

НОВОЕ О РАДИАЛЬНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЯХ ФЕРМИОНОВ В ОТТАЛКИВАЮЩЕМ КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ

В. П. Незнамов *, *И. И. Сафронов* **, *В. Е. Шемарулин* ***

Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
Саров, Россия

Наличие непроницаемого барьера при $r = r_{cl}$ в эффективном потенциале релятивистского уравнения типа Шредингера приводит к исключению диапазона $0 \leq r < r_{cl}$ из области определения волновой функции. Исходя из дуальности уравнения типа Шредингера и уравнения Дирака такое же исключение необходимо было провести и для области определения волновых функций уравнения Дирака. В результате получены новые решения уравнения Дирака в кулоновском поле отталкивания. Благодаря расчетам установлено, что в зависимости от рабочих параметров на расстояниях долей или нескольких единиц комптоновской длины волны фермиона от $r = r_{cl}$ новые решения начинают практически совпадать со стандартными кулоновскими функциями непрерывного спектра. С практической точки зрения матричные элементы с новыми решениями с хорошей точностью совпадают с матричными элементами с кулоновскими функциями непрерывного спектра. Наше рассмотрение носит методологический характер, а также полезно для дискуссий о дальнейшем развитии квантовой теории.

The availability of an impermeable barrier at $r = r_{cl}$ in the effective potential of the Schrödinger-type relativistic equation leads to exclusion of the $0 \leq r < r_{cl}$ range from the wave function domain. On the basis of the duality of the Schrödinger-type equation and Dirac equation the same exclusion is also to be made for wave functions domain of the Dirac equation. As a result, we have derived new solutions of the Dirac equation in the Coulomb repulsive field. Due to the calculations, we found out that depending on working parameters at the distances of several fractions or units of the Compton wave length of a fermion from $r = r_{cl}$, the new solutions practically coincide with standard Coulomb functions of the continuous spectrum. The matrix elements with new solutions will coincide, with good accuracy, with standard matrix elements with the use of Coulomb functions of the continuous spectrum. Our consideration is methodological and useful for discussions on the future development of quantum theory.

PACS: 03.70.+k; 11.10.-z

* E-mail: vpneznamov@vniief.ru, vpneznamov@mail.ru

** E-mail: IISafronov@vniief.ru

*** E-mail: VEShemarulin@vniief.ru

ВВЕДЕНИЕ

Для исследования квантово-механического движения частиц со спином $1/2$ во внешних электромагнитных и гравитационных полях имеются две возможности — использование уравнения Дирака с биспинорной волновой функцией (см., например, [1]) или самосопряженного релятивистского уравнения типа Шредингера со спинорной волновой функцией [2, 3]. Радиальные волновые функции обоих уравнений связаны друг с другом определенными соотношениями.

Необходимость использования релятивистского уравнения типа Шредингера возникла при рассмотрении нами квантовой механики стационарных состояний частиц в пространстве-времени классических черных дыр.

В работе [4] исследовано взаимодействие скалярных частиц, фотонов и фермионов с гравитационными и электромагнитными полями Шварцшильда, Райсснера–Нордстрёма, Керра и Керра–Ньюмена с нулевой и ненулевой космологической постоянной. Также изучено взаимодействие скалярных частиц, фотонов и фермионов с неэкстремальными вращающимися заряженными черными дырами в минимальной пятимерной калибровочной супергравитации.

Практически во всех случаях установлено существование квантово-механического режима «падения» частиц на горизонты событий [5–7]. Состояния систем «частица в полях классических черных дыр с горизонтами событий нулевой толщины» являются сингулярными. Обнаруженные сингулярности не позволяют применять квантовую теорию в полном объеме, что приводит к необходимости изменения начальной постановки физической задачи.

Исключением из вышеизложенного для всех рассмотренных черных дыр является существование вырожденных стационарных состояний частиц с энергиями $E = E^{\text{st}}$ [8–10].

При использовании уравнения Дирака формально решения с $E = E^{\text{st}}$ являются единственными регулярными решениями, однако они не соответствуют реальной физической ситуации из-за логарифмической расходимости дираковских нормировочных интегралов в окрестностях горизонтов событий.

Ситуация меняется, если использовать самосопряженные релятивистские уравнения типа Шредингера. При переходе от уравнений Дирака к уравнениями типа Шредингера волновые функции подвергаются неунитарным преобразованиям подобия. В результате волновые функции становятся квадратично интегрируемыми [8–10]. Частицы в состояниях с $E = E^{\text{st}}$ локализованы вблизи горизонтов событий.

Волновые функции обращаются в нуль на горизонтах событий. Максимумы плотностей вероятности отстоят от горизонтов событий на доли комптоновской длины волны частиц в зависимости от рабочих параметров исследуемых систем.

В работе [11] мы рассмотрели результаты применения уравнения Дирака и уравнения типа Шредингера в плоском пространстве-времени Минковского. В качестве внешнего поля использовалось статическое поле Кулона.

Для притягивающего кулоновского поля обе возможности приводят к совпадающим энергетическим спектрам частиц со спином $1/2$ и к близким друг к другу плотностям вероятности [11].

Однако для отталкивающего кулоновского поля у эффективного потенциала уравнения типа Шредингера при $r = r_{cl}$ существует квантотомеханический непроницаемый барьер [11]. В области $r \geq r_{cl}$ решениями уравнения типа Шредингера являются кулоновские волновые функции непрерывного спектра [1], умноженные на множитель, обеспечивающий самосопряженность уравнения. Область $0 \leq r < r_{cl}$ является недостижимой для частиц, движение которых определяется уравнением типа Шредингера. Волновые функции равны нулю при $r = r_{cl}$.

Несмотря на отсутствие непроницаемого барьера, аналогичные выводы следуют также для волновых функций уравнения Дирака в отталкивающем кулоновском поле, поскольку они связаны с волновыми функциями уравнения типа Шредингера. В данной работе мы подробно исследуем этот кажущийся парадокс.

Для анализа особых точек и решений радиальных уравнений Дирака мы применили преобразование Прюфера и получили уравнения для фазовых функций [12–15]. В результате были найдены новые решения уравнения Дирака с нулевыми или конечными значениями при $r = r_{cl}$. Эти решения связаны с решениями уравнения типа Шредингера. Примечательно, что новые решения начинают практически совпадать с аналитическими кулоновскими функциями непрерывного спектра (29) на расстояниях долей или нескольких единиц комптоновской длины волны фермиона от $r = r_{cl}$.

Из необходимости соответствия решений уравнения Дирака и уравнения типа Шредингера мы исключаем из физического рассмотрения область $0 \leq r < r_{cl}$. При $r \rightarrow 0$ новые решения уравнения Дирака являются расходящимися. Решения такого типа считаются физически неприемлемыми и не учитываются при определении кулоновских функций дискретного и непрерывного спектров. В нашем случае при исключении из физического рассмотрения области $0 \leq r < r_{cl}$ проблема расходящихся решений не возникает.

Ниже целесообразно упомянуть о замечательном представлении Фолди–Ваутхайзена [16]. Это представление следует из представления Дирака в результате серии унитарных преобразований дираковского гамильтониана и дираковской волновой функции. В итоге мы получаем два независимых уравнения. Одно уравнение описывает состояния фермионов с положительными энергиями, другое — состояния с отрицательными энергиями. Достоинством представления Фолди–Ваутхайзена

является прозрачный и однозначный переход от операторов квантовой механики к их классическим эквивалентам [16–18].

Переход к представлению Фолди–Ваутхайзена не может быть проведен аналитически. Однако с помощью численных вычислений этот переход может быть осуществлен с любой требуемой точностью [19].

В представлении Фолди–Ваутхайзена рассмотрена квантовая электродинамика с расчетами ряда физических процессов [20, 21]. Формализм теории развит как для дираковских матриц в представлении Дирака–Паули, так и для матриц в спинорном представлении. Эффекты квантовой электродинамики рассмотрены также с использованием самосопряженных уравнений типа Шредингера со спинорными волновыми функциями [22, 23].

В вариантах квантовой электродинамики со спинорами в фермионных уравнениях отсутствует необходимость в концепции поляризации вакуума и, как следствие, процессы вакуумного рождения и аннигиляции пар частица–античастица [24].

В данной работе мы сосредоточимся на анализе решений уравнений Дирака с биспинорной волновой функцией и самосопряженного релятивистского уравнения типа Шредингера со спинорной волновой функцией во внешнем отталкивающем кулоновском поле.

В данной работе в качестве фермиона рассматривается электрон с зарядом $e < 0$. В разд. 1 приводятся уравнения для описания квантово-механического движения электронов во внешнем отталкивающем поле Кулона. Для уравнения типа Шредингера обсуждаются возникновение и свойства непроницаемого барьера при $r = r_{cl}$. В разд. 2 рассматривается асимптотика радиальных функций уравнения Дирака и уравнения типа Шредингера в окрестности непроницаемого барьера. Разд. 3 посвящен анализу особых точек и численным решениям уравнения Дирака. В заключении приведены основные результаты работы.

1. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА ВО ВНЕШНЕМ ОТТАЛКИВАЮЩЕМ ПОЛЕ КУЛОНА

1.1. Уравнение Дирака. Ниже, как правило, используется система единиц $\hbar = c = 1$. Уравнение Дирака имеет вид

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\boldsymbol{\alpha} \mathbf{p} + \beta m + V(r)) \psi, \quad (1)$$

где $\mathbf{p} = -i(\partial/\partial \mathbf{r})$; α^k , β — четырехмерные матрицы Дирака; m — масса электрона; $V(r) = (Ze^2)/r$ — отталкивающий кулоновский потенциал, Z — формально порядковый номер атомного ядра с зарядом $-Z|e|$; $\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}, t) \\ \chi(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$ — биспинор, $\varphi(\mathbf{r}, t)$, $\chi(\mathbf{r}, t)$ — спинорные волновые функции.

В случае центрально-симметричных внешних полей можно разделить угловые и радиальные переменные. В сферических координатах для стационарных состояний представим биспинор ψ в виде [25]

$$\psi(r, \theta, \varphi, t) = \begin{pmatrix} F(r)\xi(\theta) \\ -iG(r)\sigma^3\xi(\theta) \end{pmatrix} e^{-iEt} e^{im_\varphi\varphi}, \quad (2)$$

где E — энергия электрона; $\xi(\theta)$ — сфероидальные гармоники для частиц со спином $1/2$; $m_\varphi = -j, -j + 1, \dots, j$, j — квантовое число полного момента частицы; σ^3 — двумерная матрица Паули.

При разделении переменных удобно провести эквивалентную замену $\alpha^1 \rightarrow \alpha^3$, $\alpha^2 \rightarrow \alpha^1$, $\alpha^3 \rightarrow \alpha^2$. Кроме того, введем безразмерные переменные $\varepsilon = E/m$, $\rho = r/l_c$, $l_c = 1/m$ — комптоновская длина волны электрона, $\alpha_{fs} = e^2$ — электромагнитная постоянная тонкой структуры. Тогда система уравнений Дирака для радиальных волновых функций и отталкивающего кулоновского потенциала $V(\rho) = Z\alpha_{fs}/\rho$ имеет вид (см., например, [1])

$$\left(\varepsilon + 1 - \frac{Z\alpha_{fs}}{\rho} \right) G(\rho) = \frac{dF}{d\rho} + \frac{1 + \kappa}{\rho} F(\rho), \quad (3)$$

$$- \left(\varepsilon - 1 - \frac{Z\alpha_{fs}}{\rho} \right) F(\rho) = \frac{dG}{d\rho} + \frac{1 - \kappa}{\rho} G(\rho), \quad (4)$$

где κ — квантовое число уравнения Дирака:

$$\kappa = \mp 1, \mp 2 \dots = \begin{cases} -(l + 1), & j = l + 1/2, \\ l, & j = l - 1/2. \end{cases}$$

Здесь j, l — квантовые числа полного и орбитального моментов частицы со спином $1/2$.

Если ввести фазовую функцию [12–15]

$$\text{tg } \Phi(\rho) = \frac{F(\rho)}{G(\rho)}, \quad (5)$$

$$P^2(\rho) = F^2(\rho) + G^2(\rho), \quad (6)$$

$$F(\rho) = P(\rho) \sin \Phi(\rho), \quad (7)$$

$$G(\rho) = P(\rho) \cos \Phi(\rho), \quad (8)$$

то из уравнений (3) и (4) можно получить уравнения для $\Phi(\rho)$ и $P(\rho)$:

$$\frac{d\Phi}{d\rho} = \varepsilon - \frac{Z\alpha_{fs}}{\rho} + \cos(2\Phi) - \frac{\kappa}{\rho} \sin(2\Phi), \quad (9)$$

$$\frac{d \ln P}{d\rho} = -\frac{1}{\rho} + \frac{\kappa}{\rho} \cos(2\Phi) + \sin(2\Phi). \quad (10)$$

Радиальная плотность вероятности для уравнения Дирака равна

$$w_D = (F^2(\rho) + G^2(\rho))\rho^2. \quad (11)$$

1.2. Уравнение второго порядка типа Шредингера. Сначала необходимо осуществить квадрирование уравнения Дирака, перейти от биспинора к спинорным волновым функциям и привести уравнения к самосопряженному виду [3, 11].

Как известно, самосопряженные уравнения второго порядка имеют ряд замечательных свойств, выделяющих их из уравнений общего вида. В частности, собственные функции краевых задач для самосопряженных уравнений образуют полные ортонормированные системы в пространстве дважды непрерывно дифференцируемых функций, т. е. всякая функция из этого пространства разлагается в регулярно сходящийся ряд Фурье по собственным функциям (см., например, [26, 27]).

Для центрально-симметричного кулоновского потенциала полученные уравнения допускают разделение переменных в сферических координатах (r, θ, φ) . Уравнения типа Шредингера (второго порядка) с эффективными потенциалами $U_{\text{eff}}^F(r)$, $U_{\text{eff}}^G(r)$ имеют вид [11]

$$\frac{d^2 F_{\text{Schr}}(\rho)}{d\rho^2} + 2(E_{\text{Schr}} - U_{\text{eff}}^F(\rho))F_{\text{Schr}}(\rho) = 0, \quad (12)$$

$$\frac{d^2 G_{\text{Schr}}(\rho)}{d\rho^2} + 2(E_{\text{Schr}} - U_{\text{eff}}^G(\rho))G_{\text{Schr}}(\rho) = 0. \quad (13)$$

Здесь

$$E_{\text{Schr}} = (\varepsilon^2 - 1)/2. \quad (14)$$

В уравнениях (12) и (13)

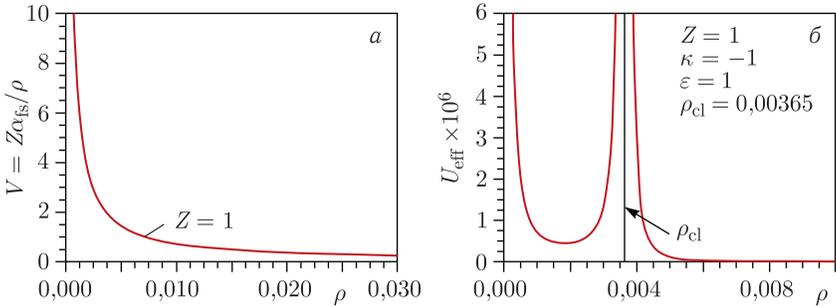
$$U_{\text{eff}}^F(\rho) = \varepsilon V - \frac{1}{2}V^2 + \frac{\kappa(\kappa + 1)}{2\rho^2} + \frac{1}{4} \frac{d^2 V/d\rho^2}{\varepsilon + 1 - V} + \frac{3}{8} \frac{(dV/d\rho)^2}{(\varepsilon + 1 - V)^2} - \frac{1}{2} \frac{\kappa dV/d\rho}{\rho(\varepsilon + 1 - V)}, \quad (15)$$

$$U_{\text{eff}}^G(\rho) = \varepsilon V - \frac{1}{2}V^2 + \frac{\kappa(\kappa + 1)}{2\rho^2} + \frac{1}{4} \frac{d^2 V/d\rho^2}{\varepsilon - 1 - V} + \frac{3}{8} \frac{(dV/d\rho)^2}{(\varepsilon - 1 - V)^2} - \frac{1}{2} \frac{\kappa dV/d\rho}{\rho(\varepsilon - 1 - V)}. \quad (16)$$

Для самосопряженных уравнений (12), (13) радиальные плотности вероятности равны

$$w_F = F_{\text{Schr}}^2(\rho), \quad (17)$$

$$w_G = G_{\text{Schr}}^2(\rho). \quad (18)$$


 Рис. 1. Зависимости $V(\rho)$ (а) и $U_{\text{eff}}(\rho)$ (б)

Уравнения (12), (13) можно использовать для описания движения частиц и античастиц соответственно. Ниже для описания движения электронов мы будем использовать уравнение (12) с эффективным потенциалом $U_{\text{eff}}^F(\rho)$ (15).

В отличие от кулоновского потенциала $V = Z\alpha_{\text{fs}}/\rho$ эффективный потенциал $U_{\text{eff}}^F(\rho)$ (15) сингулярен (рис. 1) при

$$\rho_{\text{cl}} = Z\alpha_{\text{fs}}/(\varepsilon + 1). \quad (19)$$

В естественных единицах r_{cl} пропорционален классическому радиусу электрона $r_f = Ze^2/mc^2$:

$$r_{\text{cl}} = \frac{r_f}{1 + E/mc^2} = \frac{Z(e^2/mc^2)}{1 + E/mc^2}. \quad (20)$$

Ведущая асимптотика потенциала (15) при $\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}$ равна

$$U_{\text{eff}}^F|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} = \frac{3}{8} \frac{1}{(\rho - \rho_{\text{cl}})^2}. \quad (21)$$

Потенциальный барьер (21) является квантово-механически непроницаемым [28]. Квантовая частица не может проникнуть в область $\rho < \rho_{\text{cl}}$. Исключение области $0 \leq \rho < \rho_{\text{cl}}$ из физического рассмотрения не влияет на расчетное сечение рассеяния электронов в кулоновском поле [11] и на трактовку результатов опытов по зондированию внутренней структуры электрона [11, 29].

2. АСИМПТОТИКА ФУНКЦИЙ В ОБЛАСТИ НЕПРОНИЦАЕМОГО БАРЬЕРА

2.1. Уравнение типа Шредингера. Если при $\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}$ радиальную функцию $F_{\text{Schr}}(\rho)$ представить как

$$F_{\text{Schr}}(\rho)|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} = (\rho - \rho_{\text{cl}})^s \sum_{k=0}^{\infty} f_k(\rho - \rho_{\text{cl}})^k, \quad (22)$$

то определяющее уравнение для (12) с учетом (21) приведет к двум решениям: $s_1 = 3/2$, $s_2 = -1/2$ и

$$(F_{\text{Schr}})_1|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} = f_0^{(1)}(\rho - \rho_{\text{cl}})^{3/2}, \tag{23}$$

$$(F_{\text{Schr}})_2|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} = f_0^{(2)}(\rho - \rho_{\text{cl}})^{-1/2}. \tag{24}$$

Решение (24) расходится при $\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}$ и ненормируемо. Подобные решения являются физически неприемлемыми. Аналогично при решении уравнения Дирака в кулоновских полях притяжения и отталкивания физически неприемлемыми считаются расходящиеся при $\rho \rightarrow 0$ решения $F(\rho)$, $G(\rho) \sim 1/\rho^\gamma$ (см., например, [1]). Здесь $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - Z^2\alpha_{\text{fs}}^2}$.

2.2. Уравнение Дирака. Радиальные волновые функции уравнения типа Шредингера $F_{\text{Schr}}(\rho)$, $G_{\text{Schr}}(\rho)$ связаны с волновыми функциями уравнения Дирака $F(\rho)$, $G(\rho)$ соотношениями (см. [11])

$$F_{\text{Schr}}(\rho) = \left(\varepsilon + 1 - \frac{Z\alpha_{\text{fs}}}{\rho} \right)^{-1/2} \rho F(\rho), \tag{25}$$

$$G_{\text{Schr}}(\rho) = \left(|\varepsilon| + 1 + \frac{Z\alpha_{\text{fs}}}{\rho} \right)^{-1/2} \rho G(\rho). \tag{26}$$

Исходя из равенств (23), (24), а также в соответствии с уравнениями (3), (4) в окрестности ρ_{cl} должны существовать два решения уравнения Дирака:

$$\left\{ \begin{aligned} F_1|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} &\sim (\rho - \rho_{\text{cl}})^2, \\ G_1|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} &\sim \text{const } 3, \end{aligned} \right. \tag{27}$$

$$\left\{ \begin{aligned} F_2|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} &\sim \text{const } 1, \\ G_2|_{\rho \rightarrow \rho_{\text{cl}}} &\sim \text{const } 2. \end{aligned} \right. \tag{28}$$

Решениям (28) соответствуют кулоновские функции непрерывного спектра с $\varepsilon > 1$.

В безразмерных переменных волновые функции в кулоновском поле отталкивания, нормированные при $\rho \rightarrow \infty$ на расходящиеся сферические волны, можно представить в виде [1]

$$\left. \begin{aligned} F(\rho) \\ G(\rho) \end{aligned} \right\} = 2^{3/2} \sqrt{\frac{\varepsilon \pm 1}{\varepsilon}} \exp\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \frac{|\Gamma(\gamma + 1 + i\nu)|}{\Gamma(2\gamma + 1)} \frac{(2p\rho)^\gamma}{\rho} \times \\ \times \frac{\text{Im}}{\text{Re}} \left\{ e^{i(p\rho + \xi)} F(\gamma - i\nu, 2\gamma + 1, -2ip\rho) \right\}, \tag{29}$$

где $F(\alpha, \beta, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция; $\Gamma(z)$ — гамма-функция; $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - Z^2 \alpha_{fs}^2}$; $p = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$; $\nu = -\frac{Z \alpha_{fs} \varepsilon}{p}$; $e^{-2i\xi} = \frac{\gamma - i\nu}{\kappa - i\nu/\varepsilon}$.

Функции (29) при $\rho = \rho_{cl}$ равны некоторым константам. Такое поведение приводит к нефизической асимптотике (24) для волновой функции уравнения типа Шредингера.

Другая асимптотика (27) не противоречит системе уравнений Дирака (3), (4). Однако решения с асимптотикой (27) пока не фигурируют в опубликованных работах. Эти решения мы получим, используя уравнения для фазовой функции (9), (10).

3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДИРАКА ДЛЯ ФАЗОВОЙ ФУНКЦИИ

3.1. Особые точки уравнения (9). В особых точках (ρ, Φ) уравнения (9)

$$\frac{d\Phi}{d\rho} = \frac{\rho(\varepsilon + \cos 2\Phi) - Z\alpha_{fs} - \kappa \sin 2\Phi}{\rho}$$

числитель и знаменатель должны обращаться в нуль:

$$\rho = 0, \quad \kappa \sin 2\Phi = -Z\alpha_{fs}. \quad (30)$$

Следовательно, такие особые точки существуют, только когда

$$\left| -\frac{Z\alpha_{fs}}{\kappa} \right| < 1. \quad (31)$$

Теория Дирака с точечным кулоновским потенциалом справедлива лишь при $Z \leq 137$. В этом случае равенство $|-Z\alpha_{fs}/\kappa| = 1$ не достигается.

При $Z > 137$ из-за чрезмерной сингулярности кулоновского потенциала при $\rho \rightarrow 0$ возникает квантово-механическая проблема «падения» на центр. Для устранения этой проблемы необходимо самосопряженное расширение гамильтониана, сводящееся в конечном итоге к учету конечных размеров атомных ядер (см., например, [11]).

Из второго равенства (30) следует, что

$$\Phi_k = \frac{(-1)^{k+1}}{2} \arcsin \frac{Z\alpha_{fs}}{\kappa} + \frac{\pi}{2}k, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (32)$$

Решения уравнения (9) периодичны с периодом π , а особые точки $(0, \Phi_k)$ «квазипериодичны» с периодом $\pi/2(\Phi_k + \pi/2 \approx \Phi_{k+1})$.

Пусть $Z = 1$, $\kappa = -1$. Тогда в периоде $[-\pi/2, \pi/2]$

$$\Phi_0 \approx 0,00365, \quad \Phi_1 \approx \frac{\pi}{2} - 0,00365. \quad (33)$$

При $Z = 1$, $\kappa = 1$ в периоде $[-\pi/2, \pi/2]$

$$\Phi_0 \approx -0,00365, \quad \Phi_{-1} \approx -\frac{\pi}{2} + 0,00365. \quad (34)$$

Аналогичные представления Φ_0, Φ_1 и Φ_0, Φ_{-1} можно привести для любых отрицательных и положительных значений κ и для произвольных значений $Z \geq 1$.

Отметим, что при увеличении Z особые точки $(0, \Phi_0)$, $(0, \Phi_1)$ и $(0, \Phi_0)$, $(0, \Phi_{-1})$ в периоде $[-\pi/2, \pi/2]$ сближаются друг с другом, но не совпадают из-за выполнения неравенства (31).

3.2. О характере особых точек уравнения (9). Разложим числитель и знаменатель правой части уравнения (9) в окрестности особой точки $(0, \Phi_k)$ с точностью до членов второго порядка относительно ρ и $(\Phi - \Phi_k)$:

$$\frac{d\Phi}{d\rho} = \frac{\rho(\varepsilon + \cos 2\Phi) - Z\alpha_{fs} - \kappa \sin 2\Phi}{\rho} = \frac{c\rho + d(\Phi - \Phi_k) + P_1(\rho, \Phi)}{a\rho + b(\Phi - \Phi_k)},$$

$$a = 1, \quad b = 0, \quad c = \varepsilon + \cos(2\Phi_k), \quad d = -2\kappa \cos(2\Phi_k),$$

$$P_1(\rho, \Phi) = -2 \sin(2\Phi_k)\rho(\Phi - \Phi_k) + 2\kappa \sin(2\Phi_k)(\Phi - \Phi_k)^2 + \dots$$

Характер особых точек определяется корнями λ_1, λ_2 характеристического уравнения ([30, с. 441–442; 31, гл. 6]):

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad \lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -2\kappa \cos(2\Phi_k).$$

Рассмотрим определитель $\Delta_k = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \lambda_1 \lambda_2 = -2\kappa \cos(2\Phi_k)$.

Прежде всего, для классификации особых точек выясним, возможны ли равенства $\lambda_1 = \lambda_2$ и $\Delta_k = 0$. Чтобы выяснить это, достаточно ограничиться рассмотрением особых точек в периоде $[-\pi/2, \pi/2]$, где $\cos(\Phi) \geq 0$. В этом случае

$$\lambda_2 = -2\kappa \cos(2\Phi_k) = -2\kappa \cos\left((-1)^{k+1} \arcsin \frac{Z\alpha_{fs}}{\kappa} + k\pi\right) =$$

$$= 2 \operatorname{sign}(\kappa) (-1)^{k+1} \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha_{fs})^2}.$$

Если $\kappa < 0$ и k — нечетное или $\kappa > 0$ и k — четное, то $\lambda_2 < 0$, следовательно, $\lambda_2 \neq \lambda_1$.

Если $\kappa < 0$ и k — четное или $\kappa > 0$ и k — нечетное, то $\lambda_2 = 2 \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha_{fs})^2} > 0$. Разность $\kappa^2 - (Z\alpha_{fs})^2 > 0$ не является целым числом. Следовательно, выражение $\sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha_{fs})^2}$ иррационально и $\lambda_2 \neq \lambda_1$. Кроме того, $\Delta_k = 2 \operatorname{sign}(\kappa) (-1)^{k+1} \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha_{fs})^2} \neq 0$.

Таким образом, для особых точек $(0, \Phi_k)$ уравнения (9) всегда выполняются неравенства $\lambda_1 \neq \lambda_2$, $\Delta_k \neq 0$ и характер этих точек опре-

деляется знаком определителя $\Delta_k = -2\kappa \cos(2\Phi_k) = 2 \operatorname{sign}(\kappa)(-1)^{k+1} \times \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha_{fs})^2}$ или, эквивалентно, знаком произведения $\operatorname{sign}(\kappa) \times (-1)^{k+1}$ [16, 17], т. е.:

- 1) если $\Delta_k = -2\kappa \cos(2\Phi_k) > 0$, то точка $(0, \Phi_k)$ — «узел»;
- 2) если $\Delta_k = -2\kappa \cos(2\Phi_k) < 0$, то точка $(0, \Phi_k)$ — «седло».

Из этого, в частности, следует, что при изменении знака κ характер точки $(0, \Phi_k)$ меняется: «узел» становится «седлом», а «седло» — «узлом». Это замечание иллюстрируется рис. 2 и 3.

3.3. Интегральные кривые уравнения (9). Анализ интегральных кривых уравнения для фазовой функции проводился с помощью как численных решений уравнения (9), так и пакета программ Maple с разложением решений уравнения (9) вплоть до ρ^3 . В обоих случаях получены результаты, согласующиеся с результатами теоретического анализа в п. 3.2.

Для отрицательных значений κ особая точка $(0, \Phi_1)$ представляет собой «седло» ($\operatorname{sign}(\kappa)(-1)^{1+1} < 0$) с сепаратрисой, аналитически совпадающей с кулоновской функцией $F(\rho)$ (29), особая точка $(0, \Phi_0)$ представляет собой «узел» ($\operatorname{sign}(\kappa)(-1)^{0+1} > 0$). Для $\kappa > 1$ особая точка $(0, \Phi_0)$ представляет собой «седло» ($\operatorname{sign}(\kappa)(-1)^{0+1} < 0$), а точка $(0, \Phi_{-1})$ является «узлом» ($\operatorname{sign}(\kappa)(-1)^{-1+1} > 0$). Перечисленные случаи для $\kappa = \mp 1, Z = 1, \varepsilon = 1, 2$ представлены на рис. 2 и 3.

Общее решение уравнения (9) при $\rho \rightarrow 0$ имеет вид

$$\Phi = \operatorname{arctg} \left(\frac{1}{Z\alpha_{fs}} \left(\frac{2\gamma}{1 - C\rho^{-2\gamma}} - \kappa - \gamma \right) \right) + k\pi, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (35)$$

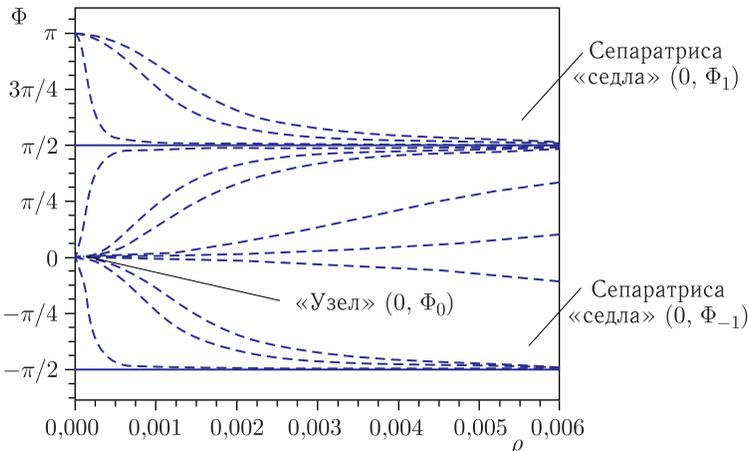


Рис. 2. Интегральные кривые в области особых точек для $\kappa = -1$: $\Phi_0 \approx 0,00365$, $\Phi_1 \approx \pi/2 - 0,00365$, $\Phi_{-1} \approx -\pi/2 - 0,00365$

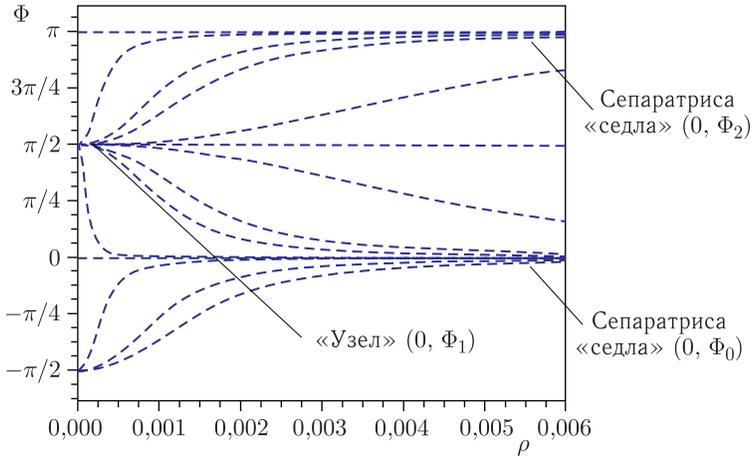


Рис. 3. Интегральные кривые в области особых точек для $\kappa = +1$: $\Phi_0 \approx -0,00365$, $\Phi_1 \approx \pi/2 + 0,00365$, $\Phi_2 \approx \pi - 0,00365$

Константа интегрирования C параметризует семейства интегральных кривых, представленных на рис. 2 и 3. Независимо от знака параметра κ сепаратрисе «узла» соответствует константа $C = \pm\infty$, сепаратрисе «седла» — константа $C = 0$, при этом кривые с отрицательными C из «узла» поднимаются вверх (чем больше константа, тем выше кривая), кривые с положительными C — опускаются вниз (как и для отрицательных C , чем больше константа, тем выше кривая).

Кривые, выходящие из «узла», могут примыкать сверху или снизу к «седловым» сепаратрисам. Существуют также кривые, выходящие из «узла» и не примыкающие к «седловым» сепаратрисам вплоть до $\rho \approx 10$.

Дираковские функции $F(\rho) = P(\rho) \sin \Phi(\rho)$, $G(\rho) = P(\rho) \cos \Phi(\rho)$, соответствующие кривым $\Phi(\rho)$, входящим в «узел», расходятся при $\rho \rightarrow 0$ как $1/\rho^\gamma$, где $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - \alpha_{fs}^2 Z^2}$. Это семейство решений обычно отбрасывается как нефизическое при определении дискретного спектра водородоподобных атомов, а также при получении волновых функций дискретного и непрерывного спектров.

В нашем случае исходя из дуальности решений уравнения типа Шредингера и уравнений Дирака мы с необходимостью должны для обоих уравнений исключить из рассмотрения область $0 \leq \rho < \rho_{cl}$ (см. п. 1.2 и (25), (26) в п. 2.2).

Для области $\rho \geq \rho_{cl}$ проблемы расходимости $\sim 1/\rho^\gamma$ для дираковских функций $F(\rho)$, $G(\rho)$ не существует. Среди фазовых кривых, входящих в «узел», всегда существует необходимая нам кривая с $\Phi(\rho_{cl}) = 0$ и $\Phi \sim (\rho - \rho_{cl})^2$ при $\rho \rightarrow \rho_{cl}$. Численно она находится интегрированием уравнения (9) от $\rho = \rho_{cl}$ до $\rho \approx 0$.

3.4. Численные решения. Кулоновские функции (29) с $\varepsilon > 1$ были получены так же, как решение уравнений Дирака (9), (10).

На рис. 4 приведены функции (29), выраженные в виде зависимости $\text{tg } \Phi(\rho) = F(\rho)/G(\rho)$. Эта зависимость получена с помощью пакета программ Maple. На этом же рисунке приведена аналогичная зависимость, полученная численным интегрированием уравнения (9) слева направо с граничным условием из формул (29) $\text{tg } \Phi(0) = F(0)/G(0)$. Видно хорошее согласие численного и аналитического решений.

На рис. 5 с параметрами, приведенными на рис. 4, показано численное решение уравнения (9) с граничным условием $\Phi(\rho_{cl}) = 0$. Там же для сравнения приведено аналитическое решение (29) в виде $\Phi(\rho) = \arctg F(\rho)/G(\rho)$.

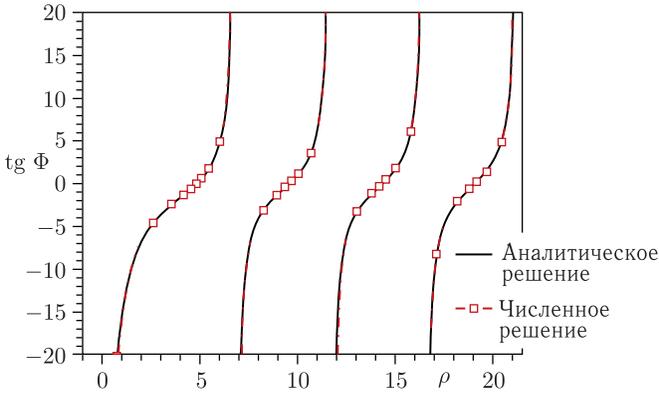


Рис. 4. Зависимости $\text{tg } \Phi(\rho) = F(\rho)/G(\rho)$ для параметров $Z = 1, \varepsilon = 1,2, \kappa = -1$

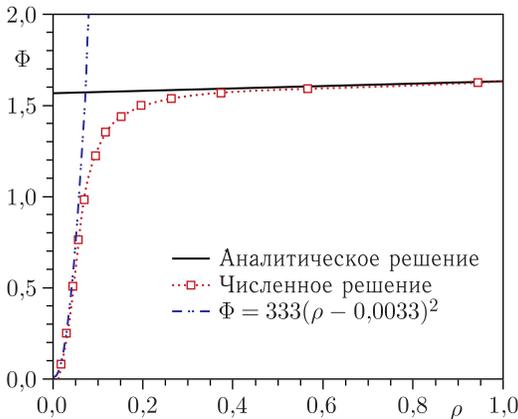


Рис. 5. Аналитическое и численное решения для $\Phi(\rho)$ вблизи $\rho_{cl} = 0,0033$

Отличие решений подтверждает, что для кулоновского потенциала отталкивания существует второе решение уравнения Дирака с асимптотикой (27). Примечательно, что на расстоянии менее одной комптоновской длины волны от $\rho = \rho_{cl}$ это решение примыкает к аналитической функции $F(\rho)$ непрерывного спектра (29).

На рис. 6–11 приведены расчетные зависимости $\Phi(\rho)$, $F(\rho)$, $G(\rho)$ для параметров $\varepsilon = 1, 2$, $\kappa = -1, +1$, $Z = 1, 10, 137$. Все они получены при граничном условии $\Phi(\rho_{cl}) = 0$. На этих же рисунках для сравнения приведены соответствующие зависимости, полученные из формул (29).

Из рис. 6–11 видно, что для всех рассмотренных значений параметров существует отличие зависимостей при граничном условии $\Phi(\rho_{cl}) = 0$ от аналитических зависимостей, полученных с помощью формул (29).

Эти отличия существуют лишь на расстояниях Δ от ρ_{cl} , равных от долей до нескольких комптоновских длин волн электрона. Наибольшие отличия достигаются при $Z = 137$ и $\kappa = -1$ (см. рис. 10). Наименьшие отличия наблюдаются при $Z = 1$ и $\kappa = +1$ (см. рис. 7). Для всех зна-

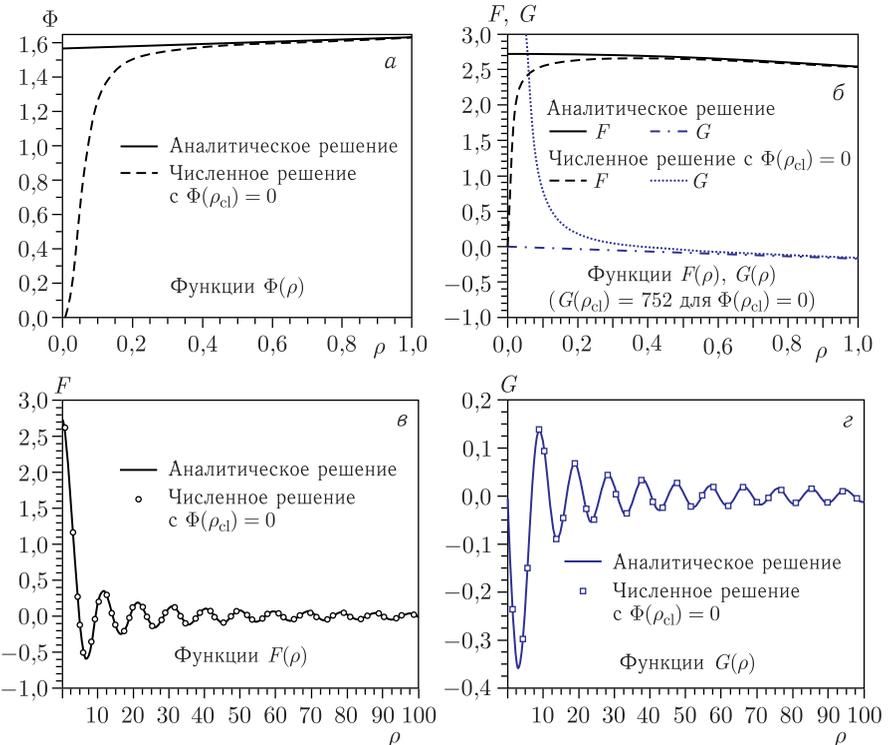


Рис. 6. Зависимости $\Phi(\rho)$, $F(\rho)$, $G(\rho)$ для параметров $\varepsilon = 1, 2$, $\kappa = -1$, $Z = 1$, $\rho_{cl} = 0,003317$

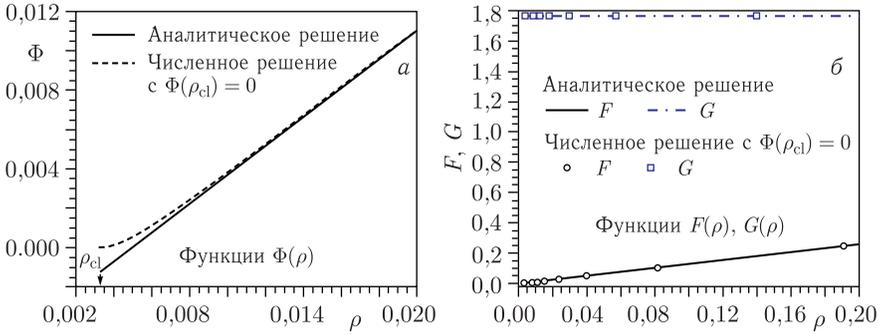


Рис. 7. Зависимости $\Phi(\rho)$, $F(\rho)$, $G(\rho)$ для параметров $\varepsilon = 1,2$, $\kappa = +1$, $Z = 1$, $\rho_{cl} = 0,003317$

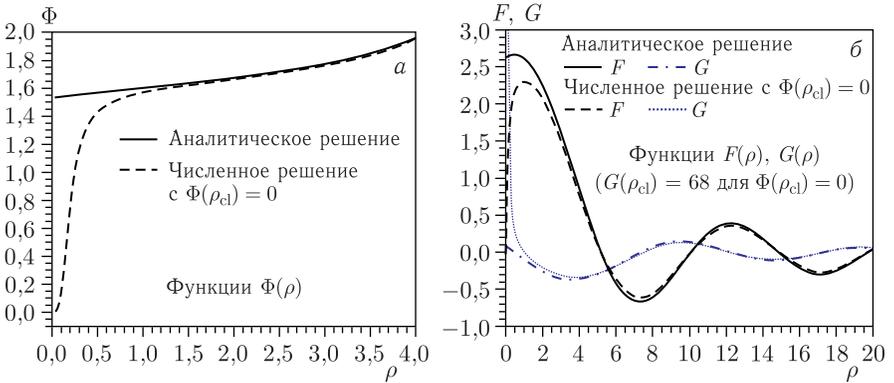


Рис. 8. Зависимости $\Phi(\rho)$, $F(\rho)$, $G(\rho)$ для параметров $\varepsilon = 1,2$, $\kappa = -1$, $Z = 10$, $\rho_{cl} = 0,03317$

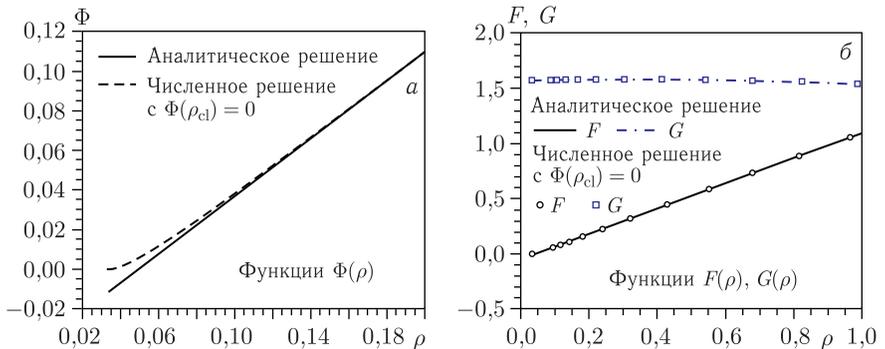


Рис. 9. Зависимости $\Phi(\rho)$, $F(\rho)$, $G(\rho)$ для параметров $\varepsilon = 1,2$, $\kappa = +1$, $Z = 10$, $\rho_{cl} = 0,03317$

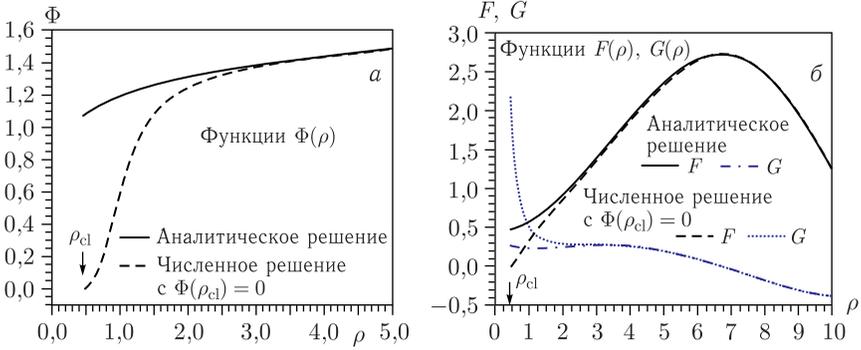


Рис. 10. Зависимости $\Phi(\rho)$, $F(\rho)$, $G(\rho)$ для параметров $\varepsilon = 1,2$, $\kappa = -1$, $Z = 137$, $\rho_{cl} = 0,45443$

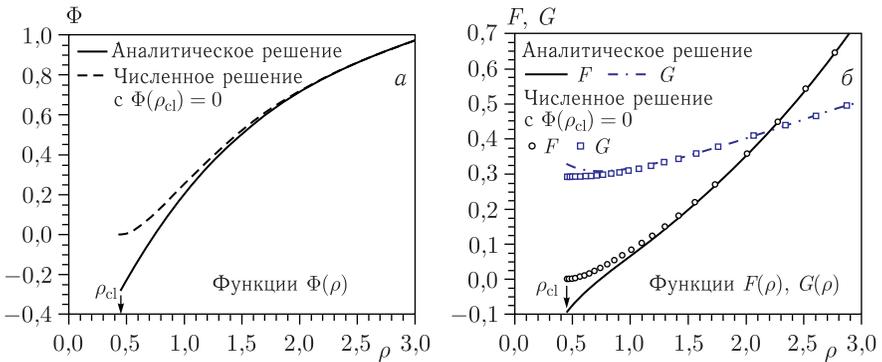


Рис. 11. Зависимости $\Phi(\rho)$, $F(\rho)$, $G(\rho)$ для параметров $\varepsilon = 1,2$, $\kappa = +1$, $Z = 137$, $\rho_{cl} = 0,45443$

чений рассмотренных параметров расчетные зависимости примыкают к аналитическим при $\rho \approx \rho_{cl} + \Delta$.

Проведенный анализ показывает, что использование новых решений уравнения Дирака не приводит к каким-то новым результатам по сравнению с результатами, полученными при использовании традиционных кулоновских функций непрерывного спектра (см. (29)). В этом смысле наш анализ носит лишь методологический характер. Однако мы пришли к важному выводу. В отталкивающем кулоновском поле область определения волновых функций стационарных состояний уравнения Дирака и релятивистского уравнения типа Шредингера не включает в себя область $0 \leq \rho < \rho_{cl}$. В связи с этим в квантовой механике при использовании уравнения типа Шредингера с эффективным потенциалом возникает некоторая аналогия с введением классического радиуса электрона в классической физике. Однако в квантовой теории непроницаемый барьер

возникает лишь для фермиона в отталкивающем кулоновском поле [11]. В кулоновском поле притяжения такой барьер отсутствует. Непроницаемого барьера при $\rho = \rho_{cl}$ нет и для бесспиновых частиц. Наличие полужелого спина и определенного знака электрического заряда, приводящего у фермионов к возникновению квантово-механического непроницаемого барьера в релятивистском уравнении типа Шредингера, должно найти объяснение в будущей релятивистской модели структуры фермионов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В квантовой механике движение частиц со спином 1/2 во внешних электромагнитных и гравитационных полях можно описывать двумя способами: с использованием уравнения Дирака с биспинорной волновой функцией или с использованием самосопряженного релятивистского уравнения типа Шредингера со спинорной волновой функцией. Волновые функции обоих уравнений связаны друг с другом соотношениями (25), (26).

При использовании уравнения типа Шредингера в эффективном потенциале отталкивающего кулоновского поля существует квантово-механический непроницаемый барьер радиусом $r_{cl} = (Z(e^2/mc^2))/(1 + E/mc^2)$. При использовании уравнения Дирака в отталкивающем кулоновском поле такой барьер отсутствует.

В окрестности r_{cl} уравнение типа Шредингера имеет два решения: $(F_{Schr})_1|_{r \rightarrow r_{cl}} \sim (r - r_{cl})^{3/2}$, $(F_{Schr})_2|_{r \rightarrow r_{cl}} \sim (r - r_{cl})^{-1/2}$. Второе решение является расходящимся и ненормируемым при $r - r_{cl}$, поэтому оно физически неприемлемо.

Из соотношений между функциями (25), (26) в окрестности r_{cl} можно получить два решения уравнения Дирака:

$$\begin{cases} F_1|_{r \rightarrow r_{cl}} \sim (r - r_{cl})^2, \\ G_1|_{r \rightarrow r_{cl}} \sim \text{const } 3, \end{cases} \quad \begin{cases} F_2|_{r \rightarrow r_{cl}} \sim \text{const } 1, \\ G_2|_{r \rightarrow r_{cl}} \sim \text{const } 2. \end{cases}$$

Решениям F_2 , G_2 соответствуют аналитические кулоновские функции непрерывного спектра. Эти функции обычно используются в квантово-механических расчетах. Функции, соответствующие решениям F_1 , G_1 , до сих пор не исследовались, как видно из публикаций. Проведенный нами анализ показал, что такие решения действительно существуют. Однако они расходятся при $r \rightarrow 0$.

Возникает парадоксальная ситуация. С одной стороны, физически приемлемым решениям уравнения Дирака F_2 , G_2 соответствует расходящееся решение уравнения типа Шредингера $(F_{Schr})_2$. С другой стороны, приемлемому решению $(F_{Schr})_1$ соответствуют расходящиеся решения уравнения Дирака F_1 , G_1 .

Мы предложили следующий выход из такой ситуации. Непроницаемый барьер в эффективном потенциале уравнения типа Шредингера

не позволяет фермионам проникать в область $r < r_{cl}$. В этом случае из области определения волновых функций фактически исключается диапазон $0 \leq r < r_{cl}$.

Из дуальности уравнения Дирака и уравнения типа Шредингера следует, что необходимо также исключить диапазон $0 \leq r < r_{cl}$ из области определения дираковских волновых функций. В этом случае исчезает проблема расходимости волновых функций при $r \rightarrow 0$.

Уменьшение области определения волновых функций по имеющимся у нас данным не приводит к каким-то новым практическим результатам. Ранее нами доказано, что существование непроницаемого барьера не влияет в нижайшем порядке теории возмущений на сечение кулоновского рассеяния электронов [11]. Из-за зависимости $r_{cl} \sim 1/E$ при $E \gg m$ наличие барьера не противоречит результатам опытов по исследованиям структуры электрона (см., например, [11, 29]). Приведенные расчеты с изменением физических параметров показали, что новые решения уравнения Дирака с граничными условиями $\Phi(r_{cl}) = 0$, $F(r_{cl}) = 0$ на расстояниях долей или нескольких единиц комптоновской длины фермиона от $r = r_{cl}$ практически начинают совпадать со стандартными кулоновскими функциями непрерывного спектра. Очевидно, что использование новых решений не приведет к получению каких-либо новых результатов. В то же время наше рассмотрение носит методологический характер и полезно для дискуссий о дальнейшем развитии квантовой теории.

Благодарности. Авторы благодарят А. Л. Новоселову за существенную техническую помощь в подготовке статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 2006.
2. Pauli W. Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik // Handbuch Phys. V. 24, Pt. 1. Berlin: J. Springer, 1933.
3. Зельдович Я. Б., Попов В. С. Электронная структура сверхтяжелых атомов // УФН. 1971. Т. 105. С. 403.
4. Горбатенко М. В., Незнамов В. П. Квантовая механика стационарных состояний частиц в пространстве-времени классических черных дыр // ТМФ. 2020. Т. 205. С. 284.
5. Case K. M. Singular Potentials // Phys. Rev. 1950. V. 80. P. 797.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. III: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 1963.
7. Переломов А. М., Попов В. С. «Падение на центр» в квантовой механике // ТМФ. 1970. Т. 4. С. 48.
8. Незнамов В. П., Сафронов И. И. Стационарные решения уравнения второго порядка для точечных фермионов в гравитационном поле Шварцшильда // ЖЭТФ. 2018. Т. 154. С. 761.

9. *Незнамов В. П., Сафронов И. И., Шемарулин В. Е.* Стационарные решения уравнения второго порядка для фермионов в пространстве-времени Райснера–Нордстрёма // ЖЭТФ. 2018. Т. 154. С. 802.
10. *Незнамов В. П., Сафронов И. И., Шемарулин В. Е.* Стационарные решения уравнения второго порядка для фермионов в пространстве-времени Керра–Ньюмена // ЖЭТФ. 2019. Т. 155. С. 69.
11. *Незнамов В. П., Сафронов И. И.* Стационарные решения уравнения второго порядка для фермионов во внешнем кулоновском поле // Там же. С. 792.
12. *Pruefer H.* Neue Herleitung der Sturm–Liouvilleschen Reihenentwicklung stetiger Funktionen // Math. Ann. 1926. V. 95. P. 499.
13. *Ulehla I., Havlíček M.* New Method for Computation of Discrete Spectrum // Appl. Math. C. 1980. V. 25. P. 257.
14. *Ulehla I., Havlíček M., Hořejší J.* Eigenvalues of the Schroedinger Operator via the Pruefer Transformation // Phys. Lett. A. 1981. V. 82. P. 64.
15. *Ulehla I.* On Some Applications of the Pruefer Transformation and Its Extensions. Rutherford Laboratory Preprint RL-82-095. 1982.
16. *Foldy L. L., Wouthuysen S. A.* On the Dirac Theory of Spin 1/2 Particles and Its Nonrelativistic Limit // Phys. Rev. 1950. V. 78. P. 29;
Eriksen E. Foldy–Wouthuysen Transformation. Exact Solution with Generalization to the Two-Particle Problem // Phys. Rev. 1958. V. 111. P. 1011;
Neznamov V. P., Silenko A. J. Foldy–Wouthuysen Wave Functions and Conditions of Transformation between Dirac and Foldy–Wouthuysen Representations // J. Math. Phys. 2009. V. 50. P. 122302.
17. *Silenko A. J., Zhang Pengming, Zou Liping* // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122. P. 159302.
18. *Zou Liping, Zhang Pengming, Silenko A. J.* Position and Spin in Relativistic Quantum Mechanics // Phys. Rev. A. 2020. V. 101. P. 032117.
19. *Silenko A. J.* General Properties of the Foldy–Wouthuysen Transformation and Applicability of the Corrected Original Foldy–Wouthuysen Method // Phys. Rev. A. 2016. V. 93. P. 022108.
20. *Незнамов В. П.* К теории взаимодействующих полей в представлении Фолди–Ваутхайзена // ЭЧАЯ. 2006. Т. 37. С. 152; arXiv: hep-th/0411050.
21. *Незнамов В. П.* Изотопическое представление Фолди–Ваутхайзена и киральная симметрия // ЭЧАЯ. 2012. Т. 43. С. 33; arXiv:1107.06953[physics.gen-ph].
22. *Neznamov V. P., Shemarulin V. E.* Quantum Electrodynamics with Self-Conjugated Equations with Spinor Wave Functions for Fermion Fields // Intern. J. Mod. Phys. A. 2021. V. 36. P. 2150086.
23. *Holster L. S.* Scalar Formalism for Quantum Electrodynamics // J. Math. Phys. 1985. V. 26. P. 1348.
24. *Neznamov V. P.* The Lack of Vacuum Polarization in Quantum Electrodynamics with Spinors in Fermion Equations // Intern. J. Mod. Phys. A. 2021. V. 36. P. 2150173; arXiv:2110.03530[physics.gen-ph].
25. *Lasenby A., Dolan S., Prutchar J., Caceres A., Dolan S.* Bound States and Decay Times of Fermions in a Schwarzschild Black Hole Background // Phys. Rev. D. 2005. V. 72. P. 105014.
26. *Петровский И. Г.* Лекции об уравнениях с частными производными. М.: Физматлит, 1961.
27. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1981.

28. *Dittrich J., Exner P.* Tunneling through a Singular Potential Barrier // *J. Math. Phys.* 1985. V. 26. P. 2000.
29. *Gabrielse G., Hanneke D., Kinoshita T., Nio M., Odom B.* New Determination of the Fine Structure Constant from the Electron Value and QED // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. P. 030802.
30. Математический энциклопедический словарь / Гл. ред. Ю. В. Прохоров. М.: Сов. энцикл., 1988.
31. *Андреев А. Ф.* Особые точки дифференциальных уравнений. Минск: Высш. шк., 1979.