitation and Quantum-Mechanical Localization of Macroobjects // Phys. Lett. A. 1984. V. 105. P. 199–202.
10. Penrose R. On Gravity's Role in Quantum State Reduction // Gen. Rel. Grav. 1996. V. 28. P. 581–600.
11. Moroz I. M., Penrose R., Tod K. P. Spherically Symmetric Solutions of the Schrödinger–Newton Equations // Class. Quant. Grav. 1998. V. 15. P. 2733–2742.
12. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М.: Изд-во иностр. лит., 1956. С. 389.
13. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969. С. 515.

14. *Mohr P. J.* Self-Energy Correction to One-Electron Energy Levels in a Strong Coulomb Field // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 4421–4424.
15. *Barut A. O., Salamin Y. I.* Relativistic Theory of Spontaneous Emission // Phys. Rev. A. 1988. V. 37. P. 2284–2296.
16. *Barut A. O., Kraus J., Salamin Y., Ünal N.* Relativistic Theory of the Lamb Shift in Self-Field Quantum Electrodynamics // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 7740–7745.
17. *Acikgoz I., Barut A. O., Kraus J., Ünal N.* Self-Dual Quantum Electrodynamics without Infinities. A New Calculation of Vacuum Polarization // Phys. Lett. A. 1995. V. 198. P. 126–130.
18. Афанасьев Г. Н., Карташев В. Г., Пестов А. Б. Влияние кулоновского самодействия на сдвиг атомных уровней // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1994. Т. 58, № 5. С. 34–40.
19. *Rosen N.* A Field Theory of Elementary Particles // Phys. Rev. 1939. V. 55. P. 94–101.
20. *Wakano M.* Intensely Localized Solutions to the Classical Dirac–Maxwell Field Equations // Prog. Theor. Phys. 1966. V. 36, No. 6. P. 1117–1141.
21. Кассандров В. В. Спин и заряд солитонов в модели взаимодействующих электромагнитного и спинорного полей // Вестн. Рос. ун-та дружбы народов. 1995. Т. 3, № 1. С. 168–174.
22. Костюк А. П., Чепилко И. М. Сферически-симметричные электростатические солитоны клейн-гордоновского и дираковского полей // ЯФ. 1993. Т. 56, вып. 6. С. 233–247.
23. *Seam Bohum C., Cooperstock F. I.* Dirac–Maxwell Solitons // Phys. Rev. A. 1999. V. 60. P. 4291–4300; arXiv:0001038 [physics].
24. Кассандров В. В. Дискретные характеристики частиц в нелинейных классических теориях поля. Дис. канд. физ.-мат. наук. М.: Изд-во Ун-та дружбы народов, 1977.
25. Кассандров В. В. Солитоны классической спинорной электродинамики при наличии внешнего поля // Статистическая физика и теория поля / Под ред. Ц. И. Гуцунаева. М.: Изд-во Ун-та дружбы народов, 1990. С. 48–53.
26. *Biguau L. V., Kassandrov V. V.* Soliton Model of the Hydrogen Atom // Тр. LV Всерос. конф. по проблемам динамики, физики частиц, физики плазмы и оптоэлектроники. М.: Изд-во Рос. ун-та дружбы народов, 2018. С. 17–21.
27. Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике. М.: Наука, 1976.
28. *Bernstein D. H., Giladi E., Jones K. R. W.* Eigenstates of the Gravitational Schrödinger Equations // Mod. Phys. Lett. A. 1998. V. 13. P. 2327–2336.
29. Иваненко Д., Соколов А. Классическая теория поля (новые проблемы). М.; Л.: Гостехтеоретиздат, 1951. Гл. 4.
30. *Soler M.* Classical Electrodynamics for a Nonlinear Spinor Field: Perturbative and Exact Approaches // Phys. Rev. D. 1973. V. 8. P. 3424–3429.
31. *Ranāda A. F., Uson J. M.* Bound States of a Classical Charged Nonlinear Dirac Field in a Coulomb Potential // J. Math. Phys. 1981. V. 22. P. 2533–2538.