

Санкт-Петербургский государственный университет

**ДАНИЛОВ Александр Андреевич**

**Выпускная квалификационная работа**

***Уравнение Дирака для двухцентрового потенциала в присутствии внешнего поля***

Уровень образования: *бакалавриат*

Направление *03.03.02 «Физика»*

Основная образовательная программа *СВ.5011.2019 «Физика»*

Научный руководитель:

доцент,  
кафедра квантовой механики СПбГУ,  
к.ф.-м.н., без у/з,  
Глазов Дмитрий Алексеевич

Рецензент:

научный сотрудник,  
ФГБУ «Петербургский институт  
ядерной физики им. Б.П. Константинова  
Национального исследовательского центра  
«Курчатовский институт»,  
к.ф.-м.н., без у/з,  
Суясова Марина Вадимовна

Санкт-Петербург  
2023

# Содержание

<b>1. Введение</b>	<b>3</b>
<b>2. Легкие квазимолекулы в отсутствие внешнего поля</b>	<b>6</b>
2.1. Дуальный кинетический баланс для систем с аксиальной симметрией(А-ДКБ).....	6
2.2. Результаты.....	11
2.2.1. Основное и первые возбужденные состояния.....	11
2.2.2. Расчет релятивистской поправки.....	13
<b>3. Легкие квазимолекулы в присутствии внешнего поля</b>	<b>15</b>
3.1. А-ДКБ в присутствии однородного сильного магнитного поля.....	15
3.2. Результаты.....	16
<b>4. Тяжелые квазимолекулы в присутствии внешнего поля</b>	<b>19</b>
4.1. Проблема критического заряда в сильных полях.....	19
<b>5. Заключение</b>	<b>20</b>
<i>Приложение А. Экзотические легкие квазимолекулы</i>	<b>21</b>
<i>Список литературы</i>	<b>23</b>

# 1. Введение

Исследование квазимолекул (двухцентровых систем) представляет собой огромный теоретический и практический интерес в широком спектре задач, от хорошо изученных водородоподобных систем в слабых полях [1] до сложных эффектов в области сильных и сверхсильных полей [2]. Так, например, тяжелые квазимолекулы привлекли особое внимание за счет явлений квантовой электродинамики (КЭД) в сильных полях [3].

Более подробно остановимся на термине «квазимолекула» и продемонстрируем, что он означает. Квазимолекула представляет собой двухцентровую систему ядер, изображенную на рис. 1.

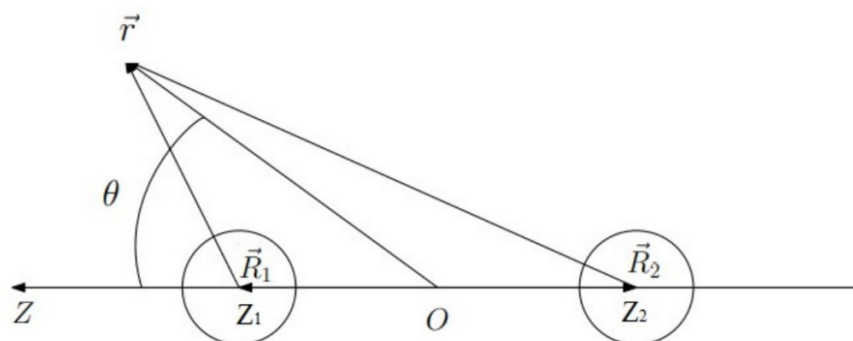


Рис. 1. Система двух ядер

Сразу отметим аксиальную симметрию вдоль оси, проходящей через центры ядер. Потенциал таких систем может быть определен (здесь и далее используем релятивистскую систему единиц, т. е.  $\hbar = c = m_e = 1$ ) по формуле:

$$V(Z_1, Z_2, \mathbf{r}) = V_{nucl}(Z_1, |\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|) + V_{nucl}(Z_2, |\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|) = -\frac{\alpha Z_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|} - \frac{\alpha Z_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|}, \quad (1)$$

Где  $V_{nucl}(Z, \mathbf{r})$  — потенциал притяжения ядра,  $\mathbf{R}_1$  и  $\mathbf{R}_2$  — радиус-векторы центров ядер, а  $Z_1$  и  $Z_2$  — их заряды соответственно.

Отметим также, что для потенциалов, не обладающих сферической симметрией (что существенно упрощает анализ) применяют разложение исходного потенциала в мультипольный ряд:

$$V(Z_1, Z_2, \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} V_l(r) P_l(\cos \theta) , \quad (2)$$

где

$$V_l(r) = \frac{2l+1}{2} \int_0^\pi d\theta \sin \theta [V_{nucl}(Z_1, |\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|) + V_{nucl}(Z_2, |\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|)] P_l(\cos \theta) \quad (3)$$

и  $P_l(\cos \theta)$  — полиномы Лежандра, а угол  $\theta$  выбирается согласовано с осью симметрии системы молекулы (ось  $z$  на рис. 1). Зачастую для упрощения расчетов в этом приближении считают только первый член ряда, то есть монопольный вклад, что сводит исходный потенциал к сферически симметричному.

Подобная задача также рассматривалась в работах [4-8], большинство которых опираются на разложение по парциальным волнам в системе центра масс, которое хуже воспроизводит двухцентровой потенциал с увеличением межъядерного расстояния в отличие от метода, применяемого в данной работе.

Здесь стоит провести границу между легкими и тяжелыми квазимолекулами, так как легкие системы в основном исследуются пертурбативными методами, что вполне оправдано малостью параметра разложения  $\alpha Z$ , где  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$  — постоянная тонкой структуры, в случае слабозаряженных ядер. Тяжелые же квазимолекулы требуют расчетов всех порядков по  $\alpha Z$  для построения прецизионной электронной структуры.

В данной же работе мы используем метод, который показал свою эффективность для случая тяжелых квазимолекул в отсутствие внешних полей [9-11], для полностью релятивистских расчетов квазимолекул во внешних полях. Метод основан на разложении искомой волновой функции по конечному базисному набору В-сплайнов [12, 13] с наложенными условиями дуального кинетического баланса [14], обобщенного на случай аксиально симметричных систем [15].

На сегодняшний день все работы по сильным магнитным полям носят теоретический характер [2], так как речь идет о полях порядка  $H \approx 10^5$  Тл. Такие напряженности можно наблюдать в астрофизике [16, 17], но в земных лабораториях реализуемые магнитные поля ограничиваются величиной порядка 100 Тл [18, 19].

В данной работе мы численный релятивистский подход к определению электронной структуры квазимолекул: оценим вклад высших степеней по  $\alpha Z$  для легких квазимолекул, обобщим метод на случай внешних полей, исследуем поведение систем в сильных магнитных полях. Мы будем рассматривать зависимость электронной структуры квазимолекул от величины внешнего поля и межъядерного расстояния, что особенно важно в случае тяжелых квазимолекул при суммарном ядерном заряде  $Z > 173$  (когда электронное состояние погружается в отрицательный дираковский континуум)[20-23].

## 2. Легкие квазимолекулы в отсутствии внешнего поля

### 2.1. Дуальный кинетический баланс для систем с аксиальной симметрией (А-ДКБ)

Начнем с рассмотрения метода на простейшем примере - двухцентровой потенциал, определенный, по формуле (1) в отсутствие внешнего поля. Будем решать релятивистскую задачу — стационарное уравнения Дирака для электрона в приближении Борна — Оппенгеймера:

$$\hat{H}_D \Psi_n(\mathbf{r}) = E_n \Psi_n(\mathbf{r}) , \quad (4)$$

Где  $\hat{H}_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + V(Z_1, Z_2, \mathbf{r}) + \beta$  — гамильтониан Дирака, в котором  $\mathbf{p} = -i \nabla$  — оператор импульса,  $\beta = \begin{pmatrix} I & O \\ O & -I \end{pmatrix}$ , а  $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ \sigma_j & O \end{pmatrix}$ ,  $j \in \{x, y, z\}$

В случае системы со сферически симметричным потенциалом есть много хорошо проверенных методов нахождения волновой функции через разложение искомого решения в конечный ряд базисных функций. Но в таком случае возникает проблема появления ложных (шпуриозных) состояний [24], специфичных для уравнения Дирака (в силу неограниченности спектра снизу). Для устранения этих ложных состояний на базисные функции накладываются условия дуального кинетического баланса (ДКБ) [14].

В нашей задаче для двухатомной квазимолекулы сферическая симметрия нарушается, полный момент импульса электрона  $J$  уже не будет сохраняться, что затрудняет анализ. Но, как уже упоминалось ранее, в нашей задаче присутствует аксиальная симметрия (вдоль оси  $z$ ), что позволяет применить обобщение метода ДКБ для уравнения Дирака (4) на случай аксиально симметричных полей (в дальнейшем будем ссылаться на этот метод, как на метод А-ДКБ).

Рассмотрим этот подход более подробно. В случае аксиально симметричного потенциала сохраняется  $J_z$  — проекция полного момента импульса, так как она коммутирует с гамильтонианом системы:

$$[\hat{J}_z, \hat{H}_D] = 0 \quad (5)$$

Значит,  $\hat{H}_D$  и  $J_z$  обладают общим набором собственных функций. Тогда, искомое решение(биспинор) в сферической системе координат запишется в виде:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} G_1(r, \theta) e^{i(m_j-1/2)\phi} \\ G_2(r, \theta) e^{i(m_j+1/2)\phi} \\ iF_1(r, \theta) e^{i(m_j-1/2)\phi} \\ iF_2(r, \theta) e^{i(m_j+1/2)\phi} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где  $m_j$  - собственное значение оператора  $\hat{J}_z$ , то есть проекция полного момента электрона на ось квазимолекулы.

Подстановка волновой функции в виде (6) в уравнение Дирака (4) дает следующий результат:

$$\hat{H}_{m_j} \Phi = E \Phi, \quad (7)$$

где

$$\Phi(r, \theta) = \begin{pmatrix} G_1(r, \theta) \\ G_2(r, \theta) \\ F_1(r, \theta) \\ F_2(r, \theta) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

а оператор  $\hat{H}_{m_j}$  имеет вид:

$$\hat{H}_{m_j} = \begin{pmatrix} 1 + \hat{V} & \hat{D}_{m_j} \\ -\hat{D}_{m_j} & -1 + \hat{V} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где  $\hat{V} = V(Z_1, Z_2, \mathbf{r})$  — двухцентрковой потенциал ядер, а

$$D_{m_j} = (\sigma_z \cos \theta + \sigma_x \sin \theta) \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \right) + \frac{1}{r} (\sigma_x \cos \theta - \sigma_z \sin \theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \left( i m_j \sigma_y + \frac{1}{2} \sigma_x \right). \quad (10)$$

Таким образом, мы свели исходную задачу к численному решению задачи (7).

Теперь кратко опишем использованный численный метод (более подробное описание можно найти в [15]). Раскладываем искомые волновые функции (8) в конечную сумму базисных функций  $\{W_{ij}\}_{i=1}^N$  с коэффициентами  $\{C_i\}_{i=1}^N$ , то есть:

$$\Phi(r, \theta) \simeq \sum_{i=1}^N C_i W_i(r, \theta) , \quad (11)$$

сведем исходную задачу к вариационной задаче Ритца с граничными условиями  $\Phi(r, \theta)|_{r=0} = \lim_{r \rightarrow \infty} \Phi(r, \theta) = 0$  :

$$\delta S = 0 , \text{ где } S = \langle \Phi | \hat{H}_m | \Phi \rangle - E \langle \Phi | \Phi \rangle . \quad (12)$$

Скалярное произведение в пространстве функций  $\Phi$  определяется как:

$$\langle \Phi^a | \Phi^b \rangle = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \sin \theta (G_1^a G_1^b + G_2^a G_2^b + F_1^a F_1^b + F_2^a F_2^b) \quad (13)$$

Подставляя разложение (11) в формулу (12), получаем систему алгебраических уравнений для коэффициентов  $\{C_i\}_{i=1}^N$  :

$$\frac{dS}{dC_i} = 0 , \quad (14)$$

что приводит к системе на собственные значения гамильтониана (секулярному уравнению):

$$\sum_{j=1}^N H_{ij} C_j = E \sum_{j=1}^N S_{ij} C_j , \quad (15)$$



где элементы матрицы гамильтониана  $H_{ij}$  и матрицы перекрытия  $S_{ij}$  определяются следующим образом:

$$H_{ij} = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \sin \theta W_i^\dagger(r, \theta) \hat{H}_m W_j(r, \theta) , \quad (16)$$

$$S_{ij} = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \sin \theta W_i^\dagger(r, \theta) W_j(r, \theta) \quad (17)$$

Теперь для построения решения осталось описать структуру базисного пространства. Введем два набора однокомпонентных функций  $\{B_{i_r}(r)\}_{i_r=1}^{N_r}$  и  $\{Q_{i_\theta}(\theta)\}_{i_\theta=1}^{N_\theta}$ , а также стандартные базисные вектора четырёхмерного пространства  $\{e_u\}_{u=1}^4$ , где:

$$e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad e_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (18)$$

Из данных наборов составим четырехкомпонентную функцию:

$$W_i(r, \theta) := W_{i_r i_\theta}^{(u)}(r, \theta) = B_{i_r}(r) Q_{i_\theta}(\theta) e_u , \quad (19)$$

Теперь необходимо явно указать какие базисные однокомпонентные функции мы будем использовать. В качестве  $B_{i_r}(r)$  выбираются В-сплайны («би»-сплайны) некоторого порядка  $k$  (в данной работе  $k=2$ ), а в качестве  $Q_{i_\theta} = P_{i_\theta-1}(\frac{2}{\pi}\theta - 1)$  - полиномы Лежандра.

Как уже упоминалось, решения уравнения Дирака (4) в конечномерном базисе неизбежно содержат ложные состояния. Чтобы их устранить необходимо наложить условия ДКБ, которые правильным образом учитывают связь между верхними и нижними компонентами биспинора в нерелятивистском пределе. Тогда, для базисных функций имеем:

$$W_{i_r i_\theta}^{(u)}(r, \theta) = \Lambda B_{i_r}(r) Q_{i_\theta}(\theta) e_u , \quad (20)$$

где

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \hat{D}_{m_j} \\ -\frac{1}{2} \hat{D}_{m_j} & 1 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

которая и обеспечивает выполнение условий ДКБ.

Это приводит нас к следующему выражению для  $\Phi(r, \theta)$  (формула (11)):

$$\Phi(r, \theta) \simeq \sum_{u=1}^4 \sum_{i_r=1}^{N_r} \sum_{i_\theta=1}^{N_\theta} C_{i_r, i_\theta}^{(u)} W_{i_r, i_\theta}^{(u)}(r, \theta), \quad (22)$$

при этом исходный индекс  $i = (u-1)N_r N_\theta + (i_\theta - 1)N_\theta + i_r$ .

В данной работе использовались  $N_r=250$  и  $N_\theta=50$ , что оправдано хорошей численной сходимостью расчетов.

В этом пункте исследуются легкие ядра малого радиуса, поэтому в качестве модели ядра разумно использовать однородно заряженные сферы ( $r_H=0,841 \Phi_m$  [39]).

## 2.2. Результаты

### 2.2.1. Основное и первые возбужденные состояния

Будем рассматривать метод и его эффективность на примере системы  $H_2^+$ , наиболее простого и подробно рассмотренного в литературе случая [25-27]. Анализ других, необычных легких квазимолекул приведен в приложении А.

Представленный метод позволяет строить релятивистские решения уравнения Дирака для  $H_2^+$ , в то время как в прочих работах используют пертурбативный подход, решая уравнение Шредингера [28, 29].

Метод также позволяет считать возбужденные состояния, так, например, основное и первые четыре возбужденных состояния для различных межъядерных расстояний  $R$  ( $R=0,1-10$  а. е. ) представлены на рис. 2. (использованы обозначения из [30])

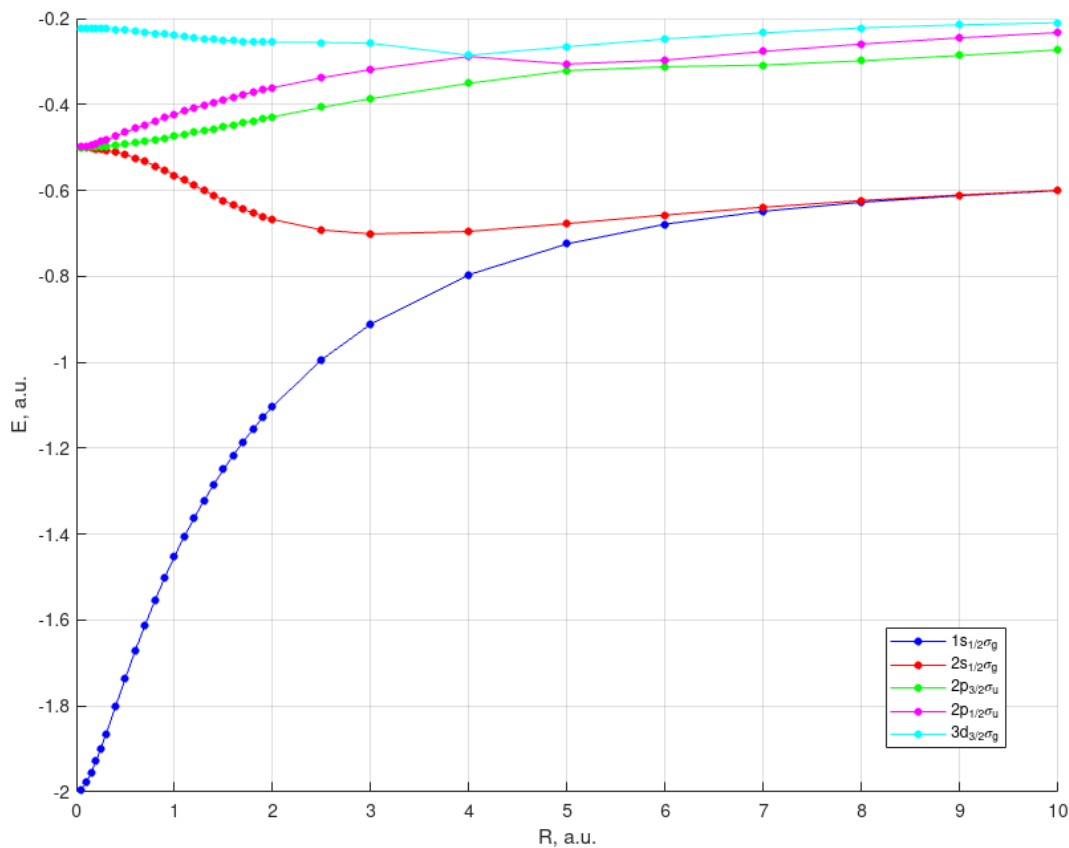


Рис. 2. Основное и первые четыре возбужденных состояния квазимолекулы водорода  $H_2^+$  для различных межъядерных расстояний.

Видно, что при малых расстояниях они асимптотически приближаются к шредингеровским энергиям нерелятивистского гелия ( $E_{sh} = -\frac{Z^2}{2n^2}$  а.е.).

По аналогии рассмотрим гетероядерную систему  $He^+ - p$ . Для нее основное и несколько первых возбужденных представлены на рис. 3.

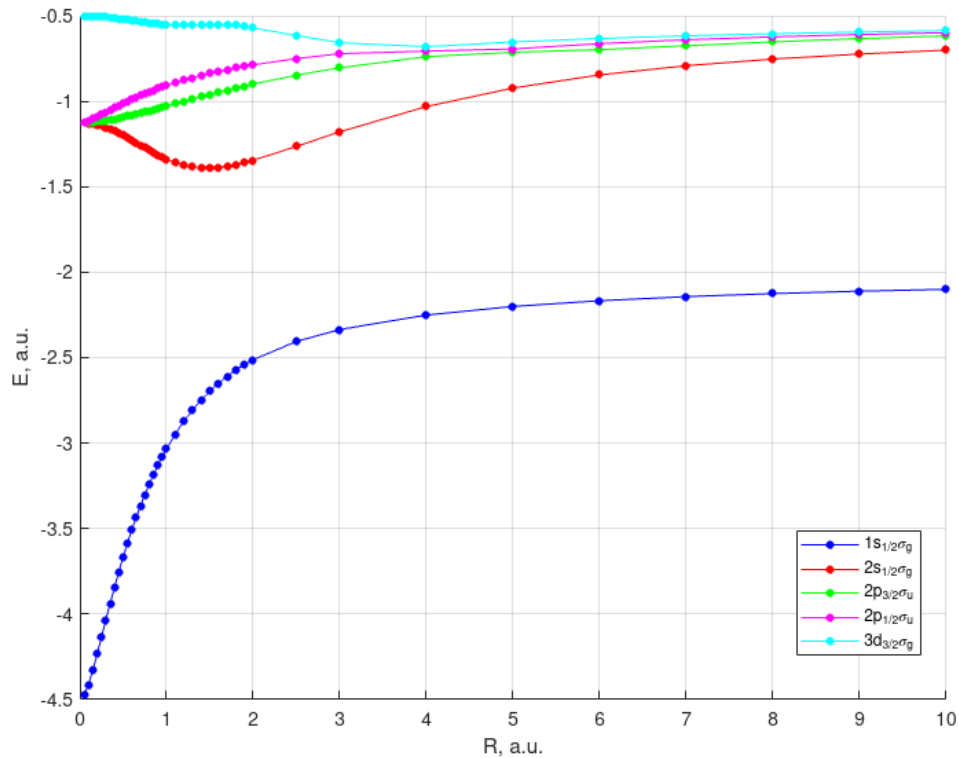


Рис. 3. Основное и первые четыре возбужденных состояния одноэлектронной квазимолекулы  $He^+ - p$  для различных межъядерных расстояний.

Видно, что при уменьшении расстояния мы приближаемся к энергиям нерелятивистского лития ( $Z_1 + Z_2 = 3$ ), а при увеличении — к энергиям гелия: электрон ожидаемо «садится» на ядро гелия.

Отметим также, что данная задача может быть обобщена на случай двух электронов с применением этого же численного метода с разложением по базисным функциям [9].

## 2.2.1. Расчет релятивистской поправки

Мы посчитали энергию основного состояния квазимолекулы водорода, сравнив ее с нулевым порядком нерелятивистской энергии [28]. Разность между полученными энергиями можно воспринимать как полную релятивистскую поправку для системы  $H_2^+$ . Будем сравнивать ее с первым порядком теории возмущений [29], что позволит нам оценить вклад высших степеней по  $\alpha Z$  (расчеты, представленные в [28] и [29], проведены одинаковым независимым от представленного в данной работе методом). Результаты представлены в табл. 1.

Таблица 1. Расчет релятивистской поправки для  $H_2^+$

$R, a.e.$	$E_{1\sigma_g}^{A-ДКБ}, a.e.$	$E^{(0)}[28], a.e.$	$\Delta E_{1\sigma_g}^{A-ДКБ}, 10^{-4} a.e.$	$\Delta E^{(1)}[29], 10^{-4} a.e.$
0,1	-1,978336308	-1,978242071	-0,94237	-1,06502709
0,2	-1,928696924	-1,928620302	-0,76622	-0,9419966836
0,5	-1,73502827	-1,734988	-0,4027	-0,7662405994
1	-1,451803699	-1,451786313	-0,17386	-0,1769152429
2	-1,102638216	-1,102634214	-0,04002	-0,07366419296
3	-0,910903911	-0,9108961973	-0,07137	-0,05481717785
4	-0,796094911	-0,7960848837	-0,0100273	-0,05305464207
5	-0,724434087	-0,7244202951	-0,13792	-0,05624989266
6	-0,678654164	-0,6786357151	-0,184489	-0,06014258448
7	-0,648474691	-0,648451147	-0,23544	-0,06306478884
8	-0,627599299	-0,6275703886	-0,289104	-0,06478883845
9	-0,612341096	-0,612306564	-0,34532	-0,06569450448
10	-0,600619115	-0,6005787289	-0,40386	-0,06613719126

Построим по данным табл. 1. соответствующий график

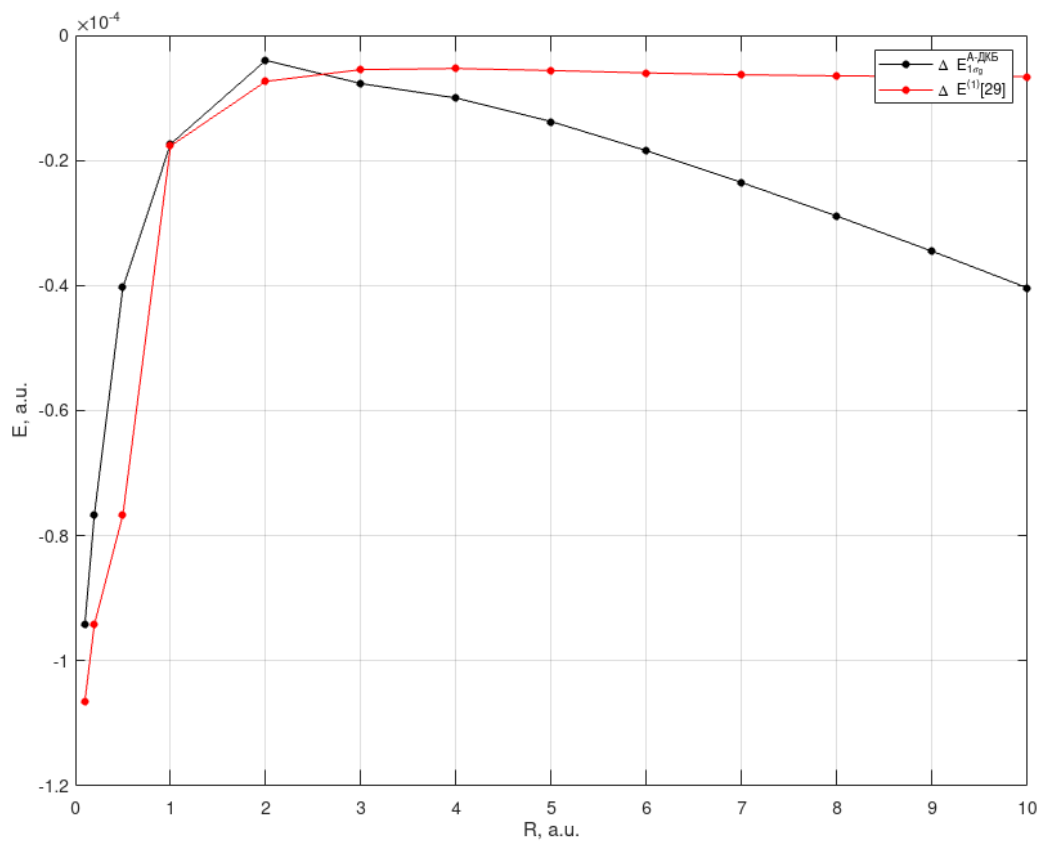


Рис. 4. Посчитанная нами релятивистская поправка (черным) и первый порядок теории возмущений [29] (красным) для квазимолекулы водорода.

Разницу между  $\Delta E_{1\sigma_g}^{A-DKB}$  и  $\Delta E^{(1)}[29]$  надо воспринимать как вклад порядков по  $\alpha Z$  старше первого.

Расчеты более высоких порядков теории возмущений в рамках нерелятивистского подхода можно найти в [31].

### 3. Легкие квазимолекулы в присутствии внешнего поля

Описанный метод также позволяет считать энергии систем во внешних полях (при условии, что они направлены вдоль оси симметрии системы — ось  $z$  на рис. 1). Данный подход подробно описан в [15], где так же представлены результаты расчетов энергии для малых магнитных и электрических полей. В данной же работе мы фокусируемся на случае квазимолекул в сильных магнитных полях.

#### 3.1. А-ДКБ в присутствии однородного магнитного поля

Будем описывать здесь подход, аналогичных тому, что представлен в п. 2.1., где гамильтониан  $\hat{H}_{m_j}$  должен быть записан как:

$$\hat{H}_{m_j} = \begin{pmatrix} 1 + \hat{V} & (\hat{D}_{m_j} + \bar{D}) \\ -(\hat{D}_{m_j} + \bar{D}) & -1 + \hat{V} \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где  $\bar{D}$  для магнитного поля имеет вид:

$$\bar{D} = -\frac{1}{2} B r (\sin \theta) i \sigma_y, \quad (24)$$

Где  $\mathbf{B} \uparrow \uparrow \mathbf{e}_z$  - напряженность магнитного поля. В остальном подход тот же, что и в случае отсутствия внешнего поля, численно решаем уравнение Дирака, используя тот же базис.

Для решения этой задачи в области полей  $B \gtrsim B_a = 2,349 \times 10^9 \text{ Гс}$  используют нерелятивистский подход [2, 32-34], но эти результаты требуют корректировки, когда становятся существенны релятивистские эффекты (это происходит при  $B \simeq B_{cr} = 4,414 \times 10^{13} \text{ Гс}$ ). Для легких квазимолекул можно говорить о том, что это поля порядка  $B \gtrsim B_\infty = 5,7 \times 10^{16} \text{ Гс}$ , что согласуется с актуальными численными расчетами. В этой области полей приводится качественная оценка энергии в работах [35, 36] и [37, 38]. Но значения приводимые там отличаются деталями и численными оценками.

### 3.2. Результаты

В данной же работе мы численно посчитаем энергии электрона в сильных магнитных полях, сравнив их с теоретической оценкой, что позволит оценить применимость метода в этой области.

В начале рассмотрим гомоядерную систему  $H_2^+$ . Построим таблицу зависимости энергий основного состояния  $E$  от величины поля  $B$  для различных межядерных расстояний  $R$ . Данные представлены в табл. 2.

Таблица 2. Зависимость энергии основного состояния от  $B$  и  $R$  для  $H_2^+$

$R, a.e.$	$B, a.e.$	$E, a.e.$
0,1	1	-2,027696042
	5	-2,212662375
	10	-2,418254726
	20	-2,763821785
	50	-3,508677398
1	1	-1,500746122
	5	-1,676244131
	10	-1,857233118
	20	-2,135216636
	50	-2,662320972
5	1	-0,648127257
	5	-0,797730275
	10	-0,931628577
	20	-1,122631547
	50	-1,480789755



Постоим по данным табл. 2 график  $E(B, R)$  .

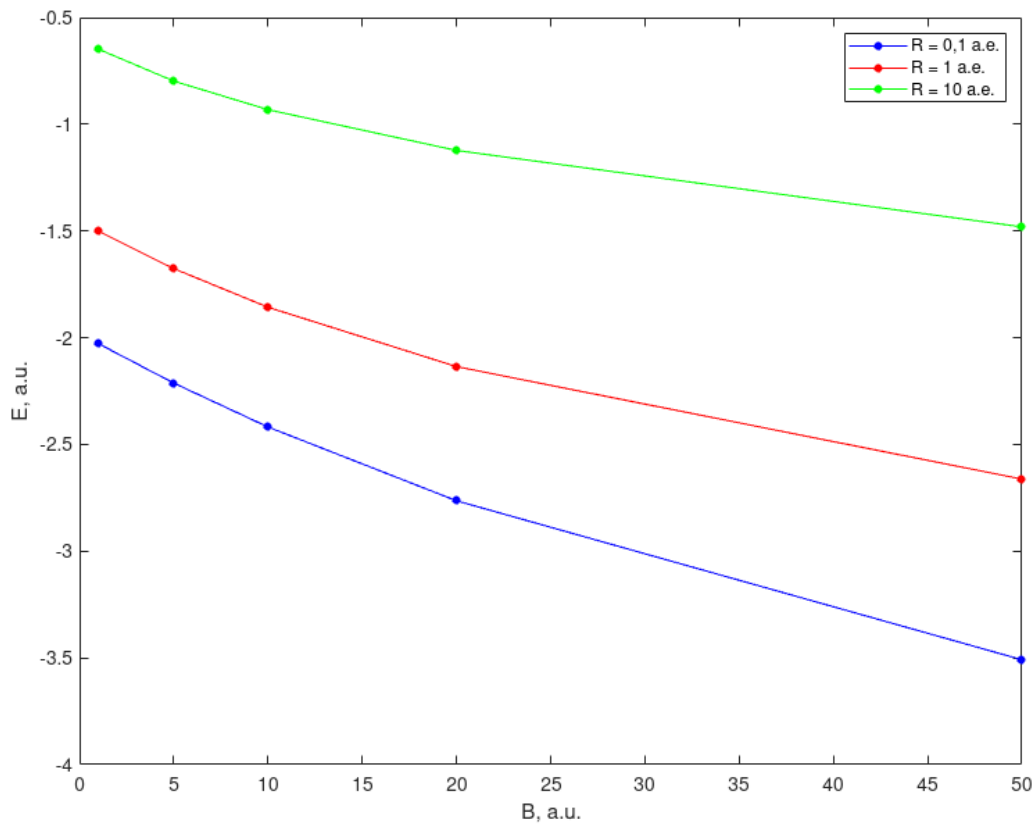


Рис. 5. Зависимость энергии основного состояния от  $B$  и  $R$  для квазимолекулы водорода  $H_2^+$  .

Аналогичный расчет был произведен для гетероядерной системы  $He^+ - p$  . Результаты представлены в табл. 3.

Таблица 3. Зависимость энергии основного состояния от  $B$  и  $R$  для  $He^+ - p$

$R, a. e.$	$B, a. e.$	$E, a. e.$
0,1	1	-4,461464853
	5	-4,654564146
	10	-4,883341054
	20	-5,302161471
	50	-6,324023111
1	1	-3,082948859
	5	-3,270761105
	10	-3,483932374
	20	-3,849921449
	50	-4,648886013

Таблица 3. Зависимость энергии основного состояния от  $B$  и  $R$  для  $He^+ - p$   
(продолжение)

$R, a.e.$	$B, a.e.$	$E, a.e.$
5	1	-2,149646652
	5	-2,334894477
	10	-2,541261232
	20	-2,889135656
	50	-3,644199183

Построим график по данным табл. 3.

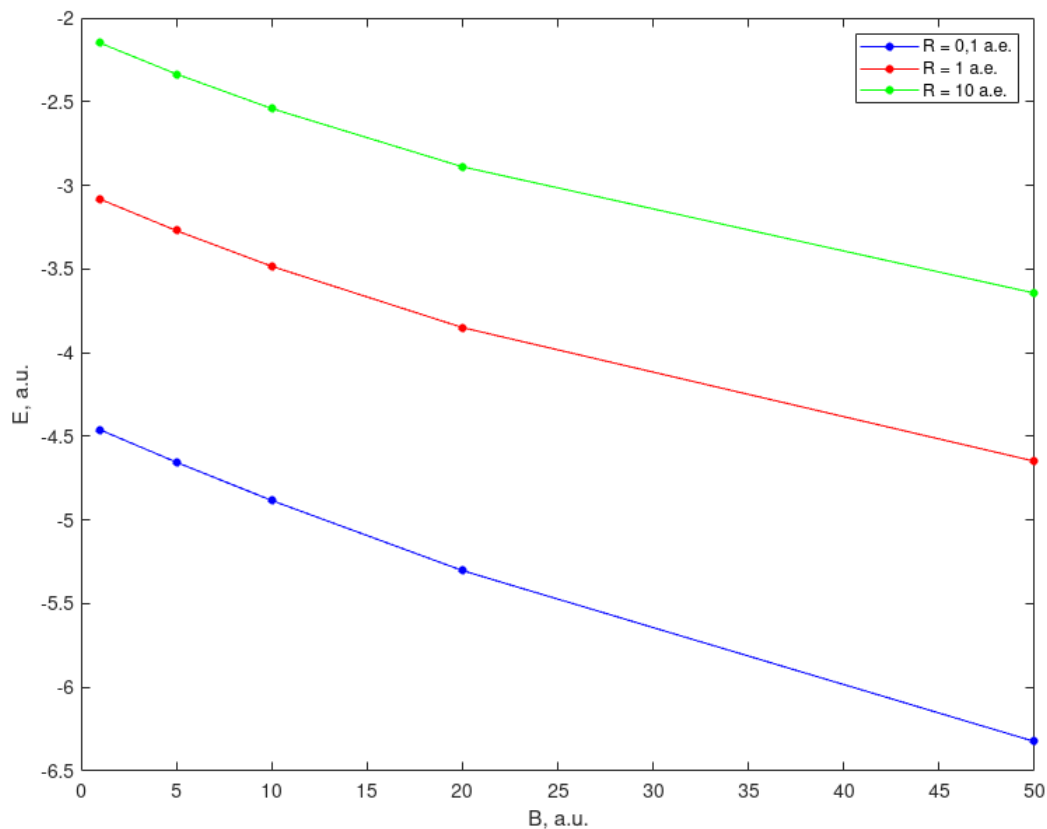


Рис. 6. Зависимость энергии основного состояния от  $B$  и  $R$  для квазимолекулы  $He^+ - p$ .

Полученные результаты подтверждают характер поведения энергий, предсказываемый теорией [38] (где также представлены расчеты для сверхсильных магнитных полей) и совпадают с асимптотиками [2].

## 4. Тяжелые квазимолекулы в присутствии внешнего поля

Куда интересней ситуация с тяжелыми квазимолекулами (например,  $U_2^{184+}$  [3, 40-42] , так как в этом случае возможно опускания атомного спектра до границы нижнего континуума, что непосредственно связано с понятием критического заряда  $Z_{cr}$  .

### 4.1. Проблема критического заряда в сильных полях

Критическим зарядом  $Z_{cr}$  в квантовой электродинамике (КЭД) называется то значение  $Z$  , при котором дискретный уровень атомного спектра опускается до границы нижнего континуума :

$$\varepsilon_0(Z_{cr}) = -m_e c^2 \quad (25)$$

Величина  $Z_{cr}$  зависит от радиуса ядра  $r_N$  , квантовых чисел уровня, формы распределения электрического заряда протонов по объёму ядра, степени ионизации внешних электронных оболочек атома [23, 43-45].

Нас же интересует влияние сильных магнитных полей на критический заряд, то есть  $Z_{cr}(B)$  . Этот вопрос подробно рассмотрен в работах [42, 46] (в том числе, для двухцентровых систем) и даются численные оценки:  $Z_{cr}=92$  при  $B \approx 5,5 \times 10^{15} \text{ Гс}$  [47],  $Z_{cr}=80$  при  $B \approx 10^{16} \text{ Гс}$  [45], основанные на свойствах энергетического спектра дираковской частицы в однородном магнитном поле.

Современная оценка [38] показывает, что из-за поляризации вакуума электрон не доходит до границы нижнего континуума, пока предельная энергия  $E_\infty^Z(B \rightarrow \infty) > -m_e$  , что выполняется для  $Z_1 + Z_2 = Z < 52$  . Для таких систем основной уровень остаётся докритическим в сколь угодно сильном магнитном поле. В случае же, когда  $Z > 52$  , то критическое состояние достигается с ростом  $B$  , что затрудняет исследование тяжелых квазимолекул в сильных (особенно, сверхсильных) магнитных полях (зависимость такой величины  $B$  от  $Z$  представлена в [35]).

При рассмотрении же случаев, где  $Z_1 + Z_2 = Z < 52$  , получаем, что общий характер поведения таких систем совпадает с характером поведения спектра легких квазимолекул, который в данной работе представлен на примере систем  $H_2^+$  и  $He^+ - p$  .

## 5. Заключение

В ходе работы был описан метод численного решения уравнения Дирака в аксиально симметричных системах, который может быть использован для решения двухцентрковой задачи, в том числе в случае наличия внешних полей.

Посчитаны основное и несколько первых возбужденных состояний для систем  $H_2^+$  и  $He^+ - p$ , определена релятивистская поправка для квазимолекулы водорода, которая позволяет оценить вклад старших по  $\alpha Z$  степеней.

Рассчитаны энергии системы  $H_2^+$  и  $He^+ - p$  в сильных магнитных полях, которые совпадают с аналитическими оценками. Также рассмотрена проблема исследования тяжелых квазимолекул в сильных магнитных полях.

## Приложение А. Экзотические легкие квазимолекулы

Данный подход позволяет рассматривать необычные легкие квазимолекулы, например  $He-\bar{p}$ . Для такой системы:  $Z_1=2, Z_2=-1$ . Здесь сфокусируемся на основном состоянии и посчитаем для него релятивистскую поправку, сравнившись с результатами работ [28] и [29]. Полученные результаты занесем в таблицу.

Таблица 4. Релятивистская поправка для  $He-\bar{p}$

$R, a.e.$	$E_{1\sigma_q}^{A-ДКБ}, a.e.$	$E^{(0)}[28], a.e.$	$\Delta E_{1\sigma_q}^{A-ДКБ}, 10^{-4} a.e.$	$\Delta E^{(1)}[29], 10^{-4} a.e.$
0,05	-0,5	-0,503190033	-0,0737	-0,07369001
0,1	-0,51	-0,512319642	-0,90656	-0,09065768
0,2	-0,55	-0,54656795	-0,14904	-0,1491556
0,3	-0,6	-0,599460134	-0,2381	-0,2377120
0,4	-0,67	-0,666873435	-0,35112	-0,3483002
0,5	-0,74	-0,74354191	-0,47376	-0,4672571
0,6	-0,82	-0,824091523	-0,59137	-0,5810971
0,7	-0,9	-0,904120219	-0,68921	-0,6811632
0,8	-0,98	-0,980642921	-0,77601	-0,7642012
0,9	-1,05	-1,0519803	-0,8463	-0,8306233
1	-1,12	-1,11741741	-0,9032	-0,8825950
2	-1,51	-1,50935848	-1,2546	-1,045220
3	-1,67	-1,66849064	-1,6070	-1,060990
4	-1,75	-1,75056788	-2,0092	-1,063764
5	-1,8	-1,80023033	-2,4789	-1,064515
6	-1,83	-1,83344373	-2,9990	-1,064781

По данным табл. 4 построим график:

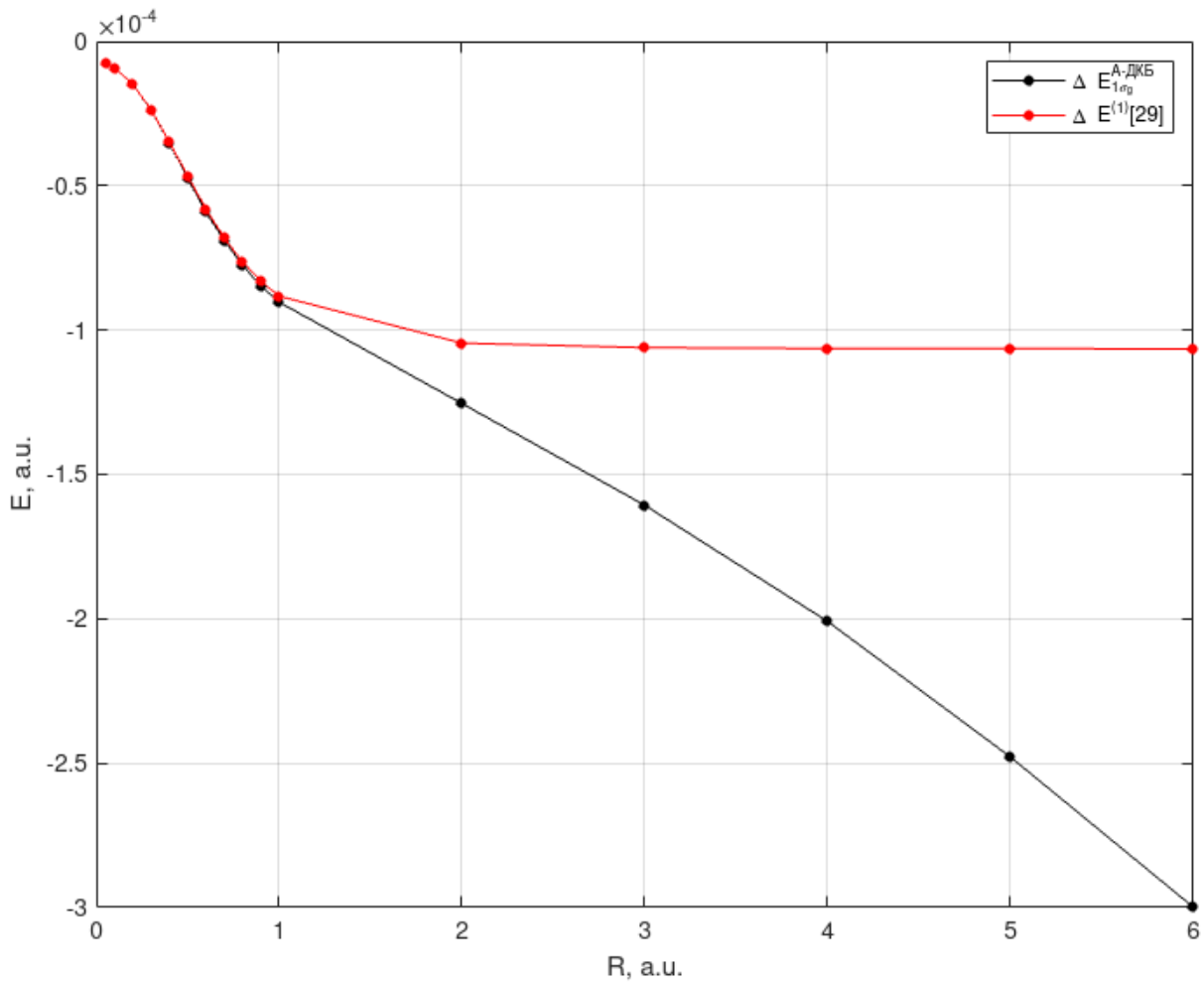


Рис. 7. Посчитанная нами релятивистская поправка (черным) и первый порядок теории возмущений [29] (красным) для квазимолекулы  $He - \bar{p}$ .

Получили график аналогичной тому, что был в п. 2.1 для  $H_2^+$ . Но здесь в отличие от  $H_2^+$  старшие порядки по  $\alpha Z$  начинают быть существенны только в области больших межъядерных расстояний.

## Список литературы

- [1] D. Fon Lindenfels et al. *Phys. Rev. A* **87**, 023412 (2013)
- [2] В. С. Попов и Б. М. Карнаков. *УФН* **184**, 3 (2014)
- [3] Б. Г. Краков и Э. С. Парилис. *УФН* **157**, 477 (3 1989)
- [4] D. V. Mironova et al. *Chem. Phys.* **449**, 10–13 (2015)
- [5] B Müller, J. Rafelski и W. Greiner. *Physics Letters B* **47.1**, 5 (1973)
- [6] J. Rafelski и B. Müller. *Physics Letters B* **65.3**, 205 (1976)
- [7] Johann Rafelski и Berndt Müller. *Phys. Rev. Lett.* **36**, 517—520 (10 1976)
- [8] A. N. Artemyev et al. *J. Phys. B* **43**, 235207 (2010)
- [9] A. A. Kotov et al. *X-Ray Spectrometry* **49.1**, 110 (2020)
- [10] A. A. Kotov et al. *Atoms* **9**, 44 (2021)
- [11] A. A. Kotov et al. *Atoms* **10**, 145 (2022)
- [12] W. R. Johnson, S. A. Blundell, and J. Sapirstein. *Phys. Rev. A* **37**, 307 (1988)
- [13] J. Sapirstein and W. R. Johnson. *J. Phys. B* **29**, 5213 (1996)
- [14] V. M. Shabaev et al. *Phys. Rev. Lett.* **93.13**, 130405 (2004)
- [15] E. B. Rozenbaum et al. *Phys. Rev. A* **89.1**, 012514 (2014)
- [16] Lai D, *Rev. Mod. Phys.* **73** 629 (2001)
- [17] Harding A K, Lai D *Rep. Prog. Phys.* **69** 2631 (2006)
- [18] Sarri G et al. *Phys. Rev. Lett.* **109** 205002 (2012)
- [19] Wagner U et al. *Phys. Rev. E* **70** 026401 (2004)
- [20] С. С. Герштейн и Я. Б. Зельдович. *ЖЭТФ* **57**, 654 (1969)
- [21] Я. Б. Зельдович и В. С. Попов. *УФН* **105**, 403 (1971)
- [22] J. Rafelski, L. P. Fulcher и A. Klein. *Physics Reports* **38.5**, 227—361 (1978)
- [23] W. Greiner, B. Müller, and J. Rafelski. *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*. Berlin: Springer-Verlag, 1985
- [24] I. I. Tupitsyn and V. M. Shabaev. *Opt. Spectrosc.* **105.2**, 183 (2008)
- [25] J. M. Taylor, Z.-C. Yan, A. Dalgarno, and J. F. Babb, *Mol. Phys.* **97**, 1 (1999)
- [26] V. I. Korobov, *Phys. Rev. A* **61**, 064503 (2000)
- [27] A Carrington et al. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 3551 (1989)

- [28] V. I. Korobov et al. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 2661-2669 (2007)
- [29] Ts. Tsogbayar and V. I. Korobov, *J. Chem. Phys.* **125**, 024308 (2006)
- [30] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Теоретическая физика*. Москва: Наука, 1974
- [31] V. I. Korobov et al. *Phys. Rev. Lett.* **112**, 103003 (2014)
- [32] Wang J-H, Hsue C-S *Phys. Rev. A* **52** 4508 (1995)
- [33] Lai D, Salpeter E E *Phys. Rev. A* **53** 152 (1996)
- [34] Kravchenko Yu P, Liberman M A, Johansson B *Phys. Rev. A* **54** 287 (1996)
- [35] Shabad A E, Usov V V, *Phys. Rev. Lett.* **98** 180403 (2007)
- [36] Shabad A E, Usov V V, *Phys. Rev. D* **77** 025001 (2008)
- [37] Machet B, Vysotsky M I, *Phys. Rev. D* **83** 025022 (2011)
- [38] Godunov S I, Machet B, Vysotsky M I, *Phys. Rev. D* **85** 044058 (2012)
- [39] A. Antognini et al. *Science* **339**, 417 (2013)
- [40] Попов В. С., *Письма в ЖЭТФ* **16** 355 (1972)
- [41] Muller B, Rafelski J, Greiner W, *Phys. Lett. B* **47** 5 (1973)
- [42] Rafelski J, Muller B, *Phys. Lett. B* **65** 205 (1976)
- [43] Зельдович Я. Б., Попов В. С., *УФН*, **105** 403 (1971)
- [44] Popov V. S, *Phys. Atom. Nucl.* **64** 367 (2001)
- [45] Schluter P et al. *J. Phys. B At. Mol. Phys.* **18** 1685 (1985)
- [46] Lisin V I, Marinov M S, Popov V S, *Phys. Lett. B* **91** 20 (1980)
- [47] Ораевский В Н, Рез А И, Семикоз В Б, *ЖЭТФ* **72** 820 (1977)