

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ОДНОМЕРНОМ «АТОМЕ ВОДОРОДА»

К. А. Свешников¹, Д. И. Хомовский²

Физический факультет и Институт теоретических проблем микромира Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, Москва

Исследованы специфические особенности поведения спектра стационарных состояний дираковской частицы в регуляризованном «кулоновском» потенциале $V_\delta(z) = -q/(|z|+\delta)$ как функции параметра обрезания δ . Показано, что в $1+1$ D энергетический спектр частицы Дирака в таком потенциале обладает рядом уникальных свойств, неаналитически зависящих от константы связи и не имеющих нерелятивистского аналога. Наиболее существенную роль эти свойства играют при $\delta \ll 1$, явно демонстрируя наличие физически содержательного энергетического спектра при произвольно малом $\delta > 0$ и в то же время отсутствие регулярного предельного перехода к $\delta \rightarrow 0$, а тем самым и корректной постановки задачи для уравнения Дирака с нерегуляризованным потенциалом.

The dependence of stationary levels of the Dirac particle in the regularized Coulomb potential $V_\delta(z) = -q/(|z|+\delta)$ on the cutoff parameter δ is studied. It is shown that in $1+1$ D the energy spectrum of the Dirac particle in such a potential reveals some specific features, which depend nonanalytically on the coupling constant q and are of essentially relativistic nature. These properties turn out to be most important for $\delta \ll 1$, demonstrating explicitly the existence of physically quite reasonable energy spectrum for any small $\delta > 0$, and simultaneously the absence of regular limit $\delta \rightarrow 0$, hence the absence of well-defined spectral problem for the Dirac equation without regularization for any q in $1+1$ D.

PACS: 31.30.Jv

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].

В нерелятивистской квантовой механике задача о частице в потенциале

$$V(z) = -q/|z| \tag{1}$$

¹E-mail: costa@bog.msu.ru

²E-mail: khomovskij@physics.msu.ru

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

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

не является самосопряженным оператором, что проявляется в «падении на центр» нижнего четного энергетического уровня. Самосопряженным расширениям уравнения Шредингера 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 [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 описание свойств экситонных возбуждений в углеродных нанотрубках [7, 8].

Сущность проблемы в задаче с гамильтонианом (2) удобно показать 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, то необходимо специально обеспечивать конечность энергии частицы. Самым прямым и физически прозрачным является условие $\psi(0) = 0$, упомянутое выше. Альтернативные способы компенсации кулоновской расходимости через более сложные условия, но уже не имеющие такой очевидной физической интерпретации, рассмотрены в [7, 8, 21–25]. 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 [33] тот же самый вывод обоснован путем предельного перехода от трехмерной задачи.

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. Как и в шредингеровском случае, для нерегуляризованного потенциала (1) соответствующий дираковский гамильтониан оказывается несамосопряженным для всех значений константы связи q , а в [34, 35] было показано, что у дираковской частицы в потенциале (1) связанные состояния должны отсутствовать.

В данной 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 процесса опускания уровней дираковской частицы в отрицательный континуум, которые будут иметь место при переходе к пределу $\delta \rightarrow 0$, включая такие как наличие вполне содержательной спектроскопической картины для сколь угодно малого $\delta > 0$ и бесконечный рост числа нулей у волновой функции 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 является 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 несамосопряженность нерегуляризованной дираковской задачи для одномерного атома водорода по сравнению со шредингеровским случаем имеет существенно более общий характер и проявляется в отсутствии не только дискретного, но и непрерывного спектров, т.е. в отсутствии содержательной спектральной задачи как таковой. В качестве первого обоснования этого вывода рассмотрим выражение для дираковского функционала энергии

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

Его конечность предполагает снова $\psi(0) = 0$ или 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 волновой функции $\text{const} \times z^{iq}$ 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 в отрицательный континуум теперь 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 уравнение Дирака с потенциалом (4) рассматривалось в [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 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].

**СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЦЫ ДИРАКА
В ОДНОМЕРНОМ РЕГУЛЯРИЗОВАННОМ «КУЛОНОВСКОМ» ПОТЕНЦИАЛЕ**

В рассматриваемом случае стационарное уравнение Дирака 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, длины — соответствующая комптоновская длина, что реализуется заменой $E \rightarrow \epsilon m$, $z \rightarrow z/m$, $\delta \rightarrow \delta/m$, 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] волновые функции связанных состояний выражаются через функции Уиттекера. В данном случае, однако, значительно удобнее использовать метод Фробениуса (см., например, [37] и приведенный там список литературы), применение которого к данной системе позволяет представить ее решение на положительной полуоси $z \geq 0$ с точностью до общего постоянного множителя в следующем виде:

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

где

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

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

$\Phi(b, c, x)$ — 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

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

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

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

для четного случая и

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

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 (11) фазовый множитель λ из уравнений (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

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

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, так как для дискретного спектра $0 < \gamma < 1$. Поскольку наше решение уравнения (7) построено на функциях Куммера, то для таких предельно малых δ в формулах (14) величины $\Phi_0, \Phi_0(b+)$ без какой-либо существенной потери точности можно заменить на единицы, что приводит к значительно более простым уравнениям на спектр:

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

где знаки « \pm » соответствуют четному и нечетному случаям соответственно. Легко видеть, что уравнение (15) инвариантно относительно мультипликативной замены параметра обрезания следующего 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 1) совпадают, если начальное δ_0 само по себе достаточно мало. Обратим также внимание, что такая мультипликативная инвариантность спектра имеет место только в сторону уменьшения параметра обрезания. Кроме того, при замене $\delta \rightarrow \delta e^{-\pi/2q}$ четные и нечетные уровни меняются местами. Поведение энергетических уровней как функций переменной $X = -\ln \delta$ показано на рис. 1, на котором приведен результат численного решения уравнения (14а, б) для двух нижних уровней — четного и следующего за ним нечетного при константе связи $q = 1/137$.

На рис. 1 хорошо видно, как с уменьшением δ от стартового значения $\delta_0 = 1$ нижние уровни последовательно один за другим опускаются в отрицательный континуум с шагом $\pi/2q$ по переменной X , четность нижнего уровня меняется с тем же периодом, а число нулей волновой функции нижнего состояния постоянно увеличивается. Эффект

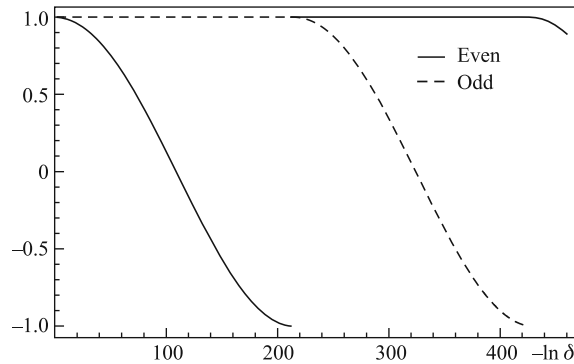


Рис. 1. Поведение нижних уровней связанных состояний дираковской частицы в потенциале (4) как функция параметра $X = -\ln \delta$

увеличения нулей нижнего уровня легко пояснить следующим образом. При $\delta_0 = 1$ спектр связанных состояний уравнения (6) является типичным кулоновским спектром, в котором основным состоянием является четный уровень с $\epsilon_0 = 0,999337$ (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 спускаются к порогу верхнего континуума при $\epsilon = 1$. Теперь начинаем изменять δ в сторону уменьшения начиная с $\delta_0 = 1$. После опускания в отрицательный континуум исходного основного состояния за интервал $\pi/2q$ изменения параметра X нижним уровнем становится тот, который был первым нечетным при $\delta_0 = 1$, причем его энергия теперь будет равна ϵ_0 , на следующем шаге $\pi/2q$ по X он также опускается в нижний континуум, а на его место встает 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 континуумом будет либо четный, либо нечетный уровень с постоянно растущим числом нулей, а предельного спектра связанных состояний как такового 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

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

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 $A(0) = 0$. Значения параметра $X = -\ln \delta$ для первых 6 уровней чередующейся четности, полученные из решения соответствующих трансцендентных уравнений при $q = 1/137$, показаны в табл. 1. Эти результаты наглядно демон-

Таблица 1. Значения параметра $X = -\ln \delta$ для первых 6 уровней чередующейся четности, при которых соответствующий уровень достигает порога отрицательного континуума

Уровень	1 – even	1 – odd	2 – even	2 – odd	3 – even	3 – odd
$-\ln \delta$	212,127	427,326	642,525	857,724	1072,92	1288,12

стрируют квазипериодичность по X с шагом $\pi/2q$, которая становится все более точной с ростом X .

Из явного вида (17) ВФ уровней при $\epsilon = \epsilon_1 = -1$ легко установить также изменение четности и увеличение числа нулей каждого следующего уровня, достигшего отрицательного континуума. Действительно, функция Макдональда с мнимым индексом $K_{i\nu}(z)$ при $z \rightarrow 0$ осциллирует как $\sin(\nu \ln z)$. Поэтому с каждым следующим уровнем значения δ и тем самым аргумента K -функций в (17) при $z = 0$ будут сдвигаться к нулю таким образом, чтобы каждая из спинорных компонент приобрела на один нуль больше и четность уровня изменилась. А поскольку в течение всей эволюции уровня от $\epsilon_0 \simeq 1$ до $\epsilon_1 = -1$ его четность и число нулей не меняется, то число нулей уровня на пороге отрицательного континуума однозначно определяет четность и число нулей его прообраза — нижнего дискретного уровня на интервале $\pi/2q$ по X вплоть до достижения этим уровнем порогового значения ϵ_1 .

Следует специально отметить, что такая периодичность в зависимости 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 (16) в явном виде зависимость от исходных размерных параметров в константе связи q , а именно

$$q = e_1 e_2 / \hbar c, \quad (18)$$

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

$$\delta \rightarrow \delta \exp \left[-\frac{\pi \hbar c}{e_1 e_2} \right]. \quad (19)$$

Поскольку $\exp[-\pi \hbar c / e_1 e_2]$ не имеет степенного разложения по $1/c$ при $c \rightarrow \infty$, из (19) непосредственно следует, что в рамках квазирелятивистского разложения уравнения Дирака такая мультипликативная (квази)периодичность спектра по параметру обрезания не проявляется ни в каком конечном порядке разложения по $1/c$, а возникает как чисто непертурбативный эффект в результате суммирования всего ряда.

Представляет также определенный интерес сравнить 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 уравнением Дирака. Результаты сравнения представлены в табл. 2.

Из табл. 2 хорошо видно, что энергия связи основного состояния в шредингеровском случае всегда больше, чем для частицы Дирака. Этот результат показан на рис. 2 для интервала изменения δ от $\delta_0 = 1$ до момента погружения дираковского уровня в отрицательный континуум.

Такое различие в поведении основного состояния между шредингеровским и дираковским случаями легко понять, если учесть разницу в поведении их ВФ. В шредингеровском

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_{Sh}	0,99933692	0,9982152	0,996248	0,74332	0,03126	-1,33296	-3,16378

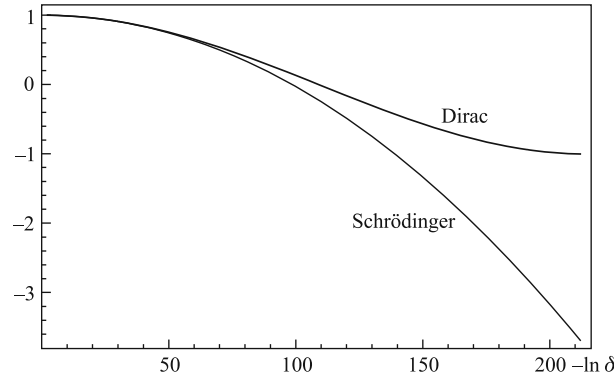


Рис. 2. Энергии основных состояний дираковской и шредингеровской частиц как функции параметра $X = -\ln \delta$

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 $\exp(-\gamma|z|)$. Когда уровень опускается от значения $\epsilon_0 \simeq 1$ вниз до $\epsilon = 0$, параметр γ изменяется от $\gamma_0 \ll 1$ до $\gamma = 1$ при $\epsilon = 0$. Тем самым область локализации ВФ уровня будет сначала сжиматься от «атомного» масштаба $\sim 1/q$, 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 гораздо медленнее, до размера $\simeq \sqrt{3/128}/q$, определяемого асимптотикой ВФ (17) на границе отрицательного континуума, пропорциональной $\exp(-\sqrt{8q|z|})$. А поскольку вклад кулоновской сингулярности в энергию уровня дираковской частицы (5) определяется интегралом $\int dz V_\delta(z)\psi^+\psi$, то он растет 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 минимален, что полностью подтверждается результатами численных расчетов, приведенных на рис. 2. И такая разница кривизн есть снова результат релятивистских эффектов, учитываемых уравнением Дирака.

Отметим также, что в случае релятивистского уравнения Клейна–Гордона потенциал (4), рассматриваемый как электростатический, приводит к еще более быстрому росту энергии связи, чем для шредингеровского случая [38, 39], поскольку теперь спектральное уравнение будет содержать еще и квадратичный член $-q^2/(|z| + \delta)^2$. В част-

ности, в клейн-гордоновском случае основное состояние имеет нулевую энергию (с учетом массы покоя) при значении параметра обрезания, приведенного к используемым в этой работе безразмерным единицам, порядка $5 \cdot 10^{-5}$. Это значит, что 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 уравнений Дирака и Клейна–Гордона будут разных знаков.

ЭВОЛЮЦИЯ УРОВНЕЙ С НАЧАЛЬНОЙ ЭНЕРГИЕЙ $\epsilon > 1$ ПРИ СНЯТИИ 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 уравнения Дирака естественным способом удержания частицы в ящике со стенками при $z = \pm L$ являются граничные условия конфинмента, 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 волновые функции непосредственно через вырожденные гипергеометрические функции Куммера, в результате чего на положительной полуоси $z \geq 0$ получим для них следующие выражения:

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

где опущен общий постоянный множитель,

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

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

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 $\exp(\pm ik\delta)$ на единицы, которая при $k\delta \ll 1$ является вполне обоснованным упрощением

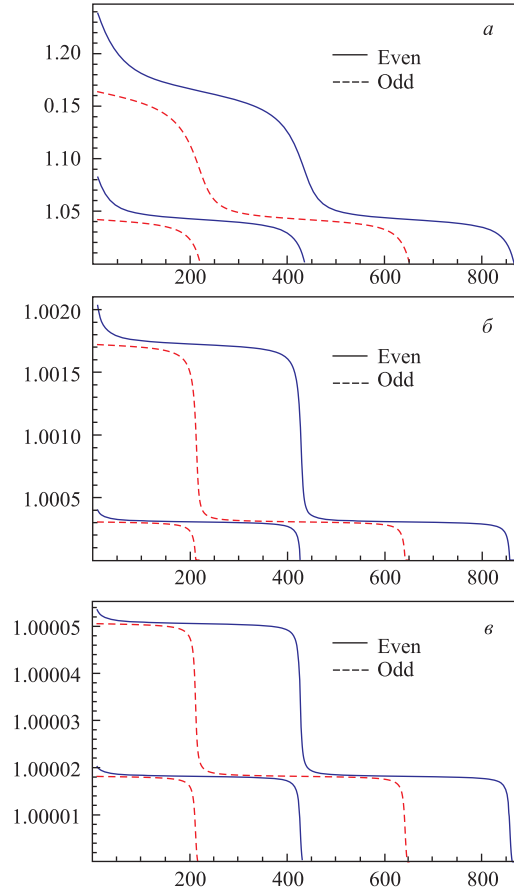


Рис. 3. Эволюция нижних уровней положительного континуума по переменной $X = -\ln \delta$ при $L = 10, 100, 1000$ соответственно

для уровней в интервале энергий $|\epsilon| \ll 1/\delta$. В результате для таких уровней получаем трансцендентное уравнение следующего вида:

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

где

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

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. 3, *a-c* 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. 3, *a*, равно как и плавный переход к квазинепрерывному пределу на рис. 3, *в* при $L = 1000$.

Следующий результат подтверждает предварительный вывод, сделанный на основе анализа дираковского функционала энергии (5), что кулоновская сингулярность в одномерном уравнении Дирака является доминирующим эффектом для всех уровней, включая 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 опускаются неограниченно глубоко вниз, причем этот процесс повторяется с периодичностью $\pi/2q$ по переменной X для каждого следующего уровня. Это непосредственно следует из решения уравнений на уровни частицы, удерживаемой на отрезке $[-L, +L]$ граничными условиями (20), сразу для всех энергетических интервалов. При $\epsilon > 1$ уровни определяются из уравнения (25), при $|\epsilon| < 1$ и $\epsilon < -1$ — из уравнений

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

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

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

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

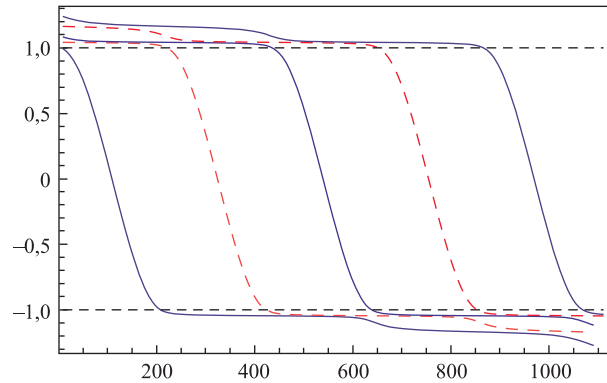


Рис. 4. Эволюция по $X = -\ln \delta$ нижних уровней с положительной энергией. $L = 10$, $q = 1/137$

Результат численного решения уравнений (25)–(28) для эволюции пяти уровней, которые при начальном значении $\delta = \delta_0$ были нижними положительно-частотными, представлен на рис. 4. Необходимо отметить, что непосредственно при $\epsilon = \pm 1$ прямое численное решение уравнений (25)–(28) не проходит 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.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение отметим, что такая (квази)периодичность по параметру обрезания имеет сразу несколько аспектов. Прежде всего, она однозначно показывает, что для нерегуляризованного одномерного уравнения Дирака с «кулоновским» потенциалом (1) предельного спектра не существует ни для связанных состояний, ни для непрерывного спектра. Здесь следует заметить, что согласно известным теоремам функционального анализа у симметрического оператора в гильбертовом пространстве всегда существует самосопряженное расширение [41–43]. В частности, в работе [44] показано, как на этой основе можно математически корректно определить дираковский оператор для точечного кулоновского источника с зарядом $Z > 137$ в случае трех пространственных измерений, хотя физическая интерпретация такого самосопряженного расширения не является очевидной. Поэтому формальное доопределение спектральной задачи для одномерного уравнения Дирака с нерегуляризованным потенциалом (1) в принципе также возможно. Однако наш анализ показывает, что придать физический смысл такому расширению будет еще сложнее, чем для трехмерного случая при $Z > 137$, поскольку если в последнем случае возможна экстраполяция из физически содержательной области значений заряда $Z < 137$ и/или состояний с угловым моментом $j + 1/2 > Z\alpha$, то в одномерном случае доопределение задачи требуется для всех значений q .

В то же время рассмотренные в данной работе свойства спектральной задачи (6) показывают, что при любом сколь угодно малом $\delta > 0$ она будет иметь вполне содержательный набор энергетических уровней, включающий как дискретную часть типичной кулоновской структуры, так и непрерывный спектр, и ничем принципиально не отличающийся от той спектроскопической 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, и наличии при $\delta < \exp(-\pi/2q)$ уровней, опустившихся в отрицательный континуум из положительно-частотной области. Поэтому при таких значениях δ последовательная интерпретация такого спектра может быть получена только в терминах вторично-квантованного дираковского поля, что полностью согласуется с тем обстоятельством, что (квази)периодичность спектра по δ есть существенно релятивистский эффект.

Работа выполнена при поддержке ФЦП «Кадры» по лоту 2009.-1.1-125-055, г/к №02.740.11.0243.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Elliott R. J., Loudon R. // J. Phys. Chem. Solids. 1960. V. 15. P. 196.
2. Cole M. W., Cohen M. H. // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 23. P. 1238.

3. Dykman M. I., Platzman P. M., Seddighrad P. // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. P. 155402.
4. Imbo T. D., Sukhatme U. P. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 2184.
5. Ghalim M., Barmaki S., Mastour F. // AIP Conf. Proc. 2001. V. 574. P. 280.
6. Wong C. M. et al. // J. Phys. Chem. B. 1999. V. 103. P. 282.
7. Cornean H. D., Duclos P., Pedersen T. D. // Few-Body Syst. 2004. V. 34. P. 155.
8. Carbon Nanotubes: Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications. Springer Series «Topics in Applied Physics». Berlin; Heidelberg, 2008.
9. Care C. M. // J. Phys. C: Solid State Phys. 1972. V. 5. P. 1799.
10. Cole M. W. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. P. 4239.
11. Nieto M. M. // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. P. 034901.
12. Делоне Н. Б., Крайнов В. П., Шепелянский Д. Л. // УФН. 1983. Т. 26. С. 551.
13. Jensen R. V., Susskind S. M., Sanders M. M. // Phys. Rep. 1991. V. 201. P. 1.
14. Ue-Li Pen, Jiang T. F. // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 4297.
15. Lopez-Castillo A., de Oliveira C. R. // Chaos Sol. Fract. 2003. V. 15. P. 859–869.
16. Roessner W. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1984. V. 17. P. 29.
17. Либерман М. А., Йоханссон Б. // УФН. 1995. Т. 165. С. 121.
18. Guan X., Li B., Taylor K. T. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2003. V. 36. P. 3569.
19. Loudon R. // Am. J. Phys. 1959. V. 27. P. 649.
20. Fisher W., Leschke H., Mueller P. // J. Math. Phys. 1995. V. 36. P. 2313.
21. de Oliveira C. R., Verri A. A. // Ann. Phys. 2009. V. 324. P. 251.
22. Andrews M. // Am. J. Phys. 1966. V. 34. P. 1194.
23. Kurasov P. // J. Phys. A: Math. Gen. 1996. V. 29. P. 1767.
24. Moshinsky M. // J. Phys. A: Math. Gen. 1993. V. 26. P. 2445.
25. Newton R. G. // J. Phys. A: Math. Gen. 1984. V. 27. P. 4717.
26. Nouri S. // Phys. Rev. A. 2002. V. 65. P. 062108.
27. Tsuitsui I., Fueleop R., Cheon T. // J. Phys. A: Math. Gen. 2003. V. 36. P. 275.
28. Jaramillo B. et al. // Phys. Lett. A. 2009. V. 374. P. 150.
29. Kostov M. K., Cole M. W., Mahan G. D. // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 075407.
30. Gesztesy F. // J. Phys. A: Math. Gen. 1980. V. 13. P. 867.
31. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Задача № 19. Т. 1. М.: Мир, 1974.
32. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Т. 3. М.: Наука, 1974.
33. de Oliveira C. R. // Phys. Lett. A. 2010. V. 374. P. 2805.
34. Coutinho F. A. B., Nogami Y. // Phys. Lett. A. 1987. V. 124. P. 211.
35. Moss R. E. // Am. J. Phys. 1987. V. 55. P. 397.
36. Крайнов В. П. // ЖЭТФ. 1973. Т. 64. С. 800.
37. Славянов С., Лай В. Специальные функции. Единая теория, основанная на анализе особенностей. СПб.: Невский диалект, 2002.
38. Barton G. // J. Phys. A: Math. Gen. 2007. V. 40. P. 1011.
39. Hall R. L. // Phys. Lett. A. 2007. V. 372. P. 12.
40. Chodos A. et al. // Phys. Rev. D. 1974. V. 9. P. 3471.
41. von Neumann J. // Mat. Ann. 1929. V. 102. P. 49–131.
42. Stone M. H. Linear Transformations in Hilbert Space and Their Applications to Analysis // Am. Math. Soc. Colloq. Publ. V. 15. N. Y.: AMS, 1932.
43. de Oliveira C. R. Intermediate Spectral Theory and Quantum Dynamics. Birkhauser: Basel, 2009.
44. Воронов Б. Л., Гитман Д. Т., Тютин И. В. // ТМФ. 2007. Т. 150. С. 41.

Получено 28 декабря 2011 г.