Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Б. Л. Воронов, Д. М. Гитман, А. Д. Левин, Р. Феррейра,
Особенности энергетического спектра электрона в кулоновском поле сверхтяжелого ядра, *ТМФ*, 2016, том 187, номер 2, 213–231

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf9074>

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: 54.147.182.235

26 апреля 2023 г., 16:48:48

© 2016 г.

Б. Л. Воронов*, Д. М. Гитман*^{†‡},
А. Д. Левин[‡], Р. Феррейра[‡]

ОСОБЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНА В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ СВЕРХТЯЖЕЛОГО ЯДРА

Рассмотрены особенности энергетического спектра электрона в кулоновском поле сверхтяжелого ядра, обсуждаются долгая история неверной трактовки этой проблемы в случае точечного ядра и ее теперешнее правильное решение. Рассмотрена спектральная задача в случае регуляризованного кулоновского поля. При некоторой специальной регуляризации выведено точное уравнение, определяющее точечный спектр в интервале энергий $(-m, m)$, и найдены численно некоторые его решения. Выведено также точное уравнение для зарядов, дающих связанные состояния с энергией $E = -m$; некоторые называют эти заряды сверхкритическими. Показано, что существует бесконечное число таких зарядов. Их существование не означает, что одночастичная релятивистская квантовая механика, основанная на гамильтониане Дирака с кулоновским полем таких зарядов, математически непоследовательна, хотя физически она неприемлема, потому что спектр гамильтониана не ограничен снизу. Вопрос о построении последовательной непертурбативной вторично квантованной теории по-прежнему остается открытым, а также остаются неясными последствия существования сверхкритических зарядов с точки зрения возможности построения этой теории.

Ключевые слова: уравнение Дирака, сверхкритическое кулоновское поле, спектральная задача, рождение электрон-позитронных пар.

DOI: 10.4213/tmf9074

Д. М. Гитман благодарит фонды FAPESP и CNPq (Бразилия) за постоянную поддержку. Его исследования частично поддерживаны Программой повышения конкурентоспособности Томского государственного университета, а также РФФИ (грант № 15-02-00293_а). Б. Л. Воронов благодарит РФФИ (грант № 14-02-01171).

*Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия. E-mail: voronov@lpi.ru

[†]Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

[‡]Institute of Physics, San Paolo University, San Paolo, Brazil.

E-mail: gitman@if.usp.br, alevin@if.usp.br, rafaelfufpi@gmail.com

*Б. Воронов и Д. Гитман посвящают эту статью
своему другу и постоянному соавтору Игорю Тютину*

1. ВВЕДЕНИЕ

Релятивистские квантовые эффекты в сверхсильном кулоновском поле, в частности рождение электрон-позитронных пар, уже давно привлекают внимание физиков. Однако их качественное и особенно количественное описание до сих пор отсутствует. Мы считаем, что такое описание возможно только в рамках непертурбативной квантовой электродинамики (КЭД), где сверхсильное кулоновское поле выступает в качестве бэкграунда. К сожалению, в настоящее время мы не имеем такого варианта КЭД. Наш опыт исследований в рамках квантовой теории поля (КТП) с различными бэкграундами (см. работы [1], [2]) говорит о том, что для построения этого варианта КЭД необходимо по крайней мере иметь полное и ясное математическое решение спектральной задачи для гамильтониана Дирака с кулоновским полем сколь угодно большого заряда Ze ядра (здесь $e > 0$ – абсолютная величина заряда электрона, в дальнейшем мы называем зарядом ядра просто Z).

Мы также понимаем, что решение вышеупомянутой проблемы является только началом построения КЭД со сверхсильным кулоновским полем. Отметим, что сразу после появления уравнения Дирака многие физики пытались обсуждать и решать эту спектральную задачу, делая иногда противоречивые выводы. По-видимому, в настоящее время нет единого мнения по данному вопросу. Это побуждает нас вновь обратиться к анализу особенностей энергетического спектра электрона в кулоновском поле сверхтяжелого ядра.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 мы напоминаем долгую историю противоречивой трактовки данной проблемы в случае точечного ядра и ее нынешнее правильное решение. Затем в разделе 3 мы обращаемся к спектральной задаче в случае кулоновского поля, регуляризованного специальным обрезанием, которое позволяет точно решить задачу. Мы анализируем задачу в той ее части, которая касается точечного (дискретного) спектра, расположенного на отрезке $[-m, m]$, и соответствующих связанных состояний. В отличие от более ранних работ мы не используем приближения малого радиуса обрезания. В разделе 4 мы выводим точное уравнение, определяющее точечный спектр в энергетическом интервале $(-m, m)$; мы называем это уравнение спектральным и представляем некоторые из его численных решений, относящихся к различным Z . В разделе 5 мы выводим точные уравнения для зарядов, дающих связанные состояния с энергией $E = -m$, и показываем, что существует бесконечное число таких зарядов, вообще говоря, не целочисленных; первые из них найдены численно. В этой связи мы обсуждаем понятие сверхкритического заряда.

2. СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА С КУЛОНОВСКИМ ПОЛЕМ ТОЧЕЧНОГО ЯДРА

Спектральная задача для гамильтониана Дирака с кулоновским полем точечного ядра имеет долгую историю. Электронная структура атома с зарядом $Z \leq Z_c = \alpha^{-1} \simeq 137.04$, где α – постоянная тонкой структуры, а Z_c – критический заряд, была

описана с помощью уравнения Дирака, которое дает энергетический спектр релятивистского электрона (спектр Зоммерфельда), согласующийся с экспериментальными данными [3]. Что касается зарядов ядра $Z > Z_c$, то принято было считать, что использование уравнения Дирака в этом случае наталкивается на непреодолимые трудности [4]–[7]. Однако не так давно было показано, что общепринятое мнение, будто гамильтониан Дирака с кулоновским полем точечного заряда является непротиворечивым только при $Z < Z_c$, ошибочно [8]–[10]. Известные трудности, связанные со спектром электрона при $Z > Z_c$, не возникают, если гамильтониан Дирака $\hat{H}(Z)$ корректно определяется как самосопряженный (с.с.) оператор (первая эвристическая попытка в этом направлении принадлежит Кейзу [11]).

Здесь уместно важное замечание, касающееся допустимых значений Z . Только целочисленные $Z \in \mathbb{N}$ имеют физический смысл, но с точки зрения спектрального анализа гамильтониана Дирака полезно, и это общепринято, рассматривать Z как параметр, принимающий произвольные неотрицательные значения: $Z \in \mathbb{R}_+$. Показано, что с математической точки зрения определение гамильтониана Дирака с произвольным Z как с.с. оператора не вызывает затруднений. Гамильтониан Дирака $\hat{H}(Z)$ с любым Z может быть корректно определен как с.с. оператор в гильбертовом пространстве биспиноров.

При $Z < Z_s = (\sqrt{3}/2)\alpha^{-1} \simeq 118.7$, где Z_s – нижний критический заряд, гамильтониан Дирака $\hat{H}(Z)$ определяется однозначно. При $Z \geq Z_s$ существует семейство $\{\hat{H}^{(\nu)}(Z)\}$ возможных с.с. гамильтонианов Дирака $\hat{H}^{(\nu)}(Z)$, задаваемых дополнительными граничными условиями в начале координат; в общем случае ν – некоторый набор параметров, зависящий от Z . Были найдены спектр и формулы обращения для любого $\hat{H}^{(\nu)}(Z)$. Собственные функции дискретного спектра и обобщенные собственные функции непрерывного спектра образуют полную ортонормированную систему в гильбертовом пространстве биспиноров. Непрерывный спектр представляет собой объединение двух полуосей $E \leq -m$ и $E \geq m$, а дискретный спектр $\{E_n^{(\nu)}(Z)\}$ располагается на отрезке $|E| \leq m$. Положение дискретных энергетических уровней $E_n^{(\nu)}(Z)$ существенно зависит от ν ; в частности, для любого $Z \geq Z_s$ существуют параметры $\nu = \nu_{-m}$, для которых низший энергетический уровень совпадает с верхней границей $-m$ отрицательной ветви $(-\infty, -m]$ непрерывного спектра, $E_0^{\nu_{-m}}(Z) = -m$. При $Z < Z_s$ гамильтониан Дирака $\hat{H}(Z)$ порождает спектр Зоммерфельда, тогда как при $Z_c > Z \geq Z_s$ этот спектр порождается гамильтонианом Дирака $\hat{H}^{(0)}(Z)$ [9].

Есть все основания полагать, что эти с.с. гамильтонианы Дирака дают нам первичный математический инструмент для построения КЭД с внешним сильным кулоновским полем точечного заряда. Вопрос в том, как использовать этот инструмент и существует ли такая КЭД в принципе. Обычно при построении КТП с внешним бэкграундом мы разлагаем гейзенберговский оператор поля Дирака по соответствующим образом выбранной полной системе решений уравнения Дирака. Наш прежний опыт говорит, что, для того чтобы иметь вторично квантованную формулировку в терминах относительно стабильных квазичастиц, должна присутствовать относительно большая щель между низшим дискретным энергетическим уровнем и верхней границей $-m$ отрицательной ветви непрерывного спектра. Другими словами, дискретный энергетический спектр должен быть достаточно изолирован от отрицательной ветви $(-\infty, -m]$ непрерывного спектра. В противном случае искомую

вторично квантованную теорию нельзя построить в полной аналогии с уже известными случаями из работ [1], [2]. Во всяком случае, весьма вероятно, что такое построение невозможно для с. с. гамильтонианов $\hat{H}^{(\nu)}(Z)$ с параметрами $\nu = \nu_{-m}$.

3. СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА С РЕГУЛЯРИЗОВАННЫМ КУЛОНОВСКИМ ПОЛЕМ

3.1. Общие положения. До работ [8]–[10] трудности исследования энергетического спектра электрона в кулоновском поле точечного ядра и спектральной задачи вообще объяснялись сильной сингулярностью кулоновского поля ядра с зарядом $Z > Z_c$ в начале координат (см. работы [4]–[7] и многие другие статьи и книги). Считалось, что эти трудности можно устранить, если рассматривать ядро конечного радиуса r_0 . В подтверждение этого предположения были проведены некоторые вычисления, которые показали, что при обрезании кулоновского потенциала на конечном малом радиусе r_0 гамильтониан Дирака имеет физически осмысленный спектр, если заряд Z не превышает так называемого сверхкритического значения Z_{scr} . Сверхкритический заряд зависит от модели обрезания и от приближений, использованных при его вычислении. Следует упомянуть следующие значения сверхкритического заряда: $Z_{scr} = 200$ [12], $Z_{scr} = 170$ [13], [14], $Z_{scr} = 172$ [7] и некоторые другие значения из интервала (170, 177).

Согласно вышеперечисленным работам при $Z \geq Z_{scr}$ низший дискретный уровень погружается в нижний континуум даже при наличии обрезания. И вновь применимость уравнения Дирака, теперь уже к неточечным ядрам с зарядами $Z \geq Z_{scr}$, поставлена под сомнение. Было высказано предположение, что новые трудности связаны с многочастичным характером рассматриваемой задачи, в частности с возможным рождением пар e^+e^- ядром с зарядом $Z \geq Z_{scr}$. С тех пор почти все исследователи в этой области придерживались такой точки зрения в своих публикациях. Однако в недавней публикации [15] данное заключение было признано ошибочным.

После восстановления в правах спектра электрона в кулоновском поле точечного ядра для нас было бы странным принять тот факт, что устранение сингулярности кулоновского потенциала в начале координат (с помощью обрезания) не только не улучшает ситуацию со спектром, но ухудшает ее. Ввиду большой важности всех деталей спектральной задачи для построения соответствующей вторично квантованной теории мы вновь обращаемся к спектральной задаче с обрезанием. Мы рассматриваем настоящую статью как естественное продолжение наших предыдущих работ [8]–[10]. Мы представляем аналитическое и численное исследование спектральной задачи со специальным обрезанием, при котором задача допускает точное аналитическое решение.

Изложение построено следующим образом. Сначала мы кратко напоминаем редукцию общей спектральной задачи к соответствующей радиальной спектральной задаче. Затем мы решаем эту последнюю задачу в той части, которая касается точечного спектра, расположенного на отрезке $[-m, m]$, и соответствующих связанных состояний, с минимумом ссылок на предыдущие работы по данной теме. Мы планируем представить в следующей публикации подробное сравнение нашего подхода и результатов с тем, что написано в многочисленных предыдущих работах.

3.2. Радиальные уравнения. Напомним, что поведением электрона в регуляризованном кулоновском поле заряда Z управляет гамильтониан Дирака $\hat{H}(Z)$, действующий в гильбертовом пространстве

$$\mathfrak{H} = \sum_{\alpha=1}^4 \oplus \mathfrak{H}_{\alpha}, \quad \mathfrak{H}_{\alpha} = L^2(\mathbb{R}^3), \quad (1)$$

квадратично-интегрируемых биспиноров $\Psi(\mathbf{r}) = \{\psi_{\alpha}(\mathbf{r}), \alpha = 1, 2, 3, 4\}$. Гамильтониан Дирака $\hat{H}(Z)$ задается дифференциальной операцией Дирака

$$\hat{H}(Z) = \gamma^0(\gamma \hat{\mathbf{p}} + m) + V(r), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\nabla, \quad r = |\mathbf{r}|, \quad (2)$$

где $V(r)$ – потенциальная энергия электрона в регуляризованном кулоновском поле (функция $V(r)$ предполагается сферически-симметричной, ограниченной и вещественной), а γ^{μ} – гамма-матрицы Дирака.

Гамильтониан $\hat{H}(Z)$ с любым зарядом Z есть однозначно определенный с.с. оператор в $\mathfrak{H}$, поскольку он представляет собой сумму однозначно определенного с.с. свободного гамильтониана Дирака и ограниченного с.с. оператора умножения на ограниченную вещественную функцию $V(r)$: прибавление ограниченного с.с. оператора к любому с.с. оператору дает новый с.с. оператор с той же областью определения. Напротив, в случае нерегуляризованного кулоновского поля точечного ядра, где потенциал – неограниченный оператор, с.с. гамильтониан Дирака определяется неоднозначно при $Z > Z_s = (\sqrt{3}/2)\alpha^{-1} \simeq 118.7$, и эта неоднозначность растет с ростом Z [8]–[10].

Стационарное уравнение Шредингера $\hat{H}(Z)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$ определяет точечный энергетический спектр электрона, исследование которого составляет главный предмет нашего интереса. Представим решения стационарного уравнения Шредингера в хорошо известном виде

$$\Psi_{j,M,\zeta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \Omega_{j,M,\zeta}(\theta, \varphi)f(r) \\ i\Omega_{j,M,-\zeta}(\theta, \varphi)g(r) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $\Omega_{j,M,\zeta}$ – нормированные сферические спиноры, так что биспиноры $\Psi_{j,M,\zeta}$ – общие собственные векторы трех коммутирующих с.с. операторов $\hat{\mathbf{J}}^2$, $\hat{J}_z$ и $\hat{K}$, где $\hat{\mathbf{J}}$ – полный угловой момент, а $\hat{K}$ – так называемый спиновый оператор,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2\Psi &= j(j+1)\Psi, & \hat{J}_z\Psi &= M\Psi, & \hat{K}\Psi &= -\varkappa\Psi, \\ \hat{\mathbf{J}} &= \hat{\mathbf{L}} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}, & \hat{\mathbf{L}} &= [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}], & \hat{K} &= \gamma^0[1 + (\boldsymbol{\Sigma}\hat{\mathbf{L}})], \end{aligned} \quad (4)$$

где $j = 1/2, 3/2, \dots$, $M = -j, -j+1, \dots, j$, $\varkappa = \zeta(j+1/2)$, $\zeta = \pm 1$. Тогда исходное уравнение сведется к радиальным уравнениям Шредингера

$$\hat{h}(Z, j, \zeta)F(r) = E(Z, j, \zeta)F(r), \quad F \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+) = L^2(\mathbb{R}_+) \oplus L^2(\mathbb{R}_+), \quad (5)$$

где $\hat{h}(Z, j, \zeta)$ – с.с. парциальные радиальные гамильтонианы, действующие в гильбертовом пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ дублетов $F(r) = \begin{pmatrix} f(r) \\ g(r) \end{pmatrix}$ как радиальные дифференциальные операции:

$$\hat{h}(Z, j, \zeta) = -i\sigma_2 \frac{d}{dr} + \varkappa r^{-1}\sigma_1 + V(r) + m\sigma_3, \quad (6)$$

Рис. 1. Регуляризованный кулоновский потенциал.

где σ_k , $k = 1, 2, 3$, – матрицы Паули (см. [5], [6] и [8], [9]). Область определения D каждого из операторов $\hat{h}$ состоит из дублетов $F(r)$, которые абсолютно непрерывны на полуоси $(0, \infty)$, обращаются в нуль в нуле, $f(0) = g(0) = 0$, и квадратично-интегрируемы вместе с $\hat{h}F(r)$ на $(0, \infty)$ (фактически на бесконечности). Это так называемая естественная область $\hat{h}$ [9].

Поскольку потенциал $V(r)$ исчезает на бесконечности, спектр каждого из операторов $\hat{h}$ состоит из непрерывной части $(-\infty, -m] \cup [m, \infty)$, представляющей собой объединение двух полуосей, отрицательной и положительной, и точечного спектра $\{E_n(Z, j, \zeta)\}_{n \in \mathbb{Z}_+}$, расположенного на отрезке $[-m, m]$. Полный точечный спектр гамильтониана Дирака $\hat{H}(Z)$ является объединением парциальных точечных спектров радиальных гамильтонианов $\hat{h}(Z, j, \zeta)$.

Радиальное уравнение Шредингера (5) с фиксированными Z, j, ζ эквивалентно системе уравнений для радиальных функций f и g

$$\begin{aligned} \frac{df(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r}f(r) - k_+(r)g(r) &= 0 \quad \Rightarrow \quad g(r) = \frac{1}{k_+(r)} \left[\frac{df(r)}{dr} + \frac{\kappa}{r}f(r) \right], \\ \frac{dg(r)}{dr} - \frac{\kappa}{r}g(r) + k_-(r)f(r) &= 0, \quad k_{\pm}(r) = E - V(r) \pm m. \end{aligned} \quad (7)$$

В дальнейшем мы рассматриваем регуляризованный кулоновский потенциал вида

$$V(r) = -q \begin{cases} r_0^{-1}, & r \leq r_0, \\ r^{-1}, & r \geq r_0, \end{cases}, \quad q = Z\alpha. \quad (8)$$

Он соответствует полю положительного заряда Ze , равномерно распределенного по сферической поверхности ядра радиуса r_0 (см. рис. 1). Радиус обрезания r_0 обычно считают универсальной, не зависящей от Z постоянной, которая определяет модель. Но согласно реальной ядерной физике естественно считать r_0 параметром, зависящим от Z , $r_0 = r_0(Z)$. В приближении равного числа протонов и нейтронов зависимость от Z дается формулой [16]

$$r_0 = r_0(Z) = R_0 \left(\frac{5}{2} Z \right)^{1/3}, \quad R_0 = 1.25 \cdot 10^{-15} \text{ м} = 0.635 \cdot 10^{-8} \text{ эВ}^{-1}. \quad (9)$$

Следует отметить, что это приближение становится все более и более грубым с ростом Z . В последующих формулах мы для краткости пишем просто r_0 , что позволяет применять наши формулы к любым r_0 , но при численных расчетах мы пользуемся формулой (9).

При нахождении точечного спектра $\{E_n(Z, j, \zeta)\}$ мы вынуждены рассматривать открытый интервал энергий $-m < E < m$ и его концевые точки $E = m$ и $E = -m$ по отдельности – по техническим причинам, которые объясняются ниже в начале раздела 5.

4. ОТКРЫТЫЙ ИНТЕРВАЛ ЭНЕРГИЙ $(-m, m)$, СПЕКТРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ

4.1. Решение радиальных уравнений в области $0 \leq r \leq r_0$. Во внутренней области $0 \leq r \leq r_0$, где мы полагаем $f(r) = f_{\text{in}}(r)$ и $g(r) = g_{\text{in}}(r)$, функции $k_{\pm}(r)$ в (7) являются константами. Подстановка представления функции $g_{\text{in}}(r)$ из первой строки системы (7) во второе уравнение системы приводит к следующему дифференциальному уравнению второго порядка для функции $f_{\text{in}}(r)$:

$$\frac{d^2 f_{\text{in}}(r)}{dr^2} + \left(\eta^2 - \frac{\nu^2 - 1/4}{r^2} \right) f_{\text{in}}(r) = 0, \quad (10)$$

$$\eta = \sqrt{k_+ k_-}, \quad k_{\pm} = E \pm m + \frac{q}{r_0}, \quad \nu = j + \frac{\zeta + 1}{2} = \begin{cases} j, & \zeta = -1, \\ j + 1, & \zeta = 1. \end{cases}$$

Это уравнение дополняется условием $E \in (-m, m)$ и граничным условием $f_{\text{in}}(0) = 0$. Заметим, что ν принимает положительные полуцелые значения, как и j . С помощью подстановки

$$f_{\text{in}}(r) = \sqrt{r} w(z), \quad z = \eta r \quad (11)$$

мы сводим уравнение (10) к хорошо известному уравнению Бесселя [17]

$$\frac{d^2 w(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dw(z)}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2} \right) w(z) = 0, \quad (12)$$

дополненному граничным условием $\sqrt{z} w(z) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow 0$.

Общим решением уравнения (12) с $\nu \geq 1/2$ при данном граничном условии является $w(z) = c J_{\nu}(z)$, где $J_{\nu}(z)$ – хорошо известная функция Бесселя [17]. Используя представление для функции $g_{\text{in}}(r)$ из первой строки системы (7) и соотношение $J'_{\nu}(z) + (\zeta \nu / z) J_{\nu}(z) = \zeta J_{\nu-\zeta}(z)$, получаем, что общее решение системы (7), (8) в области $0 \leq r \leq r_0$ при вышеуказанных условиях имеет вид

$$f_{\text{in}}(r) = c \sqrt{r} J_{\nu}(\eta r) = c \sqrt{r} \begin{cases} J_j(\eta r), & \zeta = -1, \\ J_{j+1}(\eta r), & \zeta = 1, \end{cases} \quad (13)$$

$$g_{\text{in}}(r) = c \sqrt{r} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \zeta J_{\nu-\zeta}(z) = c \sqrt{r} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \begin{cases} -J_{j+1}(\eta r), & \zeta = -1, \\ J_j(\eta r), & \zeta = 1. \end{cases}$$

Эти формулы дают две формы представления функций $f_{\text{in}}(r)$ и $g_{\text{in}}(r)$: сжатую форму в терминах ν , ζ и развернутую форму в терминах j и $\zeta = \pm 1$.

4.2. Решение радиальных уравнений в области $r_0 \leq r < \infty$. Во внешней области $r_0 \leq r < \infty$, где мы полагаем $f(r) = f_{\text{out}}(r)$, $g(r) = g_{\text{out}}(r)$, система уравнений (7), (8) при $E \in (-m, m)$ совпадает с системой уравнений в кулоновской задаче с точечным зарядом. Решение такой системы хорошо известно (см., например, книгу [9]). Общее решение этой системы, квадратично-интегрируемое на бесконечности, имеет вид

$$\begin{aligned} f_{\text{out}}(r) &= B \frac{m}{\sqrt{m-E}} (2\beta r)^\mu e^{-\beta r} [b_- \Psi(a+1, c; 2\beta r) + \Psi(a, c; 2\beta r)], \\ g_{\text{out}}(r) &= B \frac{m}{\sqrt{m+E}} (2\beta r)^\mu e^{-\beta r} [b_- \Psi(a+1, c; 2\beta r) - \Psi(a, c; 2\beta r)], \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\beta = \sqrt{m^2 - E^2}, \quad \mu = \sqrt{\kappa^2 - q^2}, \quad a = \mu - \frac{qE}{\beta}, \quad c = 1 + 2\mu, \quad b_- = \kappa + \frac{qm}{\beta} \quad (15)$$

и Ψ – символ одной из стандартных конфлюэнтных гипергеометрических функций, которая обращается в нуль на бесконечности (ее иногда называют функцией Трикоми). Напомним, что имеются две стандартные конфлюэнтные гипергеометрические функции $\Phi(a, c; x)$ и $\Psi(a, c; x)$, являющиеся линейно независимыми решениями конфлюэнтного гипергеометрического уравнения [18],

$$\begin{aligned} \Phi(a, c; x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k}{(c)_k} \frac{x^k}{k!}, \quad (a)_k = \frac{\Gamma(a+k)}{\Gamma(a)}, \quad c \notin \mathbb{Z}_-, \\ \Psi(a, c; x) &= \frac{\Gamma(1-c)}{\Gamma(a-c+1)} \Phi(a, c; x) + \frac{\Gamma(c-1)}{\Gamma(a)} x^{1-c} \Phi(a-c+1, 2-c; x). \end{aligned} \quad (16)$$

Решение (14), (15), записанное в терминах функций Уиттекера [18]

$$W_{\lambda, \mu}(x) = e^{-x/2} x^{c/2} \Psi(a, c; x), \quad \lambda = \frac{c}{2} - a, \quad \mu = \frac{c}{2} - \frac{1}{2},$$

принимает вид

$$\begin{aligned} f_{\text{out}}(r) &= \frac{Bm}{\sqrt{m-E}} (2\beta r)^{-1/2} [b_- W_{\lambda', \mu}(2\beta r) + W_{\lambda, \mu}(2\beta r)], \\ g_{\text{out}}(r) &= \frac{Bm}{\sqrt{m+E}} (2\beta r)^{-1/2} [b_- W_{\lambda', \mu}(2\beta r) - W_{\lambda, \mu}(2\beta r)], \end{aligned} \quad (17)$$

где $\lambda' = qE/\beta - 1/2$, $\lambda = \lambda' + 1$. Вводя новую энергетическую переменную ε соотношениями $E = m \cos \varepsilon$, $\varepsilon = \arccos(E/m) \in (0, \pi)$, перепишем формулы (17) в виде

$$\begin{aligned} f_{\text{out}}(r) &= B \operatorname{cosec}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) (2\beta r)^{-1/2} [(q \operatorname{cosec} \varepsilon + \kappa) W_{\lambda', \mu}(2\beta r) + W_{\lambda, \mu}(2\beta r)], \\ g_{\text{out}}(r) &= B \sec\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) (2\beta r)^{-1/2} [(q \operatorname{cosec} \varepsilon + \kappa) W_{\lambda', \mu}(2\beta r) - W_{\lambda, \mu}(2\beta r)], \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$\beta = m \sin \varepsilon, \quad \lambda = q \operatorname{ctg} \varepsilon + \frac{1}{2}, \quad \lambda' = q \operatorname{ctg} \varepsilon - \frac{1}{2}. \quad (19)$$

Эти выражения мы принимаем как окончательные для решения системы (7), (8) в области $r \geq r_0$.

4.3. Условие непрерывности и спектральное уравнение. После того как общее решение системы (7), (8) найдено в областях $0 \leq r \leq r_0$ и $r_0 \leq r < \infty$, остается удовлетворить базисному условию непрерывности решения в целом (т.е. гладко сшить парциальные решения), что сводится к требованию непрерывности решения в точке $r = r_0$:

$$f_{\text{in}}(r_0) = f_{\text{out}}(r_0), \quad g_{\text{in}}(r_0) = g_{\text{out}}(r_0). \quad (20)$$

Вместе с условиями $s \neq 0$ и $B \neq 0$ условия (20) дают трансцендентное уравнение, которое определяет дискретный энергетический спектр в интервале $-m < E < m$ в терминах переменной ε (при этом $E = m \cos \varepsilon$, $k_{\pm} = m(\cos \varepsilon \pm 1) + q/r_0$):

$$J_{\nu}(\eta r_0) \sec\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) [(\varkappa + q \operatorname{cosec} \varepsilon) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) - W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)] - \\ - \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \zeta J_{\nu-\zeta}(\eta r_0) \operatorname{cosec}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) [(q \operatorname{cosec} \varepsilon + \varkappa) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) + W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)] = 0. \quad (21)$$

Это базовое уравнение назовем спектральным уравнением для интервала $(-m, m)$. Строго говоря, мы имеем дело с серией точных спектральных уравнений для заданных значений Z , ν и ζ .

Из уравнения (21) видно, что обрезание устраняет вырождение дискретного спектра по ζ , характерное для точечного заряда. После того как спектральное уравнение решено, соответствующие связанные состояния получают подстановкой вычисленных значений энергии $E_n(Z, j, \zeta)$ связанных состояний вместо E в формулы (13)–(15) с должным учетом условия непрерывности (20), согласно которому неопределенной остается только нормировочная постоянная для волновых функций (дублетов).

В настоящее время мы не можем аналитически решить спектральное уравнения (21) при любых Z , ν , ζ и предлагаем численное решение этих уравнений. Для численных расчетов может оказаться более удобной следующая эквивалентная расширенная форма спектрального уравнения (21):

$$\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \frac{J_{j+1}(\eta r_0)}{J_j(\eta r_0)} + \operatorname{tg}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \frac{(q \operatorname{cosec} \varepsilon - j - 1/2) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) - W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)}{(q \operatorname{cosec} \varepsilon - j - 1/2) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) + W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)} = 0 \quad (22)$$

при $\zeta = -1$ и

$$\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \frac{J_j(\eta r_0)}{J_{j+1}(\eta r_0)} - \operatorname{tg}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \frac{(q \operatorname{cosec} \varepsilon + j + 1/2) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) - W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)}{(q \operatorname{cosec} \varepsilon + j + 1/2) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) + W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)} = 0 \quad (23)$$

при $\zeta = 1$.

Рис. 2. Зависимость низших уровней энергии от Z . Для сравнения кружками отмечены уровни энергии спектра Зоммерфельда.

Что касается качественного анализа спектрального уравнения, мы можем сказать только следующее. Можно показать, что левая часть уравнения (21) бесконечно осциллирует около нуля при $E \rightarrow m$, т. е. при $\beta \rightarrow 0$ (доказательство этого утверждения оказывается достаточно нетривиальным). Это означает, что при любых Z, ν, ζ существует бесконечный набор $\{E_n(Z, j, \zeta)\}$ корней спектрального уравнения (энергий связанных состояний), которые накапливаются к точке $E = m$, $E_n(Z, j, \zeta) \rightarrow m$ при $n \rightarrow \infty$. Если $qmr_0 \ll 1$ и $\mu > 0$, то асимптотическое поведение энергии связи $\varepsilon_n = m - E_n$ при $n \rightarrow \infty$ дается формулой

$$\varepsilon_n(Z, j, \zeta) = \frac{q^2}{2(n + \mu + \Delta(Z, j, \zeta))^2}, \quad \Delta(Z, j, \zeta; r_0) = (qmr_0)^{2\mu} c(Z, j, \zeta)$$

или, грубо говоря, $\varepsilon_n = (q^2 n^{-2}/2)[1 + O(n^{-1})]$ при $n \rightarrow \infty$. Это воспроизводит хорошо известный результат для нерелятивистского электрона в кулоновском поле точечного заряда. В частности, в пределе $r_0 \rightarrow 0$ восстанавливается спектр Зоммерфельда. В настоящей работе мы ограничиваемся специальным случаем $j = 1/2$ и $\zeta = -1$, который дает низшие уровни энергии. В этом случае мы имеем

$$J_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin z, \quad J_{3/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \left(-\cos z + \frac{\sin z}{z} \right), \quad \mu = \sqrt{1 - q^2}, \quad (24)$$

и спектральное уравнение в форме (22) принимает вид

$$\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \left(\operatorname{ctg} \eta r_0 - \frac{1}{\eta r_0} \right) - \operatorname{tg} \left(\frac{\varepsilon}{2} \right) \frac{(q \operatorname{cosec} \varepsilon - 1) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) - W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)}{(q \operatorname{cosec} \varepsilon - 1) W_{\lambda', \mu}(2\beta r_0) + W_{\lambda, \mu}(2\beta r_0)} = 0. \quad (25)$$

ТАБЛИЦА 1

Z	E_0/m	E_1/m	E_2/m
170	-0.80243	0.47917	0.81528
172	-0.90118	0.45281	0.80684
173	-0.95226	0.43936	0.80252
174		0.42573	0.79813
175		0.41192	0.79367
243		-0.94493	0.29796
244		-0.97215	0.28732
245			0.27657
255			0.16315

Мы решаем это спектральное уравнение численно для некоторого набора значений Z , полагая, что радиус обрезания r_0 зависит от Z в соответствии с (9).

Результаты численных расчетов представлены на рис. 2. Некоторые численные данные для рис. 2 представлены в табл. 1.

5. О СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ С ЭНЕРГИЕЙ $E = \pm m$, СВЕРХКРИТИЧЕСКИЙ ЗАРЯД

Предыдущее рассмотрение неприменимо напрямую к точкам $E = m$ и $E = -m$. Причина в том, что в этих точках нельзя использовать формулы (14), (15) из-за обращения в нуль переменной $\beta = \sqrt{m^2 - E^2}$ и, соответственно, обращения в бесконечность множителей

$$\frac{1}{\sqrt{m - E}}, \quad \frac{1}{\sqrt{m + E}}, \quad b_- = \varkappa + \frac{qm}{\beta}$$

и параметра $a = \mu - qE/\beta$. Каждая из этих точек $E = m$ и $E = -m$ требует отдельного рассмотрения.

5.1. Точка $E = m$. Хотя кажется очевидным, что связанное состояние с энергией $E = m$ отсутствует, для полноты мы покажем, что это действительно имеет место (на самом деле отсутствие связанных состояний электрона в притягивающем кулоновском поле с нулевой энергией связи вовсе не тривиально, см. обсуждение в конце этого пункта). Для этой цели достаточно рассмотреть систему радиальных уравнений (7) и (8) для связанных состояний при $E = m$ во внешней области $r \geq r_0$, где эта система принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{df(r)}{dr} + \frac{\varkappa}{r} f(r) - \left(2m + \frac{q}{r}\right) g(r) &= 0, \\ \frac{dg(r)}{dr} - \frac{\varkappa}{r} g(r) + \frac{q}{r} f(r) &= 0 \quad \implies \quad f(r) = \frac{1}{q} \left(-r \frac{dg(r)}{dr} + \varkappa g(r) \right). \end{aligned} \tag{26}$$

Она дополняется условиями, что функции $f(r)$ и $g(r)$ абсолютно непрерывны и квадратично-интегрируемы вместе со своими производными на полуоси (r_0, ∞) .

Подставляя выражение для функции $f(r)$ из второй строки системы (26) в первое уравнение системы, получаем, что функция $g(r)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению второго порядка

$$r \frac{d^2 g(r)}{dr^2} + \frac{dg(r)}{dr} + 2qmg(r) - \frac{z^2 - q^2}{r} g(r) = 0. \quad (27)$$

Подстановкой $g(r) = w(z)$, $z = 2\sqrt{2qmr}$ уравнение (27) сводится к уравнению Бесселя (12) с $\nu = \tilde{\nu} = 2\mu$, $2\sqrt{2qmr_0} \leq z < \infty$. Общее решение этого уравнения имеет вид

$$w(z) = c_1 H_{\tilde{\nu}}^{(1)}(z) + c_2 H_{\tilde{\nu}}^{(2)}(z), \quad (28)$$

где $H_{\tilde{\nu}}^{(1)}(z)$ и $H_{\tilde{\nu}}^{(2)}(z)$ – первая и вторая функции Ханкеля [18]. Его асимптотическое поведение на бесконечности дается формулой

$$w(z) = c_1 \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp \left\{ \frac{i}{4} (4z - 2\pi\tilde{\nu} - \pi) \right\} \left(1 + O\left(\frac{1}{z}\right) \right) + \\ + c_2 \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp \left\{ -\frac{i}{4} (4z - 2\pi\tilde{\nu} - \pi) \right\} \left(1 + O\left(\frac{1}{z}\right) \right), \quad z \rightarrow \infty. \quad (29)$$

Отсюда следует, что асимптотическое поведение функций $f(r)$ и $g(r)$ на бесконечности оценивается как $f(r), g(r) = O(r^{-1/4})$ при $r \rightarrow \infty$, поэтому обе функции квадратично-неинтегрируемы на бесконечности. Это означает, что система (26) не имеет квадратично-интегрируемых решений, следовательно, электрон в кулоновском поле произвольного заряда Z с обрезанием (8) не имеет связанных состояний с энергией $E = m$, т. е. с нулевой энергией связи, как и электрон в кулоновском поле точечного заряда. Природа этого явления заключается в дальнодействующем характере кулоновского потенциала, который порождает бесконечный набор связанных состояний с энергетическими уровнями, накапливающимися в точке $E = m$, но не достигающими этой точки. Такая картина устойчива при изменении заряда: все уровни энергии снижаются при возрастании Z , однако уровень с нулевой энергией связи не появляется.

Совершенно иначе обстоит дело в случае короткодействующих притягивающих потенциалов, которые могут порождать связанные состояния с нулевой энергией связи. Например, электрон в электрическом притягивающем потенциале вида прямоугольной ямы может иметь такие состояния при определенных соотношениях между радиусом r_0 ямы и ее глубиной V_0 . Для $\zeta = 1$ и любых j эти соотношения имеют достаточно простой вид: $\sqrt{V_0(2m + V_0)} r_0 = z_n(j)$, $n \in \mathbb{N}$, где $z_n(j)$ – нули функций Бесселя $J_j(z)$. Хорошо известно, что $z_n(j)$ образуют бесконечную последовательность, уходящую с увеличением n на бесконечность почти периодически, $z_n(j) \rightarrow \infty$ и $z_{n+1}(j) - z_n(j) \rightarrow \pi$ при $n \rightarrow \infty$; в частности, $z_n(1/2) = n\pi$. Соответственно при фиксированном радиусе r_0 связанные состояния с данным угловым моментом j и нулевой энергией связи появляются последовательно и почти периодически с увеличением глубины ямы V_0 .

5.2. Точка $E = -m$. Система радиальных уравнений (7), (8) для связанных состояний с энергией $E = -m$, т. е. с энергией связи $2m$, релятивистского электрона

в кулоновском поле с радиусом обрезания (9) принимает вид

$$\begin{aligned}\frac{df(r)}{dr} + \frac{\varkappa}{r}f(r) + V(r)g(r) &= 0, \\ \frac{dg(r)}{dr} - \frac{\varkappa}{r}g(r) - [2m + V(r)]f(r) &= 0;\end{aligned}\quad (30)$$

она дополняется условиями, что функции $f(r)$ и $g(r)$ абсолютно непрерывны вместе с их первыми производными, квадратично-интегрируемы на полуоси $(0, \infty)$ и обращаются в нуль в нуле, $f(0) = g(0) = 0$.

5.2.1. *Решение радиальных уравнений в области $0 \leq r \leq r_0$.* Общее решение уравнений (30) с дополнительным условием (9) в области $0 \leq r \leq r_0$, где мы полагаем $f(r) = f_{\text{in}}(r)$, $g(r) = g_{\text{in}}(r)$, при вышеупомянутых условиях дается формулой

$$\begin{aligned}f_{\text{in}}(r) &= c\sqrt{r}J_{\nu}(\eta_0 r) = c\sqrt{r} \begin{cases} J_j(\eta_0 r), & \zeta = -1, \\ J_{j+1}(\eta_0 r), & \zeta = 1, \end{cases} \\ g_{\text{in}}(r) &= c\sqrt{r}\sqrt{1 - \frac{2mr_0}{q}} \zeta J_{\nu-\zeta}(\eta_0 r) = c\sqrt{r}\sqrt{1 - \frac{2mr_0}{q}} \begin{cases} -J_{j+1}(\eta_0 r), & \zeta = -1, \\ J_j(\eta_0 r), & \zeta = 1, \end{cases}\end{aligned}\quad (31)$$

где

$$\eta_0 = \frac{q}{r_0} \sqrt{1 - \frac{2mr_0}{q}}.$$

Чтобы получить этот результат, достаточно положить $E = -m$ и $r_0 = r_0(Z)$ в (13).

5.2.2. *Решение радиальных уравнений в области $r_0 \leq r < \infty$.* Во внешней области $r_0 \leq r < \infty$, где мы полагаем $f(r) = f_{\text{out}}(r)$, $g(r) = g_{\text{out}}(r)$, система (30) принимает вид

$$\begin{aligned}\frac{df_{\text{out}}(r)}{dr} + \frac{\varkappa}{r}f_{\text{out}}(r) - \frac{q}{r}g_{\text{out}}(r) &= 0, \\ \frac{dg_{\text{out}}(r)}{dr} - \frac{\varkappa}{r}g_{\text{out}}(r) + \frac{q}{r}f_{\text{out}}(r) - 2mf_{\text{out}}(r) &= 0;\end{aligned}\quad (32)$$

она дополняется условиями, что функции $f_{\text{out}}(r)$ и $g_{\text{out}}(r)$ абсолютно непрерывны и квадратично-интегрируемы вместе с их производными на полуоси (r_0, ∞) .

Используя во втором уравнении системы представление для функции $g_{\text{out}}(r)$ из первого уравнения системы (32),

$$g_{\text{out}}(r) = \frac{1}{q} \left[r \frac{df_{\text{out}}(r)}{dr} + \varkappa f_{\text{out}}(r) \right], \quad (33)$$

получаем, что функция $f_{\text{out}}(r)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению второго порядка

$$r \frac{d^2 f_{\text{out}}(r)}{dr^2} + \frac{df_{\text{out}}(r)}{dr} - 2qm f_{\text{out}}(r) - \frac{\varkappa^2 - q^2}{r} f_{\text{out}}(r) = 0. \quad (34)$$

Подстановкой $f_{\text{out}}(r) = w(z)$, $z = 2\sqrt{2qmr}$ данное уравнение сводится к уравнению для модифицированных функций Бесселя (функций Бесселя чисто мнимого аргумента) [17]

$$\frac{d^2 w(z)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dw(z)}{dz} - \left(1 + \frac{\tilde{\nu}^2}{z^2}\right) w(z) = 0, \quad \tilde{\nu} = 2\mu, \quad 2\sqrt{2qmr_0} \leq z < \infty.$$

Требование квадратичной интегрируемости функции $f_{\text{out}}(r)$ определяет решение $f_{\text{out}}(r) = AK_{\tilde{\nu}}(z)$, где $K_{\tilde{\nu}}(z)$ – функция Макдональда,

$$K_{\tilde{\nu}}(z) = \frac{\pi}{2 \sin \pi \tilde{\nu}} [I_{-\tilde{\nu}}(z) - I_{\tilde{\nu}}(z)], \quad K_{-\tilde{\nu}}(z) = K_{\tilde{\nu}}(z), \quad \tilde{\nu} \neq n \in \mathbb{Z}_+,$$

$$I_{\tilde{\nu}}(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2m+\tilde{\nu}}}{m! \Gamma(m + \tilde{\nu} + 1)}. \quad (35)$$

При $\tilde{\nu} = n \in \mathbb{Z}_+$ функция $K_n(z)$ содержит слагаемые с логарифмическим множителем [17].

Используя тот факт, что $f_{\text{out}}(r) = AK_{\tilde{\nu}}(z)$, и представление (33) функции $g_{\text{out}}(r)$, окончательно получаем, что общее решение системы (32) при вышеупомянутых условиях имеет вид

$$f_{\text{out}}(r) = AK_{\tilde{\nu}}(z),$$

$$g_{\text{out}}(r) = \frac{A}{q} \left[\frac{z}{2} \frac{d}{dz} K_{\tilde{\nu}}(z) + \varkappa K_{\tilde{\nu}}(z) \right] = \frac{A}{q} \left\{ -\frac{z}{4} [K_{\tilde{\nu}-1}(z) + K_{\tilde{\nu}+1}(z)] + \varkappa K_{\tilde{\nu}}(z) \right\}, \quad (36)$$

где $z = 2\sqrt{2qmr}$; здесь мы использовали известную формулу [17]

$$K_{\tilde{\nu}-1}(z) + K_{\tilde{\nu}+1}(z) = -2K'_{\tilde{\nu}}(z).$$

5.2.3. Заряды, дающие связанные состояния с энергией $E = -m$, сверхкритический заряд. После того как общее решение системы (30) найдено в областях $0 \leq r \leq r_0$ и $r_0 \leq r < \infty$, остается удовлетворить базовому условию непрерывности решения в целом (т.е. гладко сшить парциальные решения), что сводится к требованию непрерывности решения в точке $r = r_0$:

$$f_{\text{in}}(r_0) = f_{\text{out}}(r_0), \quad g_{\text{in}}(r_0) = g_{\text{out}}(r_0). \quad (37)$$

Вместе с условиями $c \neq 0$, $A \neq 0$ равенства (37) приводят к уравнению

$$J_{\nu}(\eta_0 r_0) \left\{ -\frac{z_0}{4} [K_{\tilde{\nu}-1}(z_0) + K_{\tilde{\nu}+1}(z_0)] + \varkappa K_{\tilde{\nu}}(z_0) \right\} - \eta_0 r_0 \zeta J_{\nu-\zeta}(\eta_0 r_0) K_{\tilde{\nu}}(z_0) = 0, \quad (38)$$

где

$$\eta_0 r_0 = q \sqrt{1 - \frac{2mr_0}{q}}, \quad z_0 = 2\sqrt{2qmr_0},$$

$$\nu = j + \frac{\zeta + 1}{2}, \quad \tilde{\nu} = 2\sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - q^2}, \quad \varkappa = \zeta \left(j + \frac{1}{2}\right),$$

которое можно рассматривать как трансцендентное уравнение для зарядов Z , определяющих связанные состояния с энергией $E = -m$ для электрона с полным угловым моментом j и спиновым числом ζ . Мы обозначаем такие заряды как $Z^{(-m)}(j, \zeta)$.

Аналитическое решение уравнения (38) для $Z^{(-m)}(j, \zeta)$ при произвольных j и ζ вряд ли возможно в настоящее время. Мы можем только пытаться анализировать его качественно и решать численно.

Эквивалентной формой уравнения (38), которая представляется более удобной для его качественного анализа и численного решения, является уравнение

$$\eta_0 r_0 \zeta \frac{J_{\nu-\zeta}(\eta_0 r_0)}{J_{\nu}(\eta_0 r_0)} + \left[\frac{z_0}{4} \frac{K_{\bar{\nu}-1}(z_0) + K_{\bar{\nu}+1}(z_0)}{K_{\bar{\nu}}(z_0)} - \varkappa \right] = 0. \quad (39)$$

Что касается качественного анализа уравнения (39), то можно сказать следующее. Как вытекает из хорошо известного асимптотического поведения функций Бесселя $J_{\nu}(z)$ при $z \rightarrow \infty$, выражение $\zeta J_{\nu-\zeta}(\eta_0 r_0)/J_{\nu}(\eta_0 r_0)$ в левой части уравнения (39) осциллирует с увеличением Z около нуля почти периодически с периодом $\pi\alpha^{-1}$ и изменяется от ∞ до $-\infty$ (конкретнее, ведет себя, как $\text{ctg}[q + \pi/4(1 - 2j)]$ при $\zeta = -1$ и как $-\text{tg}[q + \pi/4(1 - 2j)]$ при $\zeta = 1$). Подходящая оценка функции Макдональда $K_{i\sigma}(a\sqrt{\sigma})$ для $a, \sigma \in \mathbb{R}$ при $\sigma \rightarrow \infty$ позволяет заключить, что отношение функций Макдональда в левой части уравнения (39) ведет себя с увеличением Z аналогично рассмотренному выше отношению функций Бесселя; разница состоит в том, что частота осцилляций растет с Z логарифмически. Отсюда следует, что каждое уравнение (39) при любых фиксированных j, ζ имеет бесконечную последовательность $\{Z_n^{(-m)}(j, \zeta)\}_{n \in \mathbb{N}}$ решений, причем $Z_n^{(-m)}(j, \zeta) \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$ и разность между соседними членами этой последовательности уменьшается с увеличением n .

Теперь обсудим так называемый сверхкритический заряд. В настоящее время среди физиков, по-видимому, нет общепринятого понимания этого понятия. В частности, каждый заряд $Z_n^{(-m)}(j, \zeta)$ из множества $\cup_{j, \zeta} \{Z_n^{(-m)}(j, \zeta), n \in \mathbb{N}\}$ иногда называют сверхкритическим зарядом (а иногда критическим зарядом, как в работах [13], [15]), так что существует бесконечное множество сверхкритических зарядов с не совсем ясным физическим смыслом.

Мы не можем согласиться с такой точкой зрения по двум причинам. Во-первых, почти все заряды $Z_n^{(-m)}(j, \zeta)$ нецелочисленные и потому не имеют прямого физического смысла. Во-вторых, наша точка зрения состоит в том, что сверхкритический заряд должен быть не только целочисленным, но и единственным. Остается конкретизировать значение сверхкритического заряда. Мы считаем, что сверхкритический заряд определяется как минимум среди всех зарядов $Z_n^{(-m)}(j, \zeta)$, который достигается в секторе $j = 1/2, \zeta = -1$ и равен $Z_1(1/2, -1)$ (насколько нам известно, многие физики придерживаются этой точки зрения). А именно, мы определяем сверхкритический заряд Z_{scr} как целое число, ближайшее к $Z_1(1/2, -1)$ сверху:

$$Z_{\text{scr}} = \begin{cases} [Z_1(1/2, -1)] + 1, & \text{если } Z_1(1/2, -1) - \text{нецелое число,} \\ Z_1(1/2, -1), & \text{если } Z_1(1/2, -1) - \text{целое число;} \end{cases} \quad (40)$$

здесь символ $[\cdot]$ обозначает целую часть вещественного числа. Следует подчеркнуть, что, как и множество $\cup_{j, \zeta} \{Z_n^{(-m)}(j, \zeta), n \in \mathbb{N}\}$, сверхкритический заряд Z_{scr} зависит от типа регуляризации кулоновского поля, т.е. от распределения заряда

в ядре конечного радиуса. Он различен для однородно заряженной сферы и для однородно заряженного шара. Коротко говоря, сверхкритический заряд модельно зависим.

Возвращаясь к уравнению (39) для заряда $Z_n^{(-m)}(j, \zeta)$, мы ограничиваемся случаем $j = 1/2$, $\zeta = -1$ и, в частности, находим сверхкритический заряд. В этом случае уравнение (39) принимает вид (см. соотношения (24))

$$\varphi(Z) = 0, \quad \varphi(Z) = \eta_0 r_0 \operatorname{ctg}(\eta_0 r_0) + \frac{z_0}{4} \frac{K_{\tilde{\nu}-1}(z_0) + K_{\tilde{\nu}+1}(z_0)}{K_{\tilde{\nu}}(z_0)}, \quad (41)$$

где, напомним,

$$\eta_0 r_0 = q \sqrt{1 - \frac{2mr_0}{q}}, \quad z_0 = 2\sqrt{2qmr_0}, \quad \tilde{\nu} = 2\sqrt{1 - q^2}. \quad (42)$$

При исследовании уравнения (41) мы должны различать две области значений Z , а именно область $0 < Z \leq Z_c$ ($0 < q \leq 1$) и область $Z > Z_c$ ($q > 1$). В первой области параметр $\tilde{\nu}$ вещественный, тогда как во второй области $\tilde{\nu}$ становится чисто мнимым, $\tilde{\nu} = i\sigma$, $\sigma > 0$. Переменная z_0 вещественная и положительная в обеих областях. Известно, что функция Макдональда положительного аргумента и вещественного индекса строго положительна [19], тогда как функция Макдональда положительного аргумента и чисто мнимого индекса знакопеременна. Отсюда следует, что в первой области значений Z второе слагаемое в уравнении (41) строго положительно при любом r_0 ,

$$\frac{z_0}{4} \frac{K_{\tilde{\nu}-1}(z_0) + K_{\tilde{\nu}+1}(z_0)}{K_{\tilde{\nu}}(z_0)} > 0 \quad \text{при} \quad 0 < Z \leq Z_c \quad \text{для всех} \quad r_0, \quad (43)$$

тогда как во второй области это слагаемое знакопеременно. С другой стороны, легко проверить, что в первой области значений Z первое слагаемое в уравнении (41) строго положительно при любом r_0 ,

$$\eta_0 r_0 \operatorname{ctg}(\eta_0 r_0) > 0 \quad \text{при} \quad 0 < Z \leq Z_c \quad \text{для всех} \quad r_0. \quad (44)$$

В самом деле, если $q < 2mr_0$, мы имеем

$$\eta_0 r_0 = i\tau, \quad \tau > 0, \quad \eta_0 r_0 \operatorname{ctg}(\eta_0 r_0) = \tau \operatorname{cth} \tau > 0,$$

а если $q > 2mr_0$, то

$$0 < \eta_0 r_0 < 1, \quad \operatorname{ctg}(\eta_0 r_0) > \operatorname{ctg} 1 > 0.$$

Во второй области слагаемое $\eta_0 r_0 \operatorname{ctg}(\eta_0 r_0)$ есть, очевидно, осциллирующая функция, изменяющаяся от ∞ до $-\infty$ с увеличением Z ,

$$\eta_0 r_0 \operatorname{ctg}(\eta_0 r_0) \in (-\infty, \infty), \quad Z \in (Z_c, \infty). \quad (45)$$

Из соотношений (43) и (44) следует, что в первой области $0 < Z \leq Z_c$ уравнение (41) для $Z^{(-m)}(1/2, -1)$ не имеет решений. Другими словами, при любых r_0 в области $0 < Z \leq Z_c$ нет зарядов, дающих связанное состояние с энергией $E = -m$.

Рис. 3. Графическое решение уравнения (41).

Напротив, во второй области $Z > Z_c$ уравнение (41) имеет бесконечно возрастающую последовательность решений, как уже отмечалось выше. Всё это позволяет нам утверждать, что имеется бесконечно возрастающая последовательность $\{Z_n^{(-m)}(1/2, -1)\}_{n \in \mathbb{N}}$, $Z_1^{(-m)}(1/2, -1) > Z_c$, зарядов, дающих связанные состояния с энергией $E = -m$.

Интересно сравнить эту ситуацию с аналогичной ситуацией для чисто кулоновского поля точечного заряда (без обрезания). Как известно [9], для чисто кулоновского поля с $Z < Z_s = (\sqrt{3}/2)Z_c$ (в этом случае гамильтониан Дирака определяется однозначно) не существует связанных состояний с $E = -m$, тогда как для каждого $Z \geq Z_s$ такое состояние существует. Точнее, для каждого $Z \geq Z_s$ с.с. радиальный гамильтониан $\hat{h}(Z, 1/2, -1)$ определяется неоднозначно, вместо этого существует однопараметрическое семейство с.с. гамильтонианов, задаваемых некоторыми граничными условиями в нуле, и среди них имеется гамильтониан, задаваемый специальными с.с. граничными условиями в нуле, который имеет связанное состояние с энергией $E = -m$.

Мы решили уравнение (41) численно и нашли несколько первых членов бесконечной последовательности $\{Z_n^{(-m)}(1/2, -1)\}$. Результаты численных расчетов представлены на рис. 3. Приведем также их в явном виде:

$$\begin{aligned} \{Z_n^{(-m)}(1/2, -1)\} = \\ = \{173.92, 245.01, 327.39, 412.15, 496.11, 578.55, 659.82, 740.44, 820.53, 899.93, \\ 978.50, 1056.28, 1133.46, 1210.16, 1286.43, 1362.21, 1437.48, \dots\}. \end{aligned} \quad (46)$$

Заметим, что, как уже утверждалось выше, все представленные члены нецелочисленны и не имеют прямого физического смысла. Следует также отметить, что разность между последовательными членами последовательности уменьшается с увеличением n , как и ожидалось. Для нас важен только первый член этой последовательности. Согласно нашему определению сверхкритический заряд в нашей модели есть $Z_{\text{scr}} = 174$, при этом $r_0 = 9.47 \cdot 10^{-15} \text{ м} \approx 10 \text{ Ф}$, что почти совпадает с результатом Попова [20].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы разделяем широко распространенное среди физиков мнение, что сверхкритический заряд обозначает границу, за которой (т. е. при $Z \geq Z_{\text{scr}}$) описание поведения электрона в сильном кулоновском поле, даже регуляризованном в начале координат, в рамках одночастичной нерелятивистской квантовой механики, основанной на гамильтониане Дирака, определенно не годится. Считается, что если $Z \geq Z_{\text{scr}}$, то процессов с фиксированным числом частиц не существует; в частности, не существует чисто одночастичных процессов – любой процесс сопровождается множественным рождением пар e^+e^- . В такой ситуации только последовательная КЭД с сильным кулоновским полем может дать правила для расчета всех квантовых процессов. Это же относится к критическому заряду $Z_c = \alpha^{-1}$ и, возможно, даже к нижнему критическому заряду $Z_s = (\sqrt{3}/2)\alpha^{-1}$ для кулоновского поля точечного ядра.

Следует также помнить, что, хотя одночастичная релятивистская квантовая механика с гамильтонианом Дирака с любым потенциалом включая кулоновское поле любого заряда Z , точечного или неточечного, математически последовательна и, в частности, описывает унитарную эволюцию, она неудовлетворительна с физической точки зрения ввиду неограниченности энергетического спектра электрона снизу. Как хорошо известно, этот недостаток преодолевается вторичным квантованием по Ферми–Дираку и переходом к многочастичной КТП.

В любом случае только будущая КЭД может дать правильное описание поведения электрона в сколь угодно сильном кулоновском поле. Следует отметить, что существующие тяжелые ядра могут имитировать зависящее от времени сверхкритическое кулоновское поле при столкновениях. При этом можно надеяться, что удастся рассчитать эффект рождения пар, используя элементы хорошо разработанной КТП с зависящим от времени внешним электрическим полем, которое включается и выключается в начальный и конечный момент времени соответственно (см. работы [7], [21] и содержащиеся в них ссылки).

Список литературы

- [1] D. M. Gitman, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **10**:11 (1977), 2007–2020; E. S. Fradkin, D. M. Gitman, *Fortschr. Phys.*, **29**:9 (1981), 381–411; Д. М. Гитман, Е. С. Фрадкин, Ш. М. Шварцман, *Квантовая электродинамика с нестабильным вакуумом*, Наука, М., 1991.
- [2] S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, *Quantization of charged fields in the presence of critical potential steps*, [arXiv:1506.01156](https://arxiv.org/abs/1506.01156).
- [3] H. A. Bethe, E. E. Salpeter, “Quantum mechanics of one- and two-electron systems”, *Atoms I*, Handbuch der Physik/Encyclopedia of Physics, **7/35**, Springer, Berlin, 1957, 88–436.
- [4] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, **117**:778 (1928), 610–624; **118**:779 (1928), 351–361; C. G. Darwin, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, **118**:780 (1928), 654–680; W. Gordon, *Z. Phys.*, **48**:1–2 (1928), 11–14.
- [5] M. E. Rose, *Relativistic Electron Theory*, Wiley, New York, 1961.
- [6] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, М., 1969.
- [7] W. Greiner, B. Müller, J. Rafelski, *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*, Springer, Berlin, 1985.
- [8] Б. Л. Воронов, Д. М. Гитман, И. В. Тютин, *ТМФ*, **150**:1 (2007), 41–84.
- [9] D. M. Gitman, I. V. Tyutin, B. L. Voronov, *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics. General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials*, Progress in Mathematical Physics, **62**, Birkhäuser, Boston, MA, 2012.

- [10] D. M. Gitman, A. D. Levin, I. V. Tyutin, B. L. Voronov, *Phys. Scr.*, **87**:3 (2013), 038104, 7 pp.
- [11] K. M. Case, *Phys. Rev.* (2), **80**:5 (1950), 797–806.
- [12] I. Pomeranchuk, Ya. Smorodinsky, *J. Phys. (USSR)*, **IX**:2 (1945), 97–100.
- [13] Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, *УФН*, **105**:3 (1971), 403–440.
- [14] В. С. Попов, *ЯФ*, **12**:2 (1970), 429; **14**:2 (1971), 458; *ЖЭТФ*, **60**:4 (1971), 1228–1244.
- [15] В. М. Кулешов, В. Д. Мур, Н. Б. Нарожный, А. М. Федотов, Ю. Е. Лозовик, В. С. Попов, *УФН*, **185**:8, 845–852.
- [16] K. S. Krane, *Introductory Nuclear Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1988.
- [17] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2: *Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены*, Наука, М., 1974.
- [18] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1: *Гипергеометрическая функция, функции Лежандра*, Наука, М., 1973.
- [19] И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, М., 1963.
- [20] В. С. Попов, *Письма в ЖЭТФ*, **11**:5 (1970), 254–256.
- [21] I. A. Maltsev, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, A. I. Bondarev, Y. S. Kozhedub, G. Plunien, Th. Stöhlker, *Phys. Rev. A*, **91**:3 (2015), 032708, 7 pp., arXiv:1412.5337.

Поступила в редакцию 21.10.2015