

*Письма в ЖЭТФ, том 13; стр. 359 – 362*

5 апреля 1971 г.

## ВКБ-МЕТОД ДЛЯ СИЛЬНОГО КУЛОНОВСКОГО ПОЛЯ

*В.Н.Крайнов*

Как известно, ВКБ-метод для уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом приводит к термам, которые для любых квантовых чисел совпадают с точным решением. То же справедливо и для уравнения Дирака при  $Z < 137$ . Исходя из этого, предположено (и подтвердилось расчетами), что при  $Z > 137$  электронные термы хорошо описываются ВКБ-приближением для любых квантовых чисел.

Наибольший интерес представляет поведение наименее устойчивого уровня  $1s_{1/2}$ , который с ростом  $Z$  первым достигает границы нижнего континуума. Чтобы исключить падение на центр, ядро предполагалось конечным (радиус  $R \ll 1$ ) и имеющим постоянный потенциал. ВКБ-методом находился терм  $1s_{1/2}$  в поле  $V = -\alpha/r$  при  $r > R$  и  $V = -\alpha/R$  при  $r < R$ . Здесь  $\alpha = Z/137$ . Уравнение Дирака для радиальной функции  $G(r)$  заменой  $G(r) = \sqrt{1 + \epsilon} - V(r)\phi(r)$  приводилось к самосопряженной форме:  $\phi'' + R^2\phi = 0$ , где при  $r > R$

$$k^2 = \epsilon^2 - 1 + 2\epsilon\alpha/r + \alpha^2/r^2 - \frac{3}{4}r^{-2}[1 + r(1 + \epsilon)/\alpha]^{-2} \quad (1)$$

и  $k^2 = (\epsilon + a/R)^2 - 1$  при  $r < R$ . Всюду используется система единиц  $\hbar = m = e = 1$ . Чтобы ВКБ-условие выполнялось при малых  $r$ , к величине (1) добавлялась поправка Лангера –  $1/4r^{-2}$  [1]. Сначала полагаем  $\epsilon = -1$  и находим связь  $Z_{kp}$  с  $R$ . Эффективный потенциал для этого случая показан на рис. 1. Правило квантования Бора в потенциале с одной вертикальной стенкой поворота имеет вид [2]:  $\int k dr = [n + (3/4)]\pi$ .

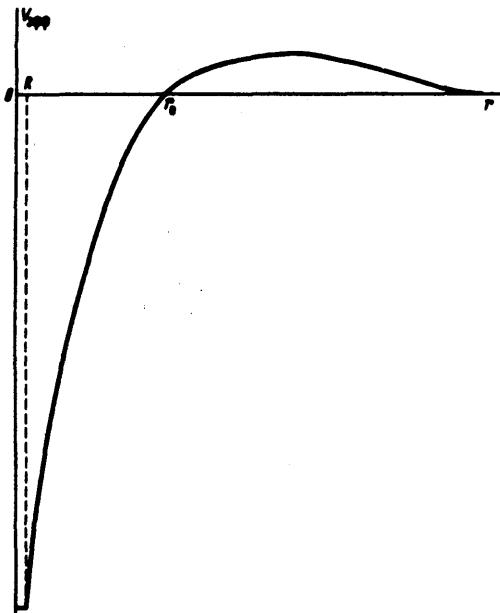


Рис. 1. Эффективный потенциал для  $a = a_{kp}$

Применяя это соотношение к терму  $1s_{1/2}$ , получаем (в предположении  $R \ll 1$ , которое реально всегда выполняется):

$$R = 2g_{kp}^2 a_{kp}^{-1} \exp[-2 - (\frac{3}{4}\pi - a_{kp})/g_{kp}], \text{ где } g_{kp} = \sqrt{a_{kp}^2 - 1}. \quad (2)$$

На рис. 2 сплошной линией показана зависимость  $a_{kp}$  от  $R$ , найденная по формуле (2). Пунктирная кривая – результат точного численного расчета [3]. Полагая  $R = 1.1A^{1/3}\phi$  и  $A = 2.5Z$ , отсюда находим  $Z_{kp} = 170$ .

Далее рассматривалось поведение  $1s_{1/2}$  уровня в окрестности точки  $a = a_{kp}$ . При  $a < a_{kp}$  из правила квантования Бора получаем:

$$\epsilon = -1 + C_1(a_{kp} - a),$$

где

$$2C_1 = \left( \frac{3}{4}\pi a_{kp}^2 - a_{kp} + g_{kp} a_{kp}^2 + g_{kp} \right) a_{kp} g_{kp}^{-3} \left( \frac{7}{8} + \frac{g_{kp}^2}{3} \right)^{-1}. \quad (3)$$

Эта же формула годится и при  $a > a_{kp}$ , с тем однако дополнением, что в этом случае уровень становится квазистационарным [3]. Вероятность прохождения барьера при  $a > a_{kp}$ , вычисленная в ВКБ-приближении, равна  $\exp[-\sqrt{a}/(a - a_{kp})]$ , где величина

$$\alpha = 2\alpha_{kp}^2 \pi^2 / C_1. \quad (4)$$

На рис. 3 сплошной линией показана зависимость  $\alpha$  от  $\alpha_{kp}$ , найденная по формулам (3), (4). Пунктирная кривая – результат точного численного расчета [3]. Вертикальная линия – реальный критический радиус

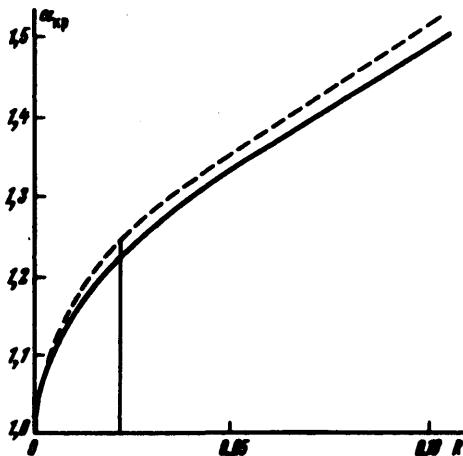


Рис. 2. Зависимость  $\alpha_{kp}$  от радиуса ядра  $R$ . Сплошная линия – ВКБ-расчет, пунктириная – точный численный расчет [3]. Вертикальная линия – реальный критический радиус

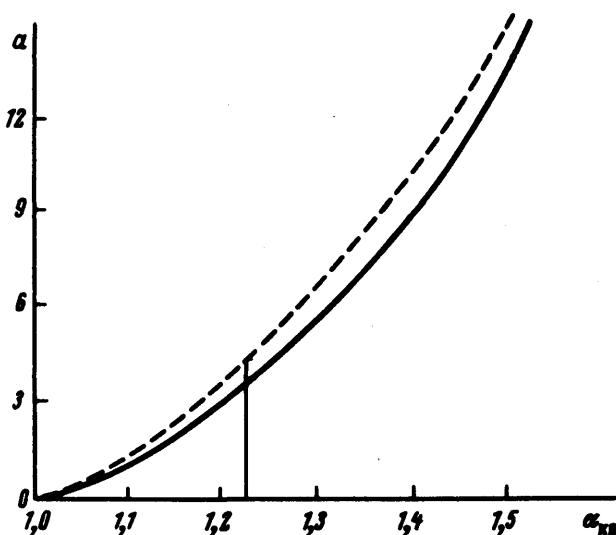


Рис. 3. Зависимость коэффициента  $\alpha$  из формулы  $W \sim \exp[-\sqrt{\alpha/(\alpha - \alpha_{kp})}]$  для вероятности прохождения через барьер при  $\alpha > \alpha_{kp}$  от величины  $\alpha_{kp}$ . Сплошная и пунктириная линии – то же, что и на рис. 2. Вертикальная линия – реальное значение  $\alpha_{kp}$

Далее в рамках ВКБ-метода вычислялось среднее расстояние электрона от центра  $\bar{r}$ . При этом оказался существенным учет не только классически доступной, но и недоступной области. Для случая  $Z = Z_{kp} = 170$  величина  $\bar{r}$  оказалась равной 0,24 (согласно точному расчету,  $\bar{r} = 0,29$  [3]), т. е., больше, чем ширина классически доступной области  $r_o$  (см. рис. 1), которая при  $Z_{kp} = 170$  равна 0,20. Это означает, что в области  $Z = Z_{kp}$  электрон в  $1s_{1/2}$  состоянии большую часть времени проводит в классически недоступной области.

Согласие ВКБ-приближения с точными расчетами для термов с большими квантовыми числами оказалось, естественно, еще лучше, чем для  $1s_{1/2}$  терма.

Благодарю А.Б.Мигдала за ценные советы .

Поступила в редакцию  
8 января 1971г.

### Литература

- [ 1] Дж.Хединг. Введение в метод фазовых интегралов. М., Изд. Мир, 1965.
  - [ 2] А.Б.Мигдал. В.П.Крайнов. Приближенные методы квантовой механики. М., Изд. Наука, 1967.
  - [ 3] В.С.Попов. ЯФ, 12, 429, 1970.
-