Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. А. Сахнович, О свойствах дискретного и непрерывного спектров радиального уравнения Дирака, *ТМФ*, 1996, том 108, номер 1, 36–49

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1175>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.174.149.18

26 апреля 2023 г., 13:45:04

Л. А. Сахнович

О СВОЙСТВАХ ДИСКРЕТНОГО И НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРОВ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ДИРАКА

Для характеристики спектра радиального уравнения Дирака введено понятие квантового дефекта δ_k , обобщающего соответствующее понятие для радиального уравнения Шредингера. Для широкого класса потенциалов доказано существование δ_k и найдены явные формулы для его вычисления.

ВВЕДЕНИЕ

Уже в первых работах по квантовой механике (см. [1]) было введено понятие квантового дефекта для характеристики спектра радиального уравнения Шредингера. Строгое обоснование соответствующих полуэмпирических формул получено в статье автора [2]. В последующих работах этот результат был перенесен на более широкие классы потенциалов [3, 4], были вычислены следующие члены асимптотики. Далее мы ввели понятия квантовых дефектов дискретного и непрерывного спектров радиального уравнения Дирака [5]. Позднее эти понятия появились в целом ряде работ физиков (см. [6]). В настоящей статье дается доказательство всех результатов, анонсированных в статье [5], а также осуществлен перенос теорем о квантовых дефектах на случай нерегулярных потенциалов. Радиальное уравнение Дирака имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) \Psi_1 - [m + \lambda - V(r)] \Psi_2 &= 0, \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r} \right) \Psi_2 - [m - \lambda + V(r)] \Psi_1 &= 0, \quad 0 \leq r < \infty, \quad m > 0. \end{aligned} \quad (0.1)$$

Будем предполагать, что $V(r)$ имеет вид

$$V(r) = -A/r + q(r), \quad A > 0, \quad (0.2)$$

причем вещественный потенциал $q(r)$ удовлетворяет условию

$$\int_0^a |q(r)| dr + \int_a^\infty \sqrt{r} |q(r)| dr < \infty. \quad (0.3)$$

Дискретный спектр уравнения (0.1) – (0.3) расположен, как известно, внутри интервала $(-m, m)$. Единственной точкой сгущения дискретного спектра является точка m .

Перенумеруем точки дискретного спектра λ_n в порядке возрастания. В статье доказывается асимптотическое равенство

$$\lambda_n = m / \sqrt{1 + A^2 / [\alpha + n + \delta_k + \varkappa(n, k)]^2}, \quad (0.4)$$

где $\varkappa(n, k) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, $\alpha = \sqrt{k^2 - A^2}$, δ_k не зависит от n .

Число δ_k называется *квантовым дефектом* дискретного спектра.

Напомним, что при $q(r) = 0$ верна точная формула

$$\lambda_n = m / \sqrt{1 + A^2 / (\alpha + n)^2}. \quad (0.5)$$

В статье доказывается, что, как и в нерелятивистском случае, квантовые дефекты дискретного и непрерывного спектров совпадают. Часть результатов статьи была анонсирована в заметке [5].

1. РЕГУЛЯРНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Потенциал $q(r)$ будем называть регулярным, если выполняются следующие условия:

а) функция $q(r)$ вещественна при $r > 0$, аналитична в области $\operatorname{Re} r > 0$ и непрерывна при $\operatorname{Re} r \geq 0$, кроме, может быть, точки $r = 0$;

б) имеет место неравенство

$$\int_0^\infty \hat{q}(t) dt < \infty, \quad (1.1)$$

где

$$\hat{q}(t) = \sup |q(t \exp(i\beta))|, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \beta \leq \frac{\pi}{2}.$$

Традиционными методами доказываются следующие утверждения (см. [7, 8]).

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.1. *Если потенциал $q(r)$ регулярен, то существует решение $\Psi = [\Psi_1, \Psi_2]$ системы (0.1) аналитическое по переменным λ , r и k при любом λ , $\operatorname{Re} r > 0$, $k \in [-A, A]$ и непрерывное при любом λ , $\operatorname{Re} r \geq 0$, $k \in [-A, A]$.*

При этом верны соотношения

$$\lim_{r \rightarrow 0} \Psi(r, k, \lambda) r^{-\alpha} = [1, b_0], \quad (1.2)$$

где

$$\alpha = \sqrt{k^2 - A^2}, \quad \operatorname{Re} \alpha > 0, \quad b_0 = (\alpha + k)/A. \quad (1.3)$$

УТВЕРЖДЕНИЕ 1.2. *Пусть потенциал $q(r)$ регулярен. Тогда при некотором $r_0 > 0$ система (0.1) имеет решение вида ($r \rightarrow \infty$)*

$$\Phi^\pm(r, k, \lambda) = e^{\varepsilon r} r^{-A\lambda} [m + \lambda + o(1), \varepsilon + o(1)], \quad (1.4)$$

определенное соответственно в областях

$$\operatorname{Re} r \geq 0, \quad \operatorname{Im} r \geq 0, \quad \operatorname{Re} \varepsilon \geq 0, \quad \operatorname{Im} \varepsilon \geq 0, \quad |r| \geq r_0 \quad (1.5)$$

и

$$\operatorname{Re} r \geq 0, \quad \operatorname{Im} r \leq 0, \quad \operatorname{Re} \varepsilon \geq 0, \quad \operatorname{Im} \varepsilon \leq 0, \quad |r| \geq r_0, \quad (1.6)$$

где

$$\varepsilon = \sqrt{m^2 - \lambda^2}, \quad \operatorname{Re} \lambda > 0.$$

Как известно [9], система (0.1) имеет также решение вида

$$\Phi(r, k, \lambda) = e^{-\varepsilon r} r^{\frac{A\lambda}{\varepsilon}} [m + \lambda + o(1), -\varepsilon + o(1)], \quad r \rightarrow \infty, \quad (1.7)$$

где

$$\operatorname{Im} r = 0, \quad \operatorname{Re} \varepsilon \geq 0, \quad \operatorname{Re} \lambda > 0.$$

Из утверждений 1.1 и 1.2 вытекает представление ($r \rightarrow \infty$)

$$\Psi(r, k, \lambda) = e^{\varepsilon r} r^{-\frac{A\lambda}{\varepsilon}} C(\varepsilon, k) [m + \lambda + o(1), \varepsilon + o(1)], \quad (1.8)$$

при этом функция $C(\varepsilon, k)$ аналитична в области

$$\operatorname{Re} \varepsilon > 0, \quad \varepsilon \in [m, +\infty), \quad k \in [-A, A]. \quad (1.9)$$

Наш метод исследования спектра системы Дирака существенно использует тот факт, что для регулярных потенциалов функция $C(\varepsilon, k)$ может быть аналитически продолжена на нефизический лист, а именно выполняется

ТЕОРЕМА 1.1. *Для регулярных потенциалов функция $C(\varepsilon, k)$ может быть аналитически продолжена на область*

$$\varepsilon \in (-\infty, 0] \cup [m, +\infty), \quad k \in [-A, A]. \quad (1.10)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Решение Ψ в области (1.5) может быть записано в виде

$$\Psi = C(\varepsilon, k) \Phi^+ + b_1(\varepsilon, k) \Phi, \quad (1.11)$$

а в области (1.6) следующим образом:

$$\Psi = C(\varepsilon, k) \Phi^- + b_2(\varepsilon, k) \Phi. \quad (1.12)$$

При этом функции $b_1(\varepsilon, k)$ и $b_2(\varepsilon, k)$ аналитичны соответственно в областях

$$\operatorname{Re} \varepsilon > 0, \quad \operatorname{Im} \varepsilon > 0, \quad k \in [-A, A]$$

и

$$\operatorname{Re} \varepsilon > 0, \quad \operatorname{Im} \varepsilon < 0, \quad k \in [-A, A].$$

Положим в формулах (1.11), (1.12) $\operatorname{Im} r = 0$, $\operatorname{Re} \varepsilon = 0$, $k = \bar{k}$. Тогда Ψ будет вещественной функцией. Следовательно, выполняются соотношения

$$b_1(\varepsilon, k) = \overline{C(\varepsilon, k)} = C(-\varepsilon, k), \quad \varepsilon = i\tau \quad (\tau > 0),$$

$$b_2(\varepsilon, k) = \overline{C(\varepsilon, k)} = C(-\varepsilon, k), \quad \varepsilon = i\tau \quad (\tau < 0).$$

В силу аналитичности по k равенства

$$b_1(\varepsilon, k) = C(-\varepsilon, k), \quad \varepsilon = i\tau \quad (\tau > 0),$$

$$b_2(\varepsilon, k) = C(-\varepsilon, k), \quad \varepsilon = i\tau \quad (\tau < 0)$$

остаются верными в области $k \in [-A, A]$. Мы получаем продолжение $C(\varepsilon, k)$ на нефизический лист, полагая

$$C(-\varepsilon, k) = b_1(\varepsilon, k), \quad \operatorname{Re} \varepsilon \geq 0, \quad \operatorname{Im} \varepsilon > 0, \quad k \in [-A, A], \quad (1.13)$$

$$C(-\varepsilon, k) = b_2(\varepsilon, k), \quad \operatorname{Re} \varepsilon \geq 0, \quad \operatorname{Im} \varepsilon < 0, \quad k \in [-A, A]. \quad (1.14)$$

Теорема доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ 1.1. Аналитическое продолжение аналога функции $C(\varepsilon, k)$ в случае радиального уравнения Шредингера получено в работах [2, 10]. При этом в работе [10] рассматривались потенциалы Юкавы, а в работе [2] – потенциалы кулоновского типа.

Пусть $k = \bar{k}$ и $|k| > A$. Как мы уже отмечали, дискретный спектр уравнения (0.1) расположен внутри интервала $(-m, m)$.

Если λ_n ($0 < \lambda_n < m$) – точка дискретного спектра уравнения (0.1), то в силу (1.8) верно равенство

$$C(\varepsilon_n, k) = 0, \quad \varepsilon_n = \sqrt{m^2 - \lambda_n^2}. \quad (1.15)$$

Из соотношений (1.13), (1.14) видно, что функция $C(\varepsilon, k)$ на отрицательной полуоси ($\varepsilon < 0$) имеет скачок. Обозначим, как обычно,

$$C^\pm(\sigma, k) = \lim_{\tau \rightarrow \pm 0} C(\varepsilon, k), \quad \varepsilon = \sigma + i\tau, \quad \sigma < 0.$$

Так как $C(\varepsilon, k) = \overline{C(\bar{\varepsilon}, k)}$, то верно равенство

$$C^+(\sigma, k) = \overline{C^-(\sigma, k)}. \quad (1.16)$$

Из формул (1.11), (1.12) при $\text{Im } r = 0$, $\varepsilon = \varepsilon_n$ получаем

$$\Psi(r, k, \lambda_n) = C^\pm(-\varepsilon_n, k) \Phi(r, \varepsilon_n, k). \quad (1.17)$$

Из равенств (1.16), (1.17) вытекает справедливость следующей теоремы.

ТЕОРЕМА 1.2. Если λ_n ($0 < \lambda_n < m$) – точка дискретного спектра уравнения (0.1), а соответствующий потенциал регулярен, то

$$\text{Im } C^\pm(-\varepsilon_n, k) = 0, \quad (1.18)$$

где

$$\varepsilon_n = \sqrt{m^2 - \lambda_n^2}, \quad k = \bar{k}, \quad |k| > A.$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1.2. Как и в нерелятивистском случае [2], поведение корней ε_n иногда лучше исследовать, пользуясь равенством (1.18), чем равенством (1.15).

Обозначим через $\Psi_0 = [\Psi_{01}, \Psi_{02}]$, $\Phi_0 = [\Phi_{01}, \Phi_{02}]$ решения невозмущенного уравнения Дирака ($q(r) = 0$), удовлетворяющие соответственно условиям (1.2) и (1.7). Функции Ψ_0 при помощи равенства (1.8) ставится в соответствие функция $C_0(\varepsilon, k)$. При условии $\text{Re}(\varepsilon r) > 0$, $\text{Re } \varepsilon \geq 0$, $\text{Re } r \geq 0$ верно соотношение

$$\Psi(r, k, \lambda) = \Psi_0(r, k, \lambda) + \int_0^r \Psi(t, k, \lambda) H_1(t) U^{-1}(t) dt U(r), \quad (1.19)$$

где

$$H_1(t) = \begin{bmatrix} 0 & q(t) \\ -q(t) & 0 \end{bmatrix}, \quad U(t, k, \lambda) = \begin{bmatrix} \Psi_{01} & \Psi_{02} \\ \Phi_{01} & \Phi_{02} \end{bmatrix}. \quad (1.20)$$

Умножим обе части (1.19) на $r^{\frac{A\lambda}{\varepsilon}} e^{-\varepsilon r}$ и перейдем к пределу при $r \rightarrow \infty$. Тогда, пользуясь асимптотикой Ψ_0 и Φ_0 , выводим формулу

$$C(\varepsilon, k) = C_0(\varepsilon, k) - \frac{1}{2\varepsilon} \int_0^\infty \Psi(t, k, \lambda) H_1(t) \begin{bmatrix} \Phi_{02}(t, k, \lambda) \\ -\Phi_{01}(t, k, \lambda) \end{bmatrix} dt \frac{1}{m + \lambda}, \quad (1.21)$$

которая дает связь между $C(\varepsilon, k)$ и $C_0(\varepsilon, k)$.

2. РЕШЕНИЯ НЕВОЗМУЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ДИРАКА

Рассмотрим систему (0.1), предполагая $q(r) = 0$. Решение этой системы Ψ_0 имеет вид [9]

$$\Psi_{01} = \sqrt{m + \lambda}(\sigma_1 + \sigma_2), \quad \Psi_{02} = \sqrt{m - \lambda}(\sigma_1 - \sigma_2). \quad (2.1)$$

Функции σ_1 и σ_2 могут быть выражены через функции Уиттекера $M_{km}(x)$ следующим образом:

$$\sigma_1 = a_1 M_{s_1 \alpha}(2\varepsilon r)(2\varepsilon)^{-\alpha - \frac{1}{2}r - \frac{1}{2}}, \quad (2.2)$$

$$\sigma_2 = a_2 M_{s_2 \alpha}(2\varepsilon r)(2\varepsilon)^{-\alpha - \frac{1}{2}r - \frac{1}{2}}, \quad (2.3)$$

где

$$s_1 = \frac{A\lambda}{\varepsilon} - \frac{1}{2}, \quad s_2 = s_1 + 1, \quad \frac{a_1 + a_2}{a_1 - a_2} = \frac{A}{\alpha + k} \sqrt{\frac{m - \lambda}{m + \lambda}}. \quad (2.4)$$

Пользуясь асимптотикой для функций Уиттекера [11] и (2.4), выводим формулу

$$C_0(\varepsilon, k) = \frac{A\varepsilon + (\alpha + k)(m + \lambda)}{2A\varepsilon(m + \lambda)} (2\varepsilon)^{\frac{-A\lambda}{\varepsilon} - \alpha} \frac{\Gamma(2\alpha + 1)}{\Gamma(\alpha - \frac{A\lambda}{\varepsilon} + 1)}, \quad (2.5)$$

где

$$\lambda = \sqrt{m^2 - \varepsilon^2}.$$

Решение $\Phi_0(r, k, \lambda)$ системы (0.1) при $q(r) = 0$ также может быть выражено через функции Уиттекера $W_{km}(x)$ [9]

$$\Phi_{01}(r, k, \lambda) = r^{-\frac{1}{2}} [W_{s_2 \alpha}(2\varepsilon r) - \mu W_{s_1 \alpha}(2\varepsilon r)] (2\varepsilon)^{-s_2} (m + \lambda), \quad (2.6)$$

$$\Phi_{02}(r, k, \lambda) = -r^{-\frac{1}{2}} [W_{s_2 \alpha}(2\varepsilon r) + \mu W_{s_1 \alpha}(2\varepsilon r)] (2\varepsilon)^{-s_2} \varepsilon, \quad (2.7)$$

где

$$\mu = \frac{a_1}{a_2} \left(\frac{A\lambda}{\varepsilon} + \alpha \right).$$

Введем обозначение

$$g(r, k, \lambda) = [g_1(r, k, \lambda), g_2(r, k, \lambda)] = -\frac{\Phi_0(r, k, \lambda)}{2\varepsilon C_0(\varepsilon, k, \lambda)(m + \lambda)}. \quad (2.8)$$

Нам понадобятся в дальнейшем следующие равенства:

$$\begin{aligned} g_1(r, k, \lambda) = & \left\{ \left(\frac{A\lambda}{\varepsilon} - \alpha \right) \int_0^\infty u^{\alpha - \frac{A\lambda}{\varepsilon} - 1} (2\varepsilon r + u)^{\frac{A\lambda}{\varepsilon} + \alpha} e^{-u} du + \right. \\ & \left. + \mu \int_0^\infty u^{\alpha - \frac{A\lambda}{\varepsilon}} (2\varepsilon r + u)^{\frac{A\lambda}{\varepsilon} + \alpha - 1} e^{-u} du \right\} \times \\ & \times r^{-\alpha} e^{-\varepsilon r} \frac{A(m + \lambda)}{[A\varepsilon + (\alpha + k)(m + \lambda)]\Gamma(2\alpha + 1)}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned}
g_2(r, k, \lambda) = & \left\{ - \left(\frac{A\lambda}{\varepsilon} - \alpha \right) \int_0^\infty u^{\alpha - \frac{A\lambda}{\varepsilon} - 1} (2\varepsilon r + u)^{\frac{A\lambda}{\varepsilon} + \alpha} e^{-u} du + \right. \\
& \left. + \mu \int_0^\infty u^{\alpha - \frac{A\lambda}{\varepsilon}} (2\varepsilon r + u)^{\frac{A\lambda}{\varepsilon} + \alpha - 1} e^{-u} du \right\} \times \\
& \times r^{-\alpha} e^{-\varepsilon r} \frac{A\varepsilon}{[A\varepsilon + (\alpha + k)(m + \lambda)]\Gamma(2\alpha + 1)}, \quad (2.10)
\end{aligned}$$

которые вытекают из интегрального представления функций Уиттекера $W_{km}(x)$ и равенств (2.5) – (2.7).

Интегральные представления справедливы, если

$$\operatorname{Re}(2\varepsilon r) \geq 0, \quad 2\varepsilon r \neq 0, \quad \operatorname{Re}\left(\alpha - \frac{A\lambda}{\varepsilon}\right) > 0. \quad (2.11)$$

3. О КВАНТОВЫХ ДЕФЕКТАХ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

Амплитуда рассеяния выражается, как известно [12], через сдвиги фаз

$$\eta_k(\varepsilon) = \arg C(\varepsilon, k) + \frac{A\lambda}{|\varepsilon|} \ln 2|\varepsilon|, \quad (3.1)$$

где k – целое число ($k \neq 0$), $\varepsilon = i\nu$ ($\nu < 0$).

Квантовыми дефектами непрерывного спектра назовем следующие величины:

$$\delta(k, \pm m) = \frac{1}{\pi} \lim_{\lambda \rightarrow \pm m} \arg[C(\varepsilon, k)/C_0(\varepsilon, k)] \quad (|\lambda| > m). \quad (3.2)$$

Найдем достаточные условия существования пределов, стоящих в правой части равенства (3.2).

ТЕОРЕМА 3.1. Пусть потенциал $q(r)$ регулярен и при любом L справедливо неравенство

$$\int_0^\infty e^{L\sqrt{t}} \hat{q}(t) dt < \infty. \quad (3.3)$$

Тогда при $\alpha > \frac{1}{2}$ существуют пределы

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm m} C(\varepsilon, k)/C_0(\varepsilon, k), \quad \lambda = \bar{\lambda}, \quad |\lambda| > m,$$

и верны равенства

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm m} C(\varepsilon, k)/C_0(\varepsilon, k) = 1 + \int_0^{i\infty} \Psi(r, k, \pm m) H_1(r) \begin{bmatrix} g_{02}(r, k, \pm m) \\ -g_{01}(r, k, \pm m) \end{bmatrix} dr.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть выполняются условия

$$r = i\tau \quad (\tau > 0), \quad \varepsilon = i\nu \quad (\nu_0 < \nu < 0), \quad (3.4)$$

тогда из соотношений (2.9) и (2.10) вытекает неравенство

$$\|g(r, k, \lambda)\| \leq N|r|^{-\alpha} e^{-\varepsilon r} (1 + 2\varepsilon r)^{\alpha-1} (1 + |r|), \quad (3.5)$$

где N не зависит от ε и r . В силу (2.5) получаем также следующую оценку:

$$|C_0(\varepsilon, k)| \leq \frac{N}{\sqrt{|\varepsilon|}} e^{\frac{Am\pi}{|\varepsilon|}}. \quad (3.6)$$

Выясним теперь поведение $\Psi(r, k, \lambda)$ при малых ε и больших r .

Из формулы (1.11) следует

$$\|\Psi(r, k, \lambda)\| \leq |C(\varepsilon, k)| [\|\Phi^+(r, k, \lambda)\| + \|\Phi(r, k, \lambda)\|]. \quad (3.7)$$

Сделаем обычную в таких задачах замену [13]

$$\Phi(r, k, \lambda) = Z(r, k, \lambda)B(r, k, \lambda), \quad (3.8)$$

где

$$B(r, k, \lambda) = \begin{bmatrix} m + \lambda + \frac{A}{r} & \frac{k}{r} + W_1 \\ -\frac{k}{r} - W_1 & m - \lambda - \frac{A}{r} \end{bmatrix}, \quad (3.9)$$

$$W_1(r, k, \lambda) = \sqrt{m^2 - \lambda^2 - \frac{2A\lambda}{r} + \frac{k^2 - A^2}{r^2}}, \quad \operatorname{Re} W_1 > 0. \quad (3.10)$$

Полагая далее

$$Z(r, k, \lambda) = \eta(r, k, \lambda) \exp \left(- \int_{r_0}^r W_1(t) dt \right),$$

имеем

$$\eta = [0, 1] - \int_r^{i \operatorname{Im} r + \infty} \eta(t) R(t) \begin{bmatrix} \exp \left(-2 \int_r^t W_1(s) ds \right) & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} dt, \quad (3.11)$$

где матрица $R(t, k, \lambda)$ определена равенством

$$R(t, k, \lambda) = B(t, k, \lambda) H_1(t) B^{-1}(t, k, \lambda) - \frac{\partial B(t, k, \lambda)}{\partial t} B^{-1}(t, k, \lambda). \quad (3.12)$$

В силу (3.11) справедливо неравенство

$$\|\eta(r, k, \lambda)\| \leq \exp \left[\int_r^\infty \widehat{R}(t, k, \lambda) dt \right], \quad (3.13)$$

где

$$\widehat{R}(t, k, \lambda) = \sup \|R(te^{i\beta}, k, \lambda)\|, \quad t = \bar{t}, \quad |\beta| \leq \frac{\pi}{2}.$$

Из соотношений (3.9), (3.10), (3.12) выводится оценка

$$\widehat{R}(t, k, \lambda) \leq \frac{L}{|\varepsilon|^2} \left[q(t) + \frac{1}{|\varepsilon|t^2} \right] \quad \text{при } t \geq \frac{\delta}{|\varepsilon|^2}, \quad (3.14)$$

где L и δ не зависят от ε и t .

Из (3.3), (3.8) и (3.13), (3.14) получаем

$$\|\Phi(r, k, \lambda)\| \leq N \exp\{|\varepsilon r| + L/|\varepsilon|\} \quad (\|\Phi\| = (|\Phi_1|^2 + |\Phi_2|^2)^{1/2}). \quad (3.15)$$

Аналогичная оценка верна и для Φ^+ . Таким образом, согласно (3.7) имеем

$$\|\Psi(r, k, \lambda)\| \leq N|C(\varepsilon, k)| \exp\{|\varepsilon r| + L/|\varepsilon|\}, \quad r \geq \delta/|\varepsilon|^2. \quad (3.16)$$

Нам понадобится также оценка $\|\Psi(r, k, \lambda)\|$ при $r \leq \delta/|\varepsilon|^2$. Для этого воспользуемся равенствами

$$\begin{aligned} \Psi_{01}(r, k, m) &= -\frac{1}{A} \left(r \frac{d}{dr} - k \right) \Psi_{02}, \\ \Psi_{02} &= b_0 \Gamma(1 + 2\alpha) (2mA)^{-\alpha} J_{2\alpha}(2\sqrt{2mA}r), \end{aligned}$$

где $b_0 = (\alpha + k)/A$, $J_{2\alpha}(z)$ — функция Бесселя, $\Gamma(z)$ — гамма-функция.

Из асимптотического поведения функций Бесселя при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$ вытекает существование такого a , при котором справедливо неравенство

$$\|\Psi_0(r, k, m)\| \leq a \frac{|r|^\alpha}{(1 + |r|)^{\alpha-1/4}} e^{\gamma\sqrt{|r|}}, \quad (3.17)$$

где

$$\gamma = 2\sqrt{2mA} \sin(\beta/2), \quad 0 \leq \arg r = \beta \leq \frac{\pi}{2}.$$

Аналогично выводится оценка

$$\|\Phi_0(r, k, m)\| \leq a \frac{|r|^{-\alpha}}{(1 + |r|)^{-\alpha-1/4}} e^{-\gamma\sqrt{|r|}}. \quad (3.18)$$

Из (0.1) следует, что вектор-функция $\Psi(r, k, \lambda)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\Psi(r, k, \lambda) = \Psi_0(r, k, m) + \int_0^r \Psi(t, k, \lambda) G_1(t) U_1^{-1}(t) dt U_1(r), \quad (3.19)$$

где

$$G_1(r) = \begin{bmatrix} 0 & m - \lambda + q(r) \\ \lambda - m - q(r) & 0 \end{bmatrix}, \quad U_1 = \begin{bmatrix} \Psi_{01}(r, k, m) & \Psi_{02}(r, k, m) \\ \Phi_{01}(r, k, m) & \Phi_{02}(r, k, m) \end{bmatrix}.$$

Из формул (3.17) – (3.19) и неравенства

$$\|G_1(t)\| \leq |m - \lambda| + |q(t)|$$

получаем оценку

$$\|\Psi\| \leq \frac{a|r|^\alpha}{(1 + |r|)^{\alpha-1/4}} \exp\left\{\gamma\sqrt{|r|} + a|m - \lambda|(1 + |r|)^{3/2}\right\}. \quad (3.20)$$

При $\lambda \approx -m$ верна аналогичная оценка

$$\|\Psi\| \leq \frac{a|r|^\alpha}{(1+|r|)^{\alpha-1/4}} \exp\{\nu\sqrt{|r|} + a|m + \lambda|(1+|r|)^{3/2}\}, \quad (3.21)$$

где

$$\nu = 2\sqrt{2mA} \cos \beta/2.$$

Пользуясь соотношением (1.21) и неравенствами (3.15), (3.16), (3.20), (3.21), находим

$$|C(\varepsilon, k)| \leq N|C_0(\varepsilon, k)| \left[1 + \int_0^{\delta/|\varepsilon|^2} e^{L\sqrt{t}\hat{q}(t)} dt \right] + N|C(\varepsilon, k)| \int_{\delta/|\varepsilon|^2}^\infty e^{L\sqrt{t}\hat{q}(t)} dt.$$

Из последнего неравенства вытекает, что

$$|C(\varepsilon, k)| \leq N|C_0(\varepsilon, k)|, \quad (3.22)$$

где N не зависит от ε .

Учитывая (3.22) и снова пользуясь соотношениями (1.21), (3.15), (3.16), (3.20), (3.21), получаем утверждение теоремы.

СЛЕДСТВИЕ 3.1. Пусть выполнены условия теоремы 3.1. Тогда квантовые дефекты непрерывного спектра определяются формулами

$$\delta(k, \pm m) = \frac{1}{\pi} \arg S(k, \pm m), \quad (3.23)$$

где

$$S(k, \pm m) = 1 + \int_0^{i\infty} \Psi(r, k, \pm m) H_1(r) \begin{bmatrix} g_{02}(r, k, \pm m) \\ g_{01}(r, k, \pm m) \end{bmatrix} dr. \quad (3.24)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 3.1. Формулы (3.2) и (3.23) определяют квантовые дефекты с точностью до четного слагаемого. Для однозначной определенности рассмотрим потенциал

$$V_\rho(r) = -A/r + \rho q(r), \quad 0 \leq \rho \leq 1. \quad (3.25)$$

Под $\arg[C(\varepsilon, k)/C_0(\varepsilon, k)]$ и $\arg S(k, \pm m)$ мы будем понимать угол, на который поворачивается вокруг начала координат вектор, изображающий соответственно $C(\varepsilon, k, \rho)/C_0(\varepsilon, k)$ и $S(k, \pm m, \rho)$, когда ρ пробегает отрезок $[0, 1]$. Легко видеть, что равенство (3.23) сохраняется.

4. О КВАНТОВОМ ДЕФЕКТЕ ДИСКРЕТНОГО СПЕКТРА

Напомним, что квантовые дефекты δ_k определяются при помощи формулы (0.4), причем $n = 1, 2, 3, \dots$ при $k > 0$ и $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ при $k < 0$.

ТЕОРЕМА 4.1. Пусть потенциал $q(r)$ регулярен и при любом L справедливо неравенство

$$\int_0^\infty e^{L\sqrt{t}\hat{q}(t)} dt < \infty. \quad (4.1)$$

Тогда при $\alpha > \frac{1}{2}$ справедливо асимптотическое равенство (0.4), где

$$\delta_k = \frac{1}{\pi} \arg S(k, m). \quad (4.2)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть выполняются условия

$$r = i\tau \quad (\tau > 0), \quad -m < \sigma < 0, \quad \lambda = \sqrt{m^2 - \sigma^2}. \quad (4.3)$$

Выясним поведение $C^-(\sigma, k)$ при $k = \bar{k}$ и $\sigma \rightarrow 0$.

Из формул (2.9), (2.10) вытекает неравенство

$$\|g^-(r, k, \sigma)\| \leq N|r|^{-\alpha}(1 + |2\sigma r|)^{\alpha-1}(1 + |r|). \quad (4.4)$$

В силу (2.5) верна следующая оценка:

$$|C_0^-(\sigma, k)| \leq \frac{N}{\sqrt{|\sigma|}} e^{-\frac{Am}{\sigma}}. \quad (4.5)$$

Так как $\Psi(r, k, \lambda)$ — четная функция относительно ε ($\lambda = \sqrt{m^2 - \varepsilon^2}$), то из формулы (1.11) вытекает соотношение

$$\Psi(r, k, \lambda) = C(\varepsilon, k)\Phi^+ + C^-(\varepsilon, k)\Phi, \quad \varepsilon > 0,$$

откуда получаем неравенство

$$|C(\varepsilon, k)| \leq [\|\Psi\| + |C^-(\varepsilon, k)| \cdot \|\Phi\|] / \|\Phi^+\|. \quad (4.6)$$

Как и в случае непрерывного спектра, получаем, что при достаточно малом $\delta > 0$ выполняется

$$\|\Phi\| \leq a \exp \left\{ \frac{A\lambda}{\varepsilon} \ln t \right\}; \quad \frac{1}{a} \exp \left\{ -\frac{A\lambda}{\varepsilon} \ln t \right\} \leq \|\Phi^+\| \leq a \exp \left\{ -\frac{A\lambda}{\varepsilon} \ln t \right\}, \quad (4.7)$$

где

$$\varepsilon > 0, \quad r = it, \quad t \geq \delta/\varepsilon^2.$$

Полагая $t = \delta/\varepsilon^2$ и пользуясь неравенствами (4.5) – (4.7) и (3.20), имеем

$$|C(\varepsilon, k)| \leq \exp \{ (L + 2Am \cdot |\ln \varepsilon|) / \varepsilon \}, \quad \varepsilon > 0. \quad (4.8)$$

Таким образом, при $t \geq \delta/\varepsilon^2$ справедливо соотношение

$$\|\Psi(r, k, \lambda)\| \leq a \exp \{ (L + A\lambda \ln t) / |\varepsilon| \}, \quad r = it. \quad (4.9)$$

Учитывая оценки (3.20), (4.4) и (4.9), выводим

$$\left| \int_{iM}^{i\infty} \Psi(t) H_1(t) \begin{bmatrix} g_{02}^-(t, k, \lambda) \\ -g_{01}(t, k, \lambda) \end{bmatrix} dt \right| \leq a \int_M^\infty e^{L\sqrt{t} \ln t} \hat{q}(t) dt, \quad (4.10)$$

где a и L не зависят от δ и M , $\lambda = \sqrt{m^2 - \delta^2}$.

Из (1.21) в силу условия (4.1) следует

$$C^-(\sigma, k) = C_0^-(\sigma, k) [S(k, m) + o(1)], \quad \sigma \rightarrow 0. \quad (4.11)$$

Согласно (2.5) имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} C^-(\sigma, k) = & \frac{[A\sigma + (\alpha + k)(m + \lambda)]\Gamma(2\alpha + 1)}{2A\sigma(m + \lambda)\Gamma(-A\lambda/\sigma + \alpha + 1)} (-2\sigma)^{-A\lambda/\sigma - \alpha} \times \\ & \times \left\{ \sin \pi \left[\frac{A\lambda}{\sigma} + \alpha + \frac{1}{\pi} \arg S(k, m) \right] + o(1) \right\}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

где $\lambda = \sqrt{m^2 - \sigma^2} > 0$, $\sigma \rightarrow 0$.

В силу (1.18) справедливо равенство

$$\operatorname{Im} C^-(\sigma_n, k) = 0, \quad \sigma_n = -\sqrt{m^2 - \lambda_n^2}. \quad (4.13)$$

Рассматривая потенциалы вида (3.25) и пользуясь формулами (4.12), (4.13), выводим соотношение

$$n - \frac{A\lambda_n}{\sqrt{m^2 - \lambda_n^2}} + \alpha + \frac{1}{\pi} \arg S(k, m) + \varkappa(n, k) = 0, \quad (4.14)$$

где $\varkappa(n, k) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Из (4.14) следует доказательство формулы (4.2).

Из теорем 3.1 и 4.1 вытекает

СЛЕДСТВИЕ 4.1. Пусть выполнены условия теоремы 4.1. Тогда квантовые дефекты дискретного и непрерывного спектров связаны равенством

$$\delta_k = \delta(k, m) = \frac{1}{\pi} \arg S(k, m). \quad (4.15)$$

В нерелятивистском случае равенство типа (4.15) также верно [2].

Отметим еще, что формула для $S(k, \pm m)$ может быть записана при помощи интегрирования по вещественной полуоси

$$S(k, \pm m) = 1 + \int_0^\infty \Psi(r, k, \pm m) H_1(r) \begin{bmatrix} g_{02}(r, k, \pm m) \\ -g_{01}(r, k, \pm m) \end{bmatrix} dr. \quad (4.16)$$

5. НЕРЕГУЛЯРНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Далее будем рассматривать вещественные потенциалы, удовлетворяющие условию

$$\int_0^\infty |q(r)|(1 + \sqrt{r}) dr < \infty. \quad (5.1)$$

Тогда существует функция $S(k, \pm m)$, определенная формулой (4.16). Пользуясь теорией возмущения [3], нетрудно убедиться в справедливости теоремы сравнения.

ТЕОРЕМА 5.1. Если потенциалы $q_1(r)$ и $q_2(r)$ удовлетворяют условию (5.1) и, кроме того, $q_1(r) \leq q_2(r)$, то для соответствующих собственных чисел $\lambda_n^{(1)}$, $\lambda_n^{(2)}$ и функций $C_1(\varepsilon, k)$, $C_2(\varepsilon, k)$ выполняются неравенства

$$\lambda_n^{(1)} \leq \lambda_n^{(2)}, \quad \arg C_1(\varepsilon, k) \leq \arg C_2(\varepsilon, k), \quad \varepsilon = i\nu, \quad \nu < 0.$$

Предположим, что потенциал $q(r)$ допускает мажорацию вида

$$|q(r)| \leq Q(r), \quad (5.2)$$

где $Q(r)$ – регулярный потенциал. Тогда верна

ТЕОРЕМА 5.2. Пусть выполняется условие (5.2) и при любом L справедливо неравенство

$$\int_0^\infty \exp\{L\sqrt{t}|\ln t|\}\widehat{Q}(t) dt < \infty, \quad (5.3)$$

тогда при $\alpha > \frac{1}{2}$ существуют квантовые дефекты δ_k , $\delta(k, \pm m)$ и верны равенства

$$\delta_k = \delta(k, m), \quad \delta(k, \pm m) = \frac{1}{\pi} \arg S(k, \pm m). \quad (5.4)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Потенциалы вида

$$W(r) = \beta Q(r) + \sum_{j=1}^M C_j \exp\{-\beta_j r^{\gamma_j}\} r^{-s_j} \quad (\beta_j > 0, \quad \frac{1}{2} < \gamma_j < 1, \quad s_j < 1) \quad (5.5)$$

являются регулярными и удовлетворяют условию (5.3). Для них доказываемое утверждение верно в силу теорем 3.1 и 4.1. Выберем потенциалы $w_n(r)$ и $W_n(r)$ вида (5.5) так, что

$$w_n(r) \leq q(r) \leq W_n(r)$$

и при $a \geq 0$ выполняется

$$\int_0^a |w_n(t) - W_n(t)| dt + \int_a^\infty \sqrt{t} |w_n(t) - W_n(t)| dt \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Пусть $s_n(k, \pm m)$, $S(k, \pm m)$, $S_n(k, \pm m)$ соответствуют $w_n(r)$, $q(r)$, $W_n(r)$,

$$\lim s_n(k, \pm m) = \lim S_n(k, \pm m) = S(k, \pm m), \quad n \rightarrow \infty.$$

В силу теоремы сравнения для дискретного спектра имеем

$$\delta_k = \frac{1}{\pi} \arg S(k, \pm m).$$

Аналогичный результат для непрерывного спектра, т.е. равенство

$$\delta(k, \pm m) = \frac{1}{\pi} \arg S(k, \pm m),$$

тоже вытекает из теоремы сравнения.

Теорема доказана.

ЗАМЕЧАНИЕ 5.1. Условие (5.2) выполняется, если

$$|q(r)| \leq M \exp\{-\beta r^\gamma\} r^{-s}, \quad \beta > 0, \quad \frac{1}{2} < \gamma < 1, \quad s < 1.$$

6. КВАНТОВЫЕ ДЕФЕКТЫ $\delta(\pm\infty)$

Квантовые дефекты $\delta(k, \pm\infty)$ непрерывного спектра определим при помощи равенства

$$\delta(k, \pm\infty) = \lim \arg[C(\varepsilon, k)/C_0(\varepsilon, k)], \quad \lambda \rightarrow \pm\infty.$$

Найдем здесь вид $\delta(k, \pm\infty)$. В данном разделе все рассуждения проводятся при $r > 0$, а потенциал $q(r)$ предполагается вещественным и суммируемым, т.е.

$$\int_0^\infty |q(r)| dr < \infty. \quad (6.1)$$

Так как

$$\frac{\lambda}{\varepsilon} \rightarrow \pm i, \quad \lambda \rightarrow \pm\infty \quad \left(\varepsilon = \sqrt{m^2 - \lambda^2}, \quad \varepsilon = i\nu, \quad \nu < 0 \right), \quad (6.2)$$

то из (2.4) и (2.7) следует равенство

$$\mu = \frac{A \pm (\alpha + k)i}{A \mp (\alpha + k)i} (\alpha \pm Ai) + o(1), \quad \lambda \rightarrow \pm\infty. \quad (6.3)$$

Из формул (3.12), (3.13) и (6.2), (6.3) непосредственно выводится оценка

$$\|g(r, k, \lambda)\| \leq Nr^{-\alpha} (1 + |2\varepsilon r|)^\alpha, \quad (6.4)$$

где N не зависит от ε и r ($\varepsilon = i\nu$, $\nu < \nu_0 < 0$).

Согласно (2.5) справедливо соотношение при $\lambda \rightarrow \pm\infty$

$$C_0(\varepsilon, k) = \frac{\alpha + k \mp Ai}{2A} (2\varepsilon)^{\mp Ai - \alpha} \frac{\Gamma(2\alpha + 1)}{\Gamma(\alpha \mp Ai + 1)\varepsilon} [1 + o(1)]. \quad (6.5)$$

Традиционными методами [7, 8] доказывается следующая лемма.

ЛЕММА 6.1. Пусть выполнено неравенство (6.1). Тогда справедлива оценка

$$\|\Psi\| \leq ar^\alpha e^{(m+|\lambda|)r}, \quad (6.6)$$

где a не зависит от λ и r . Кроме того, существует решение $\Phi = [\Phi_1, \Phi_2]$ уравнения (0.1) такое, что

$$\Phi(r, k, \lambda) = e^{-\varepsilon r} r^{A\lambda/\varepsilon} [m + \lambda + o(1), -\varepsilon + o(1)], \quad r \rightarrow \infty, \quad (6.7)$$

$$\Phi(r, k, \lambda) = e^{-\varepsilon r} r^{\pm Ai} \exp \left\{ \pm i \int_r^\infty q(r) dr \right\} \varepsilon [\pm i + o(1), -1 + o(1)], \quad \lambda \rightarrow \pm\infty, \quad (6.8)$$

$$\|\Phi(r, k, \lambda)\| \leq a \left(\exp \frac{a}{|r\lambda|} \right) |\lambda|, \quad r \geq r_0, \quad |\lambda| \geq |\lambda_0| \geq 0. \quad (6.9)$$

ТЕОРЕМА 6.1. Пусть выполнены условия

$$q(r) = \overline{q(r)}, \quad \int_0^\infty |q(r)| dr \leq \infty, \quad k = \bar{k}, \quad |k| > A > 0.$$

Тогда справедлива формула

$$C(\varepsilon, k)/C_0(\varepsilon, k) \rightarrow \exp \left(\pm i \int_0^\infty q(r) dr \right), \quad \lambda \rightarrow \pm\infty. \quad (6.10)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В силу равенства (1.21) и соотношения

$$\Psi(r, k, \lambda) = \overline{C(\varepsilon, k)} \Phi(r, k, \lambda) + C(\varepsilon, k) \Phi(r, k, \lambda)$$

можно записать

$$C(\varepsilon, k) = C_0(\varepsilon, k) \left\{ 1 + \int_0^{L/|\lambda|} \Psi(t) H_1(t) \begin{bmatrix} g_{02}(t) \\ -g_{01}(t) \end{bmatrix} dt \right\} - \\ - \frac{1}{2\varepsilon(m + \lambda)} \int_{L/|\lambda|}^{\infty} [\overline{C(\varepsilon, k)} \Phi(t) + C(\varepsilon, k) \overline{\Phi(t)}] H_1(t) \begin{bmatrix} \Phi_{02}(t) \\ -\Phi_{01}(t) \end{bmatrix} dt.$$

Из последнего равенства и соотношений (6.4), (6.6)–(6.9) при $\lambda \rightarrow \pm\infty$ вытекает

$$C(\varepsilon, k) = C_0(\varepsilon, k)[1 + o(1)] \pm \\ \pm \frac{1}{2} i C(\varepsilon, k) \left\{ \int_0^{\infty} [\pm i, 1] \begin{bmatrix} 0 & q(r) \\ -q(r) & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1 \\ \mp i \end{bmatrix} \exp \left(\mp i \int_r^{\infty} q(t) dt \right) dr + o(1) \right\},$$

откуда непосредственно следует утверждение теоремы.

СЛЕДСТВИЕ 6.1. Если $\int_0^{\infty} |q(r)| dr < \infty$, то квантовые дефекты $\delta(k, \pm\infty)$ существуют, не зависят от k и имеют вид

$$\delta(k, \pm\infty) = \pm \int_0^{\infty} |q(r)| dr. \quad (6.11)$$

Напомним, что в нерелятивистском случае $\delta(k, \pm\infty) = 0$.

Список литературы

- [1] А. Зоммерфельд. Строение атома и спектры. Т. 1. М.: Гостехиздат, 1956.
- [2] Л.А. Сазонович // Изв. АН СССР, сер матем. 1966. Т. 30. №6. С. 1297–1310.
- [3] Д.Р. Яфаев // ТМФ. 1972. Т. 11. №1. С. 78–92.
- [4] В.В. Образцов // ДАН Укр. ССР (сер А). 1972. №8. С. 710–713.
- [5] Л.А. Сазонович // ДАН СССР. 1969. Т. 185. №1. С. 61–64.
- [6] Атомы в астрофизике. М.: Мир, 1986.
- [7] Р. Беллман. Теория устойчивости решений дифференциальных уравнений. М.: ИЛ, 1954.
- [8] Э.А. Коддингтон, Н. Левинсон. Теория обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: ИЛ, 1958.
- [9] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960.
- [10] В. Альфаро, Т. Редже. Потенциальное рассеяние. М.: Мир, 1966.
- [11] Э.Т. Уиттекер, Дж.Н. Ватсон. Курс современного анализа. М.: Физматгиз, 1963.
- [12] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Релятивистская квантовая теория. Ч.1. М.: Наука, 1968.
- [13] Э.Ч. Титчмарш. Разложения по собственным функциям. Т.2. М.: ИЛ, 1961.

Украинская государственная
академия связи им. А.С. Попова

Поступила в редакцию
10.V.1995 г.

L. A. Sakhnovich

ON PROPERTIES OF DISCRETE AND CONTINUOUS SPECTRA OF DIRAC RADIAL EQUATION

For characterizing the spectrum of Dirac radial equation we introduce the notion of the quantum defect δ_k , which generalizes the corresponding notion for Schrödinger radial equation. The existence of δ_k is proved and the formulas for calculating δ_k are received for a broad class of the potentials.