УДК 539.184.01

ВАРИАЦИОННЫЕ ОЦЕНКИ СВЕРХУ И СНИЗУ ДЛЯ ЭНЕРГИИ ЛЕМБОВСКОГО СДВИГА

Ю. Ю. Дмитриев и *М. С. Юрьев*

Нерелятивистская часть лембовского сдвига атомного уровня выражается через известный «логарифм Бете» [1, 2]

$$\ln K_0 = \frac{\langle \Psi_0 | \mathbf{P}(H - \varepsilon_0) \ln |H - \varepsilon_0| \mathbf{P} | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \mathbf{P}(H - \varepsilon_0) \mathbf{P} | \Psi_0 \rangle}. \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{P}$ — оператор импульса, H — гамильтониан системы, Ψ_0 и ε_0 — волновая функция и энергия состояния.

Вычисление $\ln K_0$ представляет собой основную трудность в расчете лембовского сдвига. В работе [3] был предложен вариационный принцип для вычисления $\ln K_0$. В данной работе мы используем предложенное в [3] интегральное представление для $\ln K_0$, чтобы получить двусторонние вариационные оценки для энергии лембовского сдвига. Поскольку знаменатель в (1) вычисляется точно, наша задача сводится к расчету величины

$$R \equiv \langle \Psi_0 | \mathbf{P}(H - \varepsilon_0) \ln |H - \varepsilon_0| \mathbf{P} | \Psi_0 \rangle. \tag{2}$$

Можно написать [3]

$$R = \int_0^1 \left\langle \Psi_0 \middle| \mathbf{P}(H - \varepsilon_0) \frac{H}{\lambda H - \varepsilon_0} \mathbf{P} \middle| \Psi_0 \right\rangle d\lambda + \\ + \ln(-\varepsilon_0) \langle \Psi_0 | \mathbf{P}(H - \varepsilon_0) \mathbf{P} | \Psi_0 \rangle. \tag{3}$$

Легко показать, что подынтегральное выражение в формуле (3) может быть преобразовано к следующему виду:

$$\left\langle \Psi_0 \middle| \mathbf{P}(H - \varepsilon_0) \frac{1}{\lambda H - \varepsilon_0} H \mathbf{P} \middle| \Psi_0 \right\rangle = \frac{1}{\lambda} \Big\{ \langle \Psi_0 | \mathbf{P}(H - \varepsilon_0) \mathbf{P} | \Psi_0 \rangle + \\ + \frac{\varepsilon_0}{\lambda} \langle \mathbf{P}\Psi_0 | \mathbf{P}\Psi_0 \rangle + \frac{\varepsilon_0^2 (1 - \lambda)}{\lambda} \left\langle \Psi_0 \middle| \mathbf{P} \frac{1}{\lambda H - \varepsilon_0} \mathbf{P} \middle| \Psi_0 \right\rangle \Big\}. \tag{4}$$

Все слагаемые в правой части формулы (4), кроме последнего, вычисляются точно, а для последнего слагаемого $\left\langle \Psi_0 \middle| \mathbf{P} \frac{1}{\lambda H - \varepsilon_0} \mathbf{P} \middle| \Psi_0 \right\rangle$ можно написать вариационный принцип, позволяющий оценивать этот матричный элемент как сверху, так и снизу. Этот вариационный принцип представляет собой несколько видоизмененный вариационный принцип Ребане [4].

Рассмотрим функционал

$$L(\mathbf{u}; \lambda, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \Big\{ \int \mathbf{u} (\lambda H - \varepsilon_0 - \Delta)(\lambda H - \varepsilon_0) \mathbf{u} \, d\tau + \\ + 2 \int \mathbf{u} (\lambda H - \varepsilon_0 - \Delta) \mathbf{P}\Psi_0 \, d\tau + \int (\mathbf{P}\Psi_0)^2 \, d\tau \Big\}. \tag{5}$$

Как показано в [4], стационарное значение $L(\mathbf{u}; \lambda, \Delta)$ не зависит от Δ и равно

$$\text{st. v. } L(\mathbf{u}, \lambda, \Delta) = \left\langle \Psi_0 \middle| \mathbf{P} \frac{1}{\lambda H - \varepsilon_0} \mathbf{P} \middle| \Psi_0 \right\rangle. \tag{6}$$

При этом можно, выбирая Δ, придать стационарному значению функционала (5) характер максимума или минимума, и получить таким образом двусторонние вариационные оценки искомого матричного элемента. В одном случае оптимальное значение параметра $\Delta = |\varepsilon_0 - \lambda \varepsilon_1|$ (где — ε_1) — первое возбужденное состояние гамильтониана H. В другом случае оптимальное значение $\Delta = -\infty$ и вариационный принцип (6) переходит в вариационный принцип (6) Хиллерааса.

Однако нельзя непосредственно подставить правую часть формулы (4) в интеграл (3), так как при этом подынтегральное выражение расходится в нуле. Для устранения этой расходимости выберем специальный вид пробной функции u функционала $L(\mathbf{u}; \lambda, \Delta)$. Уравнение Эйлера функционала (5) имеет вид

$$(\lambda H - \varepsilon_0)\, u = -\mathbf{P}\Psi_0. \tag{7}$$

Тогда для экстремали $\mathbf{u}_{\text{extr}}$ получим

$$\mathbf{u}_{\text{extr}}(\lambda) = -\frac{1}{\lambda H - \varepsilon_0}\,\mathbf{P}\Psi_0. \tag{8}$$

Из (8) видно, что $\mathbf{u}_{\text{extr}}(0) = \frac{1}{\varepsilon_0}\mathbf{P}\Psi_0$. Тогда для пробной функции u естественно предположить следующий вид:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\varepsilon_0}\mathbf{P}\Psi_0 + \lambda\varphi, \tag{9}$$

где φ — новая пробная функция. Тогда после несложных алгебраических выкладок получим

$$\left\langle \Psi_0 \left| \mathbf{P}(H - \varepsilon_0)\frac{1}{\lambda H - \varepsilon_0} H\mathbf{P} \right| \Psi_0 \right\rangle =$$

$$= \langle \Psi_0 | \mathbf{P}H\mathbf{P} | \Psi_0 \rangle + \varepsilon_0^2 (1 - \lambda)\,\{\text{st. v. } L_1(\varphi; \lambda, \Delta)\}, \tag{10}$$

где

$$L_1(\varphi; \lambda, \Delta) = \frac{1}{\Delta}\left\{\int \varphi\,(\lambda H - \varepsilon_0)(\lambda H - \varepsilon_0 - \Delta)\,\varphi\, d\tau - \frac{2(\varepsilon + \Delta)}{\varepsilon}\int \varphi H\mathbf{P}\Psi_0\, d\tau + \right.$$

$$\left. + \frac{2\lambda}{\varepsilon}\int H\varphi H\mathbf{P}\Psi_0\, d\tau + \frac{1}{\varepsilon_0^2}\int (H\mathbf{P}\Psi_0)^2\, dr. \right. \tag{11}$$

При $\Delta = -\infty$ вариационный функционал (11) переходит в соответствующий функционал работы [3], значение $\Delta = |\varepsilon_0 - \lambda\varepsilon_1|$ является оптимальным для получения оценки снизу.

Теперь правую часть (10) можно подставить в интеграл (3), никаких расходимостей при этом не возникает и формулы (1)—(3) (10), (11), дополненные правилом выбора Δ, решают задачу получения верхних и нижних вариационных границ для лембовского сдвига.

Нужно, однако, заметить, что в функционале (11) стоит интеграл $\int (H\mathbf{P}\Psi_0)^2\, d\tau$, который конечен лишь для состояний с угловым моментом, отличным от нуля. Поэтому весь метод применим лишь для состояний с $l \neq 0$. При этом нужно учесть, что для таких состояний

$$\langle \Psi(n, l) | \mathbf{P}(H - \varepsilon_n)\mathbf{P} | \Psi(n, l) \rangle = 0, \tag{12}$$

поэтому в знаменателе формулы (1) пишут вместо волновой функции рассматриваемого состояния волновую функцию s-состояния с тем же главным квантовым числом n [5]. Иными словами,

$$\ln K_0(n, l) = \frac{\langle \Psi(n, l) | \mathbf{P}(H - \varepsilon_n) \ln | H - \varepsilon_n | \mathbf{P} | \Psi(n, l) \rangle}{\langle \Psi(n, s) | \mathbf{P}(H - \varepsilon_n)\mathbf{P} | \Psi(n, s) \rangle}. \tag{13}$$

Кроме того, заметим, что для того чтобы функционал (11) остался дефинитен для возбужденных состояний, необходимо, чтобы его пробная функция была ортогональна ко всем нижележащим состояниям.

Подстановка (9) устранила неинтегрируемые особенности в (4), однако можно показать, что $\lambda = 0$ по-прежнему остается особой точкой. При стремлении λ к нулю в подынтегральном выражении в (3) появляются особенности, но уже интегрируемые, типа $\lambda^{-1/2}$ и $\ln \lambda$. Асимптотическое поведение пробной функции при $\lambda \to 0$ будет рассмотрено в следующей работе.

В заключение авторы благодарят Л. Н. Лабзовского за полезные обсуждения.

Литература

[1] H. A. Bethe. Phys. Rev., *72*, 339, 1947.
[2] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., 1960.
[3] Ю. Ю. Дмитриев, Л. Н. Лабзовский. Phys. Lett., *29A*, 153, 1969.
[4] Т. К. Ребане. Опт. и спектр., *21*, 118, 1966.
[5] H. A. Bethe, L. M. Brown, J. R. Stehn. Phys. Rev., *77*, 370, 1950.

Поступило в Редакцию 11 июня 1969 г.