

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
ИМ. М.В.КЕЛДЫША

В.Н.СОРОКИН

УПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ БЫСТРЫХ
ЭЛЕКТРОНОВ
С РЕЛЯТИВИСТСКИМ АТОМОМ ВОДОРОДА

МОСКВА, 2006 г.

Сорокин В.Н.¹

*Упругие столкновения быстрых электронов
с релятивистским атомом водорода.*

Аннотация

Работа носит научно-методический характер. Она может быть использована как дополнение к спецкурсам по теории обобщенных и специальных функций. В работе продолжено изучение релятивистского атома водорода в модели В.В.Козлова и Е.М.Никишина. Исследование проводится на примере задачи рассеяния в борновском приближении.

Sorokin V.N.

*The resilient collisions of the fast electrons
with relativity hydrogen atom.*

Abstract

The paper has scientific-methodics character. It may be used as supplement to lectures on the theory of distributions and special functions. In paper there is continued the investigation of relativity hydrogen atom in V.V.Kozlov and E.M.Nikishin representation. The consideration is carried out the example of the scattering problem in Bohr approach.

1

Работа частично поддержана грантами:

1) INTAS 03-51-6637,
2) РФФИ 05-01-00697,
3) НШ 1551.2003.1.

Введение

В 1986 г. В.В.Козлов и Е.М.Никишин [1] предложили модель релятивистского атома водорода, отличающуюся от общепринятых подходов Клейна-Гордона и Дирака. В частности, в рамках этой модели была получена формула Бора для энергитических уровней атома. Для того, чтобы судить об адекватности этой модели другим физическим теориям, необходимо ее более глубокое изучение. К сожалению, с 86-го года работ в этом направлении не было. Только в работе [2] 2005 г. в дополнение к статье [1] были вычислены волновые функции в импульсном представлении и исследовано асимптотическое поведение энтропии.

В настоящей работе мы изучаем рассеяние электронов релятивистским атомом. Исследование проводится в рамках модели Козлова-Никишина. Постановка задачи рассеяния тесно привязана к этой модели и несколько отличается от общепринятых.

1. Модель Козлова-Никишина

1.1.

Конфигурационное пространство системы – это четырехмерное пространство Минковского $Q = \mathbb{R}^4$ с декартовыми координатами $\mathbf{s} = (ct, x, y, z)$ и с индефинитной метрикой

$$\mathbf{s}^2 = c^2t^2 - x^2 - y^2 - z^2. \quad (1)$$

Здесь x, y, z – пространственные координаты, t – время, c – скорость света. Обозначим

$$K = \{\mathbf{s} \in Q : \mathbf{s}^2 < 0\}$$

пространственноподобный конус в конфигурационном пространстве. Соответственно,

$$K^\pm = \{\mathbf{s} \in Q : \mathbf{s}^2 > 0, \pm ct > 0\}$$

конусы *абсолютного будущего* и *абсолютного прошлого*, а

$$K^0 = \{\mathbf{s} \in Q : \mathbf{s}^2 = 0\}$$

световой конус.

Состояние системы определяет *волновая функция*

$$\psi : K \longrightarrow \mathbb{C}, \quad (2)$$

которая удовлетворяет *стационарному уравнению Шредингера*

$$H\psi = E\psi,$$

где *оператор Гамильтона* H есть сумма кинетической и потенциальной энергии:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0c^2}\square + U,$$

E – энергия системы, не включающая энергию покоя. При этом

$$\frac{1}{c^2}\square = \frac{\partial^2}{c^2\partial t^2} - \Delta$$

оператор Даламбера, а

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

оператор Лапласа. Потенциальная энергия U (в дальнейшем будем называть ее *потенциалом*) – это заданная функция

$$U : \mathbb{K} \longrightarrow \mathbb{R}.$$

Для водородоподобного атома полагаем

$$U = -\frac{\varkappa}{\rho},$$

где

$$\rho^2 = x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2, \quad \rho > 0,$$

а $\varkappa = Ze_0^2$ – постоянная взаимодействия. Здесь Z – ядерный заряд (порядковый номер атома).

В гамильтониан входят следующие физические постоянные:

- $e_0 = 4.80294 \cdot 10^{-10}$ ед.СГСЭ – заряд электрона,
- $m_0 = 9.1086 \cdot 10^{-28}$ г – масса электрона,
- $c = 2.997928 \cdot 10^{10}$ см/сек – скорость света в вакууме,
- $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-27}$ эрг · сек – постоянная Планка (введенная Максом Планком в 1900 г.).

Фактически в уравнении Шредингера вместо m_0 должна стоять приведенная масса электрона, получающаяся после перехода к системе центра масс. Но поскольку масса протона примерно равна $1840m_0$, то столь малой погрешностью пренебрегают.

Подчеркнем, что время t не является собственным временем электрона, это – рассогласование времени электрона и времени ядра. Этим объясняется выбор пространственноподобного конуса в конфигурационном пространстве – для того, чтобы электрон мог взаимодействовать с ядром, рассогласование времен должно быть ”достаточно мало”.

В дальнейшем считаем $Z = 1$, т.е. изучаем атом водорода. Перейдем к атомной системе единиц, в нашем случае совпадающей с кулоновской:

- единица массы – m_0 ,
- единица длины – $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 \varkappa} = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см – боровский радиус, т.е. радиус первой боровской орбиты атома водорода (полученный Нильсом Бором в 1913 г.),
- единица времени – $\frac{\hbar^3}{m_0 \varkappa^2} = 0.24 \cdot 10^{-16}$ сек – характерное время атомных процессов,
- единица энергии – $\frac{m_0 \varkappa^2}{\hbar^2} = 27.21$ эл.-вольт,
- единица заряда – e_0 .

Тогда в безразмерных единицах уравнение Шредингера примет вид

$$\left(\frac{1}{c^2}\square - \frac{2}{\rho}\right)\psi = E\psi. \quad (3)$$

Это уравнение инвариантно относительно *группы Лоренца*, т.е. группы линейных преобразований конфигурационного пространства, сохраняющих квадратичную форму (1).

В рассматриваемой модели не учитывается спин электрона, т.е. фактически речь идет о мезоатоме.

1.2.

Наряду с конфигурационным пространством \mathbb{Q} рассмотрим сопряженное *пространство импульсов* $\mathbb{P} = \mathbb{Q}^* = \mathbb{R}^4$ с декартовыми координатами $\mathbf{s}^* = (ct^*, x^*, y^*, z^*)$, которые имеют смысл энергии и трех импульсов соответственно, и с индефинитной метрикой, аналогичной (1). Обозначим \mathbb{K}^* пространственноподобный конус в сопряженном пространстве.

Переход от координатного представления к импульсному осуществляет *преобразование Фурье*, которое в безразмерных единицах имеет вид

$$\psi^*(\mathbf{s}^*) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^4 \int_{\mathbb{Q}} \psi(\mathbf{s}) e^{i\mathbf{s}\mathbf{s}^*} dv(\mathbf{s}), \quad (4)$$

где

$$\mathbf{s}\mathbf{s}^* = c^2 t t^* - x x^* - y y^* - z z^*$$

идентифинитное скалярное произведение, а $dv(\mathbf{s}) = cdt dx dy dz$ – элемент объема. Тогда ψ^* будет волновой функцией в импульсном представлении. Напомним, что мы рассматриваем волновые функции ψ , определенные в конусе K , тем самым в (4) полагаем $\psi = 0$ вне K .

Определим гильбертово пространство \mathcal{H} – подпространство в $L^2(K, dv)$, состоящее из функций, носители преобразований Фурье которых принадлежат K^* . Аналогичным образом определим сопряженное пространство \mathcal{H}^* . Тогда преобразование Фурье будет унитарным оператором

$$* : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}^*.$$

В модели Козлова-Никишина ищутся решения стационарного уравнения Шредингера (3), принадлежащие гильбертову пространству \mathcal{H} . Они определяют *связные состояния* атома.

1.3.

В работе [1] было показано, что дискретный спектр уравнения (3) состоит из энергитических уровней, определенных формулой Бора:

$$E_n = -\frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Соответствующие собственные функции $\psi_{n,\nu,1,m}$ нумеруются четырьмя квантовыми числами, а именно:

- $n = 1, 2, 3, \dots$ – *главное квантовое число*,
- $\nu = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$ – *релятивистское квантовое число*,
- $l = \nu, \nu + 1, \nu + 2, \dots$ – *орбитальное квантовое число*,
- $m = -l, -l + 1, \dots, l$ – *магнитное квантовое число*.

Выбор связных состояний с фиксированными квантовыми числами обусловлен законами сохранения соответствующих физических величин. Мы видим, что энергитические уровни E_n имеют бесконечное вырождение.

Для квантовых чисел n, l, m мы используем стандартную терминологию. Квантовое число ν не имеет аналога в нерелятивистской

теории, оно появляется из-за временной координаты. Но фактически, число ν также, как числа l и m , связано с законами сохранения вращательного момента и его проекций.

Если волновую функцию ψ , соответствующую некоторому связанному состоянию, нормировать условием

$$\|\psi\|^2 = \int_K |\psi|^2 dv = 1.$$

то величина $w = |\psi|^2$ даст нам плотность распределения электронного заряда в атоме.

Волновые функции $\psi_{n,\nu,l,m}$ были получены в работе [1] методом разделения переменных в *псевдосферических координатах*. А именно, в пространственноподобном конусе K вводятся следующие криволинейные координаты:

$$\begin{cases} ct = \rho \operatorname{sh} \tau \\ z = \rho \operatorname{ch} \tau \cos \theta \\ y = \rho \operatorname{ch} \tau \sin \theta \sin \varphi \\ x = \rho \operatorname{ch} \tau \sin \theta \cos \varphi \end{cases}, \text{ где } \begin{cases} 0 < \rho < +\infty \\ -\infty < \tau < +\infty \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ -\infty < \varphi < +\infty \pmod{2\pi} \end{cases}$$

Элемент объема в псевдосферических координатах равен

$$dv = \rho^3 d\rho \operatorname{ch}^2 \tau d\tau \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Тогда

$$\psi_{n,\nu,l,m} = R_{n,\nu}(\rho) T_{\nu,l}(\tau) Y_{l,m}(\theta, \varphi),$$

где

- $R_{n,\nu}$ – функции Лагерра,
- $T_{\nu,l}$ – собственные функции потенциала Пешля-Теллера [3], [4]:

$$V(\tau) = -\frac{1(1+1)}{\operatorname{ch}^2 \tau},$$

- $Y_{l,m}$ – сферические функции (собственные функции оператора Лапласа на единичной сфере).

Отличительной особенностью этой модели является рассмотрение антипериодических (по переменной φ) сферических функций.

1.4.

В настоящей работе мы рассмотрим рассеяние электронов на невозбужденном атоме. Поэтому явный вид волновой функции выпишем только для основного состояния, в котором

$$n = 1, \quad \nu = \frac{1}{2}, \quad l = \frac{1}{2}, \quad m = \pm \frac{1}{2}.$$

Соответствующая нормированная волновая функция имеет вид

$$\psi_a = \frac{2}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\rho}}{\sqrt{\rho}} \frac{\sqrt{\sin \theta}}{\operatorname{ch}^{3/2} \tau} e^{\pm \frac{i\varphi}{2}}.$$

2. Постановка задачи рассеяния

2.1.

Пусть в пространственноподобном конусе \mathcal{K} конфигурационного пространства \mathcal{Q} задан некоторый потенциал

$$U : \mathcal{K} \longrightarrow \mathbb{R}.$$

”До момента рассеяния” частица (электрон) является свободной. Тем самым, ее волновая функция имеет вид простой плоской волны:

$$\psi^{(\text{in})}(\mathbf{s}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{s}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}}, \quad \mathbf{s} \in \mathcal{Q}. \quad (5)$$

Здесь

$$\mathbf{k} = (k_t, k_x, k_y, k_z) \in \mathcal{K}$$

волновой вектор. Обозначим

$$k = \sqrt{-\mathbf{k}^2} > 0$$

”длину” волнового вектора. Как и выше

$$\mathbf{k}\mathbf{s} = ct \cdot k_t - x \cdot k_x - y \cdot k_y - z \cdot k_z$$

идефинитное скалярное произведение.

Если рассматривать рассеянную частицу снова как свободную, то ее волновая функция будет иметь вид

$$\psi^{(\text{sc})}(\mathbf{s}) = f \cdot \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{s}) = f \cdot e^{i\mathbf{k}'\mathbf{s}}, \quad (6)$$

где \mathbf{k}' – волновой вектор рассеянной частицы. Коэффициент f в формуле (6) носит название *амплитуды рассеяния*. При этом в формулах (5) и (6) используется одна и та же нормировка волновой функции, при которой плотность потока равна скорости частиц.

Амплитуда рассеяния f является функцией векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' . Нахождение этой величины сводится к точному решению уравнения Шредингера с потенциалом U , при этом соотношения (5) и (6) задают асимптотику решения на бесконечности. Точное вычисление амплитуды рассеяния возможно лишь для небольшого числа потенциалов. В остальных случаях используют асимптотические методы.

Описанная нами задача рассеяния частицы на потенциале U получается стандартным образом из задачи о столкновении двух частиц после перехода к системе центра масс.

2.2.

В настоящей работе мы изучаем *упругое рассеяние*. Это означает, что в результате рассеяния:

- не меняется квадрат длины волнового вектора: $k'^2 = k^2$,
- не меняется рассеивающий потенциал U .

Далее, мы изучаем рассеяние *быстрых частиц*, для которых $k \rightarrow \infty$. В этой ситуации мы можем пользоваться *борновским приближением*, т.е. вычислять амплитуду рассеяния в соответствии со стационарной теорией возмущений по формуле

$$f = -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{s}) U(\mathbf{s}) \overline{\psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{s})} dv(\mathbf{s}). \quad (7)$$

Эту приближенную формулу, полученную в нерелятивистском случае Максом Борном в 1926 г. мы примем за определение амплитуды рассеяния.

Рассмотрим разность волновых векторов

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}.$$

Тогда в соответствии с формулой Борна (7) вычисление амплитуды рассеяния сводится к вычислению интеграла Фурье от рассеивающего потенциала:

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{K}} U(\mathbf{s}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{s}} dv(\mathbf{s}). \quad (8)$$

Амплитуда рассеяния имеет вероятностный смысл. Величина $|f|^2$ – это (нормированная на плотность потока) плотность распределения вероятности для вектора \mathbf{k}' .

2.3.

Мы изучаем рассеяние электрона на атоме водорода. Другими словами, в качестве рассеивающего потенциала мы берем потенциал атома U_a , который является суперпозицией притягивающего кулоновского потенциала атомного ядра U_c и отталкивающего потенциала электронного облака U_e , экранирующего ядро:

$$U_a = U_c + U_e.$$

Здесь

$$U_c = \begin{cases} -\frac{1}{\rho}, & \text{если } \mathbf{s} \in \mathbf{K}, \\ 0, & \text{если } \mathbf{s} \notin \mathbf{K}, \end{cases}$$

при этом $\rho = \sqrt{-\mathbf{s}^2} > 0$.

Если атом находится в связанном состоянии с нормированной волновой функцией ψ_a , то плотность электронного облака равна $w_a = |\psi_a|^2$, и тем самым,

$$U_e(\mathbf{s}) = - \int_{\mathbf{K}} w_a(\mathbf{s}') U_c(\mathbf{s} - \mathbf{s}') dv(\mathbf{s}'). \quad (9)$$

Интеграл (9) представляет собой свертку плотности заряда атомного электрона с кулоновским потенциалом:

$$U_e = -w_a * U_c.$$

Тогда по теореме о свертке интеграл Фурье (8) будет равен

$$\hat{U}_a = \hat{U}_c \cdot (1 - \mathcal{F}),$$

где

$$\mathcal{F}(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{s}} w_a(\mathbf{s}) dv(\mathbf{s})$$

интеграл Фурье от плотности заряда атомного электрона. Эта величина называется *атомным форм-фактором*.

3. Преобразование Фурье потенциала Кулона

3.1.

В этом параграфе мы вычислим преобразование Фурье

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^4 \int_{\mathbf{Q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{s}} U(\mathbf{s}) dv(\mathbf{s}) \quad (10)$$

для Лоренц-инвариантных потенциалов, и в частности, для потенциала Кулона. Если, например, функция U суммируемая: $U \in L_1(\mathbf{Q})$, то интеграл (10) существует. В более общей ситуации – это преобразование Фурье обобщенных функций из пространства Шварца \mathcal{S}^* . Мы опишем действие этого функционала в подпространстве $\mathring{\mathcal{S}}$, состоящем из основных функций, обращающихся в нуль на световом конусе.

Потенциал U называется *Лоренц-инвариантным*, если

$$U(\mathbf{s}) = \begin{cases} 0, & \text{когда } \mathbf{s} \notin \mathbf{K}, \\ \mathcal{U}(\rho), & \text{когда } \mathbf{s} \in \mathbf{K}, \end{cases}$$

где $\rho^2 = -\mathbf{s}^2$, $\rho > 0$, а $\mathcal{U} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ – заданная функция. Такой потенциал инвариантен относительно группы Лоренца. Аналогично определяются Лоренц-инвариантные потенциалы с носителями во времениподобных конусах.

3.2.

Переходя в интеграле (10) к сферическим координатам, получим

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\mathbf{q}) = & \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \cdot e^{-itt'} \cdot \int_{|t|}^{+\infty} r^2 dr \cdot \mathcal{U}(\rho) \cdot \\ & \cdot \int_0^\pi \sin \theta d\theta \cdot \exp\{irr' \cos \theta \cos \theta'\} \cdot \\ & \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \exp\{irr' \sin \theta \sin \theta' \cdot (\sin \varphi \sin \varphi' + \cos \varphi \cos \varphi')\}, \quad (11) \end{aligned}$$

где "штрихами" отмечены координаты вектора \mathbf{q} . (В дальнейшем полагаем $c = 1$.)

Интегрирование по сферическим углам является хорошо известной процедурой. Напомним эти вычисления.

Воспользуемся *формулой Бесселя*:

$$\int_0^{2\pi} e^{i\zeta \cos \varphi} d\varphi = 2\pi J_0(\zeta),$$

где $J_0(\zeta)$ – *функция Бесселя первого рода*. (Все необходимые нам формулы из теории функций Бесселя можно найти, например, в [5]).

Введем обозначение

$$\zeta = rr' \sin \theta \sin \theta'.$$

Тогда интеграл по $d\varphi$ в формуле (11) будет равен

$$\int_0^{2\pi} \exp\{i\zeta \cos(\varphi - \varphi')\} d\varphi = 2\pi J_0(\zeta).$$

В частности, функция \tilde{U} не зависит от координаты φ' .

Вычислим интеграл по $d\theta$ в формуле (11):

$$\int_0^\pi \exp\{irr' \cos \theta \cos \theta'\} J_0(rr' \sin \theta \sin \theta') \sin \theta d\theta. \quad (12)$$

Введем обозначения: $\eta = rr'$, а также

$$\begin{cases} a = \eta \sin \theta', \\ b = \eta \cos \theta'. \end{cases}$$

Тогда интеграл (12) примет вид

$$\int_0^\pi e^{ib \cos \theta} J_0(a \sin \theta) \sin \theta d\theta = \int_0^{\frac{\pi}{2}} 2 \cos(b \cos \theta) J_0(a \sin \theta) \sin \theta d\theta.$$

Воспользовавшись формулой ²

$$J_{-\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos z,$$

получим

$$\sqrt{2\pi b} \int_0^{\frac{\pi}{2}} J_{-\frac{1}{2}}(b \cos \theta) \sqrt{\cos \theta} J_0(a \sin \theta) \sin \theta d\theta. \quad (13)$$

Интеграл (13) есть частный случай *второго интеграла Соуни-на*:

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} J_\mu(a \sin \theta) (\sin \theta)^{\mu+1} J_\nu(b \cos \theta) (\cos \theta)^{\nu+1} d\theta = a^\mu b^\nu \frac{J_{\mu+\nu+1}(\sqrt{a^2 + b^2})}{(\sqrt{a^2 + b^2})^{\mu+\nu+1}},$$

где $\operatorname{Re} \mu > -1$, $\operatorname{Re} \nu > -1$.

Следовательно, интеграл (13) равен

$$\sqrt{2\pi} \frac{J_{\frac{1}{2}}(\eta)}{\sqrt{\eta}} = \frac{2 \sin \eta}{\eta}.$$

В частности, функция \tilde{U} не зависит от координаты θ' .

Таким образом,

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\pi} \iint_{\mathcal{K}} \mathcal{U}(\sqrt{r^2 - t^2}) e^{-itt'} \frac{\sin(rr')}{rr'} r^2 dr dt, \quad (14)$$

где

$$\mathcal{K} = \{(t, r) : |t| < r\}.$$

²Во всех вспомогательных формулах используются локальные переменные. Например, здесь z – комплексная переменная, а не z – координата.

3.3.

Ниже мы покажем, что для потенциала Кулона интеграл (14) легко вычисляется в декартовых координатах. Но для того, чтобы применять эту формулу к произвольным Лоренц-инвариантным потенциалам, мы проведем вычисления в гиперболических координатах.

Пусть сперва $\mathbf{q} \in \mathbb{K}$. Сделаем замену переменных:

$$\begin{cases} t = \rho \operatorname{sh} \tau \\ r = \rho \operatorname{ch} \tau \end{cases} \quad u \quad \begin{cases} t' = \rho' \operatorname{sh} \tau' \\ r' = \rho' \operatorname{ch} \tau' \end{cases}, \quad \text{где} \quad \begin{cases} 0 < \rho, \rho' < +\infty \\ -\infty < \tau, \tau' < +\infty. \end{cases}$$

Введем обозначения

$$\begin{cases} \alpha = \rho \rho' \operatorname{ch} \tau' \\ \beta = \rho \rho' \operatorname{sh} \tau'. \end{cases}$$

Перепишем интеграл (14) в виде

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \rho^3 d\rho \mathcal{U}(\rho) \cdot \int_0^{+\infty} \operatorname{ch}^2 \tau d\tau \cos(\beta \operatorname{sh} \tau) \frac{\sin(\alpha \operatorname{ch} \tau)}{\alpha \operatorname{ch} \tau}.$$

Рассмотрим интеграл

$$F(\alpha, \beta) = \frac{1}{\alpha} \int_0^{\infty} \cos(\beta \operatorname{sh} \tau) \sin(\alpha \operatorname{ch} \tau) \operatorname{ch} \tau d\tau.$$

Этот интеграл расходится. Здесь и далее такие интегралы вычисляются в терминах обобщенных функций. Интегрированием по частям легко проверить, что функция $F(\alpha, \beta)$ удовлетворяет уравнению

$$\beta \frac{\partial F}{\partial \alpha} + \alpha \frac{\partial F}{\partial \beta} = 0.$$

Следовательно, она зависит только от $\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}$:

$$F(\alpha, \beta) = F_0(\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}), \quad \alpha > \beta \geq 0.$$

Для того, чтобы найти функцию F_0 , положим $\beta = 0$. Тогда

$$g(\alpha) = \alpha F_0(\alpha) = \int_0^\infty \sin(\alpha \operatorname{ch} \tau) \operatorname{ch} \tau d\tau.$$

Сделаем замену переменной $t = \operatorname{ch} \tau$. Получим

$$g(\alpha) = \int_1^\infty \sin(\alpha t) \frac{t dt}{\sqrt{t^2 - 1}}.$$

Воспользуемся формулой Мелера-Сонина:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} - \nu\right) Y_\nu(\alpha) = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{\alpha}\right)^\nu \int_1^\infty (t^2 - 1)^{-\nu - \frac{1}{2}} \cos(\alpha t) dt,$$

где $\alpha > 0$, $-\frac{1}{2} < \operatorname{Re} \nu < \frac{1}{2}$, и $Y_\nu(\alpha)$ – функция Бесселя второго рода (или функция Неймана). В частности, при $\nu = 0$ получим

$$\int_1^\infty \cos(\alpha t) \frac{dt}{\sqrt{t^2 - 1}} = -\frac{\pi}{2} Y_0(\alpha). \quad (15)$$

Дифференцируя формулу (15) по параметру α и учитывая, что

$$Y_0'(\alpha) = -Y_1(\alpha),$$

получаем следующее синус-преобразование Фурье (в пространстве обобщенных функций):

$$g(\alpha) = -\frac{\pi}{2} Y_1(\alpha).$$

Итак, мы доказали, что сужение функции $\tilde{U}(\mathbf{q})$ на пространственноподобный конус \mathbf{K}

- 1) Лоренц-инвариантно: $\tilde{U}_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = \tilde{U}_{\mathbf{K}}(q)$, где $q = \sqrt{-\mathbf{q}^2} > 0$;
- 2) функция \tilde{U} определяется следующим интегральным преобразованием:

$$\tilde{U}_{\mathbf{K}}(q) = - \int_0^\infty \mathcal{U}(\rho) \frac{Y_1(q\rho)}{q\rho} \rho^3 d\rho. \quad (16)$$

3.4.

Пусть теперь вектор \mathbf{q} принадлежит конусу абсолютного будущего \mathbf{K}^+ . (Случай $\mathbf{q} \in \mathbf{K}^-$ рассматривается аналогично.) В этом

конусе перейдем к следующим псевдосферическим координатам:

$$\begin{cases} t' = q \operatorname{ch} \tau' \\ z' = q \operatorname{sh} \tau' \cos \theta' \\ y' = q \operatorname{sh} \tau' \sin \theta' \sin \varphi' \\ x' = q \operatorname{sh} \tau' \sin \theta' \cos \varphi', \end{cases} \quad \text{где} \quad \begin{cases} 0 < q < +\infty \\ 0 \leq \tau' < +\infty \\ 0 \leq \theta' \leq \pi \\ 0 \leq \varphi' < 2\pi. \end{cases}$$

Также как в п.3.3 получим

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \rho^3 d\rho \mathcal{U}(\rho) \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{ch}^2 \tau d\tau e^{-i\rho q \operatorname{sh} \tau \operatorname{ch} \tau'} \frac{\sin(\rho q \operatorname{ch} \tau \operatorname{sh} \tau')}{\rho q \operatorname{ch} \tau \operatorname{sh} \tau'}.$$

Снова обозначим

$$\begin{cases} \alpha = \rho q \operatorname{ch} \tau' \\ \beta = \rho q \operatorname{sh} \tau'. \end{cases}$$

Тогда

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \rho^3 d\rho \mathcal{U}(\rho) \int_0^\infty \operatorname{ch}^2 \tau d\tau \cos(\alpha \operatorname{sh} \tau) \frac{\sin(\beta \operatorname{ch} \tau)}{\beta \operatorname{ch} \tau}.$$

Вычислим внутренний интеграл

$$F(\alpha, \beta) = \frac{1}{\beta} \int_0^\infty \cos(\alpha \operatorname{sh} \tau) \sin(\beta \operatorname{ch} \tau) \operatorname{ch} \tau d\tau.$$

Это – расходящийся интеграл. Вычисляем его в смысле теории обобщенных функций. Во-первых, замечаем, что

$$F(\alpha, \beta) = F_0(\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}), \quad \alpha > \beta \geq 0,$$

где

$$F_0(\alpha) = \int_0^\infty \cos(\alpha \operatorname{sh} \tau) \operatorname{ch}^2 \tau d\tau,$$

или после замены $t = \operatorname{sh} \tau$

$$F_0(\alpha) = \int_0^\infty \cos(\alpha t) \sqrt{1+t^2} dt.$$

Известно, что

$$\int_0^{\infty} \frac{\cos(\alpha t)}{\sqrt{1+t^2}} dt = K_0(|\alpha|),$$

где K_0 – модифицированная функция Бесселя третьего рода или функция Макдональда.

Тогда дифференцированием по параметру получаем

$$F_0(\alpha) = K_0(\alpha) - K_0''(\alpha) = \frac{K_0'(\alpha)}{\alpha} = -\frac{K_1(\alpha)}{\alpha}.$$

Точнее, F_0 – обобщенная функция вида

$$\langle F_0, \phi \rangle = \text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi(\alpha) - \phi(0)) \left(-\frac{K_1(|\alpha|)}{|\alpha|} \right) d\alpha,$$

где ϕ – пробная функция.

Ограничение функции \tilde{U} на времениподобные конусы \mathbf{K}^{\pm} :

- 1) Лоренц-инвариантно: $\tilde{U}_{\mathbf{K}^{\pm}}(\mathbf{q}) = \tilde{U}_{\mathbf{K}^{\pm}}(q)$, где $q = \sqrt{\mathbf{q}^2} > 0$;
- 2) функция $\tilde{U}_{\mathbf{K}^{\pm}}(q)$ определяется следующим интегральным преобразованием:

$$\tilde{U}_{\mathbf{K}^{\pm}}(q) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \mathcal{U}(\rho) \frac{K_1(\rho q)}{\rho q} \rho^3 d\rho. \quad (17)$$

3.5.

В качестве примера рассмотрим потенциал Юкавы

$$\mathcal{U}_{\gamma}(\rho) = -\frac{e^{-\gamma\rho}}{\rho}.$$

Здесь $\gamma > 0$ – радиус взаимодействия.

Предложение 1. Преобразование Фурье потенциала Юкавы имеет вид

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \begin{cases} \tilde{U}_{\mathbf{K}}(q), & \text{если } \mathbf{q}^2 < 0 \text{ и } q = \sqrt{-\mathbf{q}^2} > 0, \\ \tilde{U}_{\mathbf{K}^{\pm}}(q), & \text{если } \mathbf{q}^2 > 0 \text{ и } q = \sqrt{\mathbf{q}^2} > 0, \end{cases}$$

где

$$\tilde{U}_{\mathbf{K}}(q) = \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{\log\left(\frac{\sqrt{\gamma^2+q^2}-\gamma}{q}\right)}{(\gamma^2+q^2)^{3/2}} - \frac{\gamma}{q^2(\gamma^2+q^2)} \right\} \quad (18)$$

и

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa^{\pm}}(q) = \frac{2}{\pi} \left\{ -\frac{\log\left(\frac{\sqrt{\gamma^2 - q^2} + \gamma}{q}\right)}{(\gamma^2 - q^2)^{3/2}} + \frac{\gamma}{q^2(\gamma^2 - q^2)} \right\}, \quad (19)$$

при этом берутся согласованные ветви многозначных функций.

Доказательство. 1) Вначале рассмотрим случай $q^2 < 0$. Имеем

$$q\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa}(q) = \int_0^{\infty} e^{-\gamma\rho} Y_1(q\rho) \rho d\rho.$$

Функции Бесселя второго рода $Y_{\nu}(z)$ для любого комплексного индекса ν , не являющегося целым числом, определены формулой

$$Y_{\nu}(z) = \frac{1}{\sin(\nu\pi)} \{ \cos(\nu\pi) J_{\nu}(z) - J_{-\nu}(z) \}.$$

Для целых индексов n по определению

$$Y_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} Y_{\nu}(z).$$

Отсюда по правилу Лопиталья получаем

$$Y_1(z) = \frac{2}{\pi} \left\{ j_1(z) - \frac{J_0(z)}{z} \right\},$$

где

$$j_{\nu}(z) = \frac{\partial}{\partial \nu} J_{\nu}(z).$$

Обозначим

$$G_{\nu}(\gamma, q) = \int_0^{\infty} e^{-\gamma\rho} J_{\nu}(q\rho) d\rho$$

и

$$\tilde{g}_{\nu}(\gamma, q) = \int_0^{\infty} e^{-\gamma\rho} j_{\nu}(q\rho) \rho d\rho.$$

Тогда

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa}(q) = \frac{2}{\pi q} \left\{ \tilde{g}_1(\gamma, q) - \frac{1}{q} G_0(\gamma, q) \right\}.$$

Формула для преобразования Лапласа функций Бесселя первого рода хорошо известна (и легко доказывается, например, интегрированием степенного ряда):

$$G_\nu(\gamma, q) = \frac{R^\nu}{\sqrt{\gamma^2 + q^2}},$$

где

$$R = R(\gamma, q) = \frac{\sqrt{\gamma^2 + q^2} - \gamma}{q}.$$

В частности,

$$G_0(\gamma, q) = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 + q^2}}.$$

Положим

$$g_\nu(\gamma, q) = \int_0^\infty e^{-\gamma\rho} j_\nu(q\rho) d\rho.$$

Тогда

$$g_\nu(\gamma, q) = \frac{\partial}{\partial \nu} G_\nu(\gamma, q) = \frac{R^\nu \log R}{\sqrt{\gamma^2 + q^2}}.$$

В частности,

$$g_1(\gamma, q) = \frac{R \log R}{\sqrt{\gamma^2 + q^2}}.$$

Имеем

$$\tilde{g}_1(\gamma, q) = -\frac{\partial}{\partial \gamma} g_1(\gamma, q).$$

После дифференцирования получаем

$$\tilde{g}_1(\gamma, q) = \frac{q \log R}{(\gamma^2 + q^2)^{3/2}} + \frac{R}{\gamma^2 + q^2}.$$

Откуда следует формула (18).

2) Пусть теперь $q^2 > 0$. Имеем

$$\tilde{U}_{K^\pm}(q) = \frac{2}{\pi q} \int_0^\infty e^{-\gamma\rho} K_1(q\rho) \rho d\rho.$$

Преобразование Лапласа функций Макдональда хорошо известно:

$$\int_0^\infty K_0(q\rho) e^{-\gamma\rho} d\rho = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 - q^2}} \log\left(\frac{\sqrt{\gamma^2 - q^2} + \gamma}{q}\right), \quad (20)$$

при этом берутся согласованные ветви многозначных функций. Дифференцируя формулу (20) по параметру q , получаем (19).

Предложение доказано.

Потенциал Кулона может быть получен из потенциала Юкавы предельным переходом $\gamma \rightarrow 0+$. При этом, как легко видеть, функции (18) стремятся к нулю в пространстве обобщенных функций.

Действительно,

$$\langle \tilde{U}_K, \phi \rangle = \int_0^\infty \tilde{U}_K(q) \phi(q) q^3 dq = \gamma \cdot \int_0^\infty h(x) \phi(\gamma x) dx,$$

где

$$h(x) = \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{x^3}{(1+x^2)^{3/2}} \log\left(\frac{\sqrt{1+x^2}-1}{x}\right) - \frac{x}{1+x^2} \right\}.$$

Функция $h(x)$ непрерывна на полуоси $[0, +\infty)$ и при этом

$$h(x) = O\left(\frac{1}{x}\right) \quad \text{при } x \rightarrow +\infty. \quad (21)$$

Далее, достаточно рассмотреть пробные функции вида

$$\phi_a(q) = \begin{cases} 1, & \text{если } 0 \leq q \leq a, \\ 0, & \text{если } a < q < +\infty. \end{cases} \quad (22)$$

Тогда

$$\langle \tilde{U}_K, \phi_a \rangle = \gamma \cdot \int_0^{a/\gamma} h(x) dx = O\left(\gamma \log \frac{1}{\gamma}\right) \rightarrow 0, \quad \gamma \rightarrow 0.$$

Таким образом, для кулоновского потенциала $\tilde{U}_K = 0$.

Переходя к пределу при $\gamma \rightarrow 0+$ в формуле (19), получим

$$\tilde{U}_{K^\pm}(q) = \frac{1}{q^3}.$$

Действительно,

$$\langle \tilde{U}_{\kappa^\pm}(q), \phi(q) \rangle - \langle \frac{1}{q^3}, \phi(q) \rangle = \gamma \cdot \int_0^\infty h(x) \phi(\gamma x) dx, \quad (23)$$

где

$$h(x) = \frac{2}{\pi} \left\{ -\frac{x^3}{(1-x^2)^{3/2}} \log\left(\frac{\sqrt{1-x^2}+1}{x}\right) + \frac{x}{1-x^2} \right\} - 1, \quad \text{если } 0 < x < 1,$$

$$h(x) = \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{x^3}{(x^2-1)^{3/2}} \arccos \frac{1}{x} - \frac{x}{x^2-1} \right\} - 1, \quad \text{если } 1 < x < +\infty.$$

Функция $h(x)$ непрерывна на полуоси $[0, +\infty)$ и при этом выполняется условие (21). Поэтому, как и выше, разность (23) стремится к нулю при $\gamma \rightarrow 0+$ для любой функции (22), а значит и для любой основной функции.

3.6.

Как было отмечено выше, интеграл (14) для потенциала Кулона может быть легко вычислен в декартовых координатах.

Имеем

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{r'} \mathcal{J},$$

где

$$\mathcal{J} = \iint_{\kappa} \frac{1}{\sqrt{r^2-t^2}} e^{-itt'} \sin(rr') r dt dr.$$

Сделаем замену переменных

$$\begin{cases} u = r - t \\ v = r + t. \end{cases}$$

Получим

$$\mathcal{J} = \frac{1}{8i} \tilde{\mathcal{J}},$$

где

$$\tilde{\mathcal{J}} = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{u+v}{\sqrt{uv}} \exp\left(-it' \frac{v-u}{2}\right) \left\{ \exp\left(ir' \frac{u+v}{2}\right) - \exp\left(-ir' \frac{u+v}{2}\right) \right\} dudv.$$

Тогда

$$\tilde{\mathcal{J}} = \mathcal{J}_u^+ - \mathcal{J}_u^- + \mathcal{J}_v^+ - \mathcal{J}_v^-,$$

где

$$\mathcal{J}_u^\pm = \int_0^\infty \int_0^\infty \sqrt{\frac{u}{v}} \exp\left(-it' \frac{v-u}{2}\right) \exp\left(\pm ir' \frac{u+v}{2}\right) dudv,$$

$$\mathcal{J}_v^\pm = \int_0^\infty \int_0^\infty \sqrt{\frac{v}{u}} \exp\left(-it' \frac{v-u}{2}\right) \exp\left(\pm ir' \frac{u+v}{2}\right) dudv.$$

Вводя обозначения

$$\begin{cases} u' = \frac{r'-t'}{2} \\ v' = \frac{r'+t'}{2}, \end{cases}$$

будем иметь

$$\mathcal{J}_u^+ = \int_0^\infty \int_0^\infty \sqrt{\frac{u}{v}} e^{iuv'} e^{ivu'} dudv,$$

$$\mathcal{J}_v^+ = \int_0^\infty \int_0^\infty \sqrt{\frac{v}{u}} e^{iuv'} e^{ivu'} dudv,$$

$$\mathcal{J}_u^- = \int_0^\infty \int_0^\infty \sqrt{\frac{u}{v}} e^{-iuv'} e^{-ivv'} dudv,$$

$$\mathcal{J}_v^- = \int_0^\infty \int_0^\infty \sqrt{\frac{v}{u}} e^{-iuv'} e^{-ivv'} dudv.$$

Рассмотрим обобщенные функции

$$E(\lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{i\lambda x}}{\sqrt{x}} dx,$$

$$\tilde{E}(\lambda) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} e^{i\lambda x} \sqrt{x} dx.$$

Интеграл Френеля $E(\lambda)$ – это регулярная обобщенная функция, а именно:

$$E(\lambda) = C(\lambda) + iS(\lambda),$$

где

$$C(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{|\lambda|}}, \quad S(\lambda) = \frac{\text{sign}(\lambda)}{\sqrt{|\lambda|}}.$$

Интеграл $\tilde{E}(\lambda)$ получается из $E(\lambda)$ дифференцированием:

$$\tilde{E}(\lambda) = \tilde{C}(\lambda) + i\tilde{S}(\lambda),$$

где

$$\langle \tilde{C}, \phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\phi(0) - \phi(\lambda)}{2|\lambda|^{3/2}} d\lambda,$$

$$\langle \tilde{S}, \phi \rangle = \text{V.P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\phi(\lambda)}{2\lambda\sqrt{|\lambda|}} d\lambda.$$

В терминах этих обобщенных функций имеем

$$\mathcal{J}_u^+ = E(u')\tilde{E}(v'), \quad \mathcal{J}_u^- = E(-v')\tilde{E}(-u'),$$

$$\mathcal{J}_v^+ = E(v')\tilde{E}(u'), \quad \mathcal{J}_v^- = E(-u')\tilde{E}(-v').$$

Окончательно,

$$\tilde{\mathcal{J}} = \pi i \{C(u')\tilde{S}(v') + S(u')\tilde{C}(v') + C(v')\tilde{S}(u') + S(v')\tilde{C}(u')\}.$$

Для функций из подпространства $\mathring{\mathcal{S}}$ получим

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{8r'} \frac{1 - \text{sign}(u'v')}{\sqrt{|u'v'|}} \left(\frac{1}{u'} + \frac{1}{v'} \right)$$

или

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4} |u'v'|^{-3/2}, \quad \text{если } u'v' < 0.$$

Возвращаясь к переменным t' и r' , будем иметь

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = (t'^2 - r'^2)^{-3/2}, \quad \text{если } |t'| > r' > 0.$$

Таким образом справедливо

Предложение 2.

1° Преобразование Фурье $\tilde{U}(\mathbf{q})$ потенциала Кулона $U(\mathbf{s}) = -\frac{1}{\rho}$ инвариантно относительно группы Лоренца.

2° Носителем функции $\tilde{U}(\mathbf{q})$ служит времениподобная область $\mathbf{q}^2 > 0$.

3° Имеет место формула

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{q^3}, \quad \text{где } q = \sqrt{\mathbf{q}^2} > 0.$$

Эти выводы совпадают с результатами п.3.5.

3.7.

Мы решили задачу рассеяния на кулоновском потенциале в борновском приближении.

Напомним, что волновой вектор \mathbf{k} свободной частицы, падающей на рассеивающий центр, принадлежит пространственноподобной области, поэтому, без ограничения общности, он имеет вид

$$\mathbf{k} = (0, 0, 0, k), \quad \text{где } k = \sqrt{-\mathbf{k}^2} > 0.$$

Поскольку рассеяние упругое, то волновой вектор рассеянной частицы

$$\mathbf{k}' = (k_t, k_x, k_y, k_z)$$

имеет ту же длину

$$\mathbf{k}'^2 = k_t^2 - k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 = -k^2. \quad (24)$$

В частности, этот вектор также лежит в пространственноподобной области \mathcal{K} . Уравнение (24) задает в \mathcal{K} трехмерный однополостный гиперboloид Γ_k . Амплитуда рассеяния – функция, определенная на этом гиперboloиде. Мы обозначаем

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$$

разность векторов. Условие $\mathbf{q}^2 > 0$ равносильно неравенству

$$k_z > k, \quad (25)$$

определяющему область $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ на Γ_k , для которой рассеяние возможно. Фактически, амплитуда рассеяния определена в этой области:

$$f : \overset{\circ}{\Gamma}_k \longrightarrow \mathbb{C}.$$

В системе координат, связанной со свободной частицей, вектор \mathbf{k} направлен вдоль оси собственного времени. Условия (24) и (25) означают, что вектор \mathbf{k}' лежит в конусе абсолютного будущего, что согласуется с *принципом причинности*.

На поверхности $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ введем новые криволинейные координаты, а именно:

$$\begin{cases} k'_z = k \operatorname{ch} \tau \\ k'_t = k \operatorname{sh} \tau \operatorname{ch} \vartheta \\ k'_y = k \operatorname{sh} \tau \operatorname{sh} \vartheta \sin \varphi \\ k'_x = k \operatorname{sh} \tau \operatorname{sh} \vartheta \cos \varphi, \end{cases} \quad \text{где} \quad \begin{cases} -\infty < \tau < +\infty \\ 0 \leq \vartheta < +\infty \\ 0 \leq \varphi < 2\pi. \end{cases} \quad (26)$$

Функция f не зависит от φ . Она зависит только от двух гиперболических углов τ и ϑ . Эти углы будем называть *углами рассеяния*.

Обозначим $d\omega$ нормированную меру Лебега на поверхности $\overset{\circ}{\Gamma}_k$. В координатах (26) она имеет вид:

$$d\omega = \operatorname{sh}^2 \tau d\tau \operatorname{sh} \vartheta d\vartheta d\varphi.$$

Дифференциальное сечение рассеяния – это мера на $\overset{\circ}{\Gamma}_k$, равная

$$d\sigma = |f|^2 d\omega.$$

Из предложения 2 следует, что для кулоновского потенциала

$$f = -\frac{2\pi}{q^3}.$$

При этом

$$\mathbf{q}^2 = (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 = 2k(k_z - k) = 2k^2(\operatorname{ch} \tau - 1) = 4k^2 \operatorname{sh}^2 \frac{\tau}{2},$$

или

$$q = 2k \left| \operatorname{sh} \frac{\tau}{2} \right|.$$

Таким образом, для кулоновского потенциала амплитуда рассеяния зависит только от одного угла рассеяния τ .

Мы доказали следующее

Предложение 3. *Для потенциала Кулона дифференциальное сечение рассеяния равно*

$$d\sigma = \frac{4\pi^2}{(2k \operatorname{sh} \frac{\tau}{2})^6} d\omega. \quad (27)$$

Отметим, что формула (27) аналогична классической формуле Резерфорда. Как и в нерелятивистском случае, полное сечение рассеяния для кулоновского потенциала

$$\sigma = \int_{\Gamma_k} d\sigma = +\infty$$

бесконечно. Другими словами, рассеяние происходит "преимущественно на малые углы".

3.8.

В заключение параграфа рассмотрим еще один простой пример, а именно, прямоугольную потенциальную яму:

$$\mathcal{U}(\rho) = \begin{cases} -1, & \text{если } 0 < \rho < b, \\ 0, & \text{если } b \leq \rho < +\infty. \end{cases}$$

Применяя интегральное преобразование (16), получим

$$\tilde{\mathcal{U}}_K(q) = \frac{1}{q^4} \int_0^{bq} Y_1(x) x^2 dx = \frac{1}{q^4} x^2 Y_2(x) \Big|_0^{bq}.$$

Поскольку

$$\pi Y_2(x) = -\frac{4}{x^2} - 1 + O(x^2 \log x), \quad x \rightarrow 0,$$

то

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa}(q) = \frac{1}{q^4} \left\{ (bq)^2 Y_2(bq) + \frac{4}{\pi} \right\},$$

при этом

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa}(q) \sim -\frac{1}{\pi} \frac{b^2}{q^2}, \quad q \rightarrow 0.$$

Далее, применяя интегральное преобразование (17), получим

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa^{\pm}}(q) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{q^4} \int_0^{bq} K_1(x) x^2 dx = -\frac{2}{\pi} \frac{1}{q^4} x^2 K_2(x) \Big|_0^{bq}.$$

Поскольку

$$K_2(x) = \frac{2}{x^2} - \frac{1}{2} + O(x^2 \log x), \quad x \rightarrow 0,$$

то

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa^{\pm}}(q) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{q^4} \left\{ 2 - (bq)^2 K_2(bq) \right\},$$

при этом

$$\tilde{\mathcal{U}}_{\kappa^{\pm}}(q) \sim \frac{1}{\pi} \frac{b^2}{q^2}, \quad q \rightarrow 0.$$

Рассмотрим теперь более интересный пример потенциальной ямы, а именно, срезанный кулоновский потенциал:

$$\mathcal{U}(\rho) = \begin{cases} -\frac{1}{\rho}, & \text{если } 0 < \rho < b, \\ 0, & \text{если } b \leq \rho < +\infty. \end{cases}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{U}}_{\kappa}(q) &= \int_0^b \frac{1}{\rho} \cdot \frac{Y_1(q\rho)}{q\rho} \cdot \rho^3 d\rho = \frac{1}{q^3} \cdot \int_0^{bq} Y_1(x) x dx = \\ &= \frac{1}{q^3} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot bq \cdot (Y_1 \mathbf{H}_0 - \mathbf{H}_1 Y_0)(bq), \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\mathbf{H}_\nu(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\Gamma(n + \frac{3}{2})\Gamma(n + \nu + \frac{3}{2})} \left(\frac{z}{2}\right)^{2n+\nu+1}$$

функция Струве.

Аналогично,

$$\begin{aligned} \check{Y}_{\mathbf{K}\pm}(q) &= \frac{2}{\pi} \int_0^b \frac{1}{\rho} \cdot \frac{K_1(q\rho)}{q\rho} \cdot \rho^3 d\rho = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{1}{q^3} \cdot \int_0^{bq} K_1(x) x dx = \\ &= \frac{1}{q^3} \cdot bq \cdot (K_1 \mathbf{L}_0 + \mathbf{L}_1 K_0)(bq), \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$\mathbf{L}_\nu(z) = -ie^{-\frac{i\nu\pi}{2}} \mathbf{H}_\nu(ze^{\frac{i\pi}{2}})$$

модифицированная функция Струве.

Воспользуемся асимптотическими формулами для функций Бесселя при больших значениях аргумента:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0(x) &= Y_0(x) + \frac{2}{\pi x} + O\left(\frac{1}{x^3}\right), \quad x \rightarrow +\infty, \\ \mathbf{H}_1(x) &= Y_1(x) + \frac{2}{\pi} + O\left(\frac{1}{x^2}\right), \quad x \rightarrow +\infty, \end{aligned}$$

а также

$$\begin{aligned} Y_0(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left\{ \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \left[1 + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right] + \right. \\ &\quad \left. + \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \left[-\frac{1}{8x} + O\left(\frac{1}{x^3}\right)\right] \right\}, \quad x \rightarrow +\infty, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y_1(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left\{ \sin\left(x - \frac{3\pi}{4}\right) \left[1 + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right] + \right. \\ &\quad \left. + \cos\left(x - \frac{3\pi}{4}\right) \left[\frac{3}{8x} + O\left(\frac{1}{x^3}\right)\right] \right\}, \quad x \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Тогда

$$(Y_1 \mathbf{H}_0 - \mathbf{H}_1 Y_0)(x) = -\frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) + O\left(\frac{1}{x\sqrt{x}}\right), \quad x \rightarrow +\infty.$$

Применяя обобщенную функцию \tilde{U}_K к пробной функции ϕ_a , определенной формулой (22), получим

$$\langle \tilde{U}_K, \phi_a \rangle = \frac{\pi}{2b} \int_0^{ab} x(Y_1 \mathbf{H}_0 - \mathbf{H}_1 Y_0)(x) dx = O\left(\frac{1}{\sqrt{b}}\right), \quad b \rightarrow +\infty.$$

Следовательно, при $b \rightarrow +\infty$ обобщенные функции (28) стремятся к нулю.

Теперь воспользуемся асимптотическими формулами для модифицированных функций Бесселя:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_0(z) &= -iY_0\left(ze^{\frac{\pi i}{2}}\right) - \frac{2}{\pi z} + O\left(\frac{1}{z^3}\right), \quad z \rightarrow +\infty, \\ \mathbf{L}_1(z) &= -Y_1\left(ze^{\frac{\pi i}{2}}\right) - \frac{2}{\pi} + O\left(\frac{1}{z^2}\right), \quad z \rightarrow +\infty, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} Y_0\left(ze^{\frac{\pi i}{2}}\right) &= \left(-\frac{1}{2i}\right) \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^z \left[1 + \frac{1}{8z} + O\left(\frac{1}{z^2}\right)\right], \quad z \rightarrow +\infty, \\ Y_1\left(ze^{\frac{\pi i}{2}}\right) &= \left(-\frac{1}{2}\right) \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^z \left[1 - \frac{3}{8z} + O\left(\frac{1}{z^2}\right)\right], \quad z \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

А также,

$$\begin{aligned} K_0(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left[1 - \frac{1}{8z} + O\left(\frac{1}{z^2}\right)\right], \quad z \rightarrow +\infty, \\ K_1(z) &= \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \left[1 + \frac{3}{8z} + O\left(\frac{1}{z^2}\right)\right], \quad z \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Откуда находим

$$(K_1 \mathbf{L}_0 + \mathbf{L}_1 K_0)(x) = \frac{1}{x} \left(1 + O\left(\frac{1}{x^2}\right)\right), \quad x \rightarrow +\infty.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{U}_{K^\pm}(q) - 1/q^3, \phi_a(q) \rangle &= \\ &= \frac{1}{b} \int_0^{ab} \{x(K_1 \mathbf{L}_0 + \mathbf{L}_1 K_0)(x) - 1\} dx = O(1/b), \quad b \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Таким образом, при $b \rightarrow +\infty$ обобщенные функции (29) сходятся к $1/q^3$.

4. Вычисление атомного форм-фактора

4.1.

Будем вычислять следующий интеграл Фурье

$$\mathcal{F}(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{K}} w_a(\mathbf{s}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{s}} dv(\mathbf{s}), \quad (30)$$

где w_a – плотность электронного облака, равная $w_a = |\psi_a|^2$, и ψ_a – волновая функция невозбужденного атома, определенная в п.1.4. Таким образом,

$$w_a = \frac{4}{\pi^3} \frac{e^{-2\rho}}{\rho} \frac{\sin \theta}{\text{ch}^3 \tau}.$$

Интеграл (30) вычисляем для векторов \mathbf{q} , принадлежащих конусу \mathbf{K}^+ , в котором вводим псевдосферические координаты из п.3.4. В конусе \mathbf{K} вводим псевдосферические координаты из п.1.3.

Тогда интеграл (30) запишется в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = & \frac{4}{\pi^3} \int_0^\infty \rho^3 d\rho \cdot \frac{e^{-2\rho}}{\rho} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \text{ch}^2 \tau d\tau \cdot \frac{1}{\text{ch}^3 \tau} \cdot \exp\{-i\rho q \text{sh} \tau \text{ch} \tau'\} \cdot \\ & \cdot \int_0^\pi \sin \theta d\theta \cdot \sin \theta \cdot \exp\{i\rho q \text{ch} \tau \text{sh} \tau' \cos \theta \cos \theta'\} \cdot \\ & \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \exp\{i\rho q \text{ch} \tau \text{sh} \tau' (\sin \varphi \sin \varphi' + \cos \varphi \cos \varphi')\}. \end{aligned}$$

Интеграл по $d\varphi$ вычисляется в соответствии с формулой Бесселя. Получим

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = & \frac{8}{\pi^2} \int_0^\infty \rho^2 e^{-2\rho} d\rho \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-i\rho q \text{sh} \tau \text{ch} \tau'\} \frac{d\tau}{\text{ch} \tau} \cdot \\ & \cdot \int_0^\pi \exp\{i\rho q \text{ch} \tau \text{sh} \tau' \cos \theta \cos \theta'\} \cdot \\ & \cdot J_0(\rho q \text{ch} \tau \text{sh} \tau' \sin \theta \sin \theta') \sin^2 \theta d\theta. \quad (31) \end{aligned}$$

4.2.

Обозначим

$$\eta = \rho q \text{ch} \tau \text{sh} \tau',$$

а также

$$\begin{cases} a = \eta \cos \theta', \\ b = \eta \sin \theta'. \end{cases} \quad (32)$$

Тогда интеграл по $d\theta$ в формуле (31) примет вид

$$2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(a \cos \theta) J_0(b \sin \theta) \sin^2 \theta d\theta.$$

Обозначим этот интеграл через $\pi G(a, b)$. Тогда

$$\mathcal{F} = \frac{8}{\pi} \int_0^{\infty} \rho^2 e^{-2\rho} d\rho \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-i\rho q \operatorname{sh} \tau \operatorname{ch} \tau'\} G(a, b) \frac{d\tau}{\operatorname{ch} \tau}. \quad (33)$$

Воспользуемся *формулой Харди*:

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} J_{2\nu}(2\sqrt{z\zeta} \sin \theta) \cos[(z - \zeta) \cos \theta] d\theta = \frac{\pi}{2} J_\nu(z) J_\nu(\zeta),$$

где $\operatorname{Re} \nu > -\frac{1}{2}$. Положим

$$\begin{cases} a = z - \zeta, \\ b = 2\sqrt{z\zeta}, \end{cases} \quad \text{где} \quad \begin{cases} z = \frac{\sqrt{a^2+b^2+a}}{2}, \\ \zeta = \frac{\sqrt{a^2+b^2-a}}{2}. \end{cases} \quad (34)$$

Тогда при $\nu = 0$ будем иметь

$$2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} J_0(b \sin \theta) \cos(a \cos \theta) d\theta = \pi J_0(z) J_0(\zeta).$$

Обозначим этот интеграл через $\pi F(a, b)$. Имеем

$$G = F + \frac{\partial^2}{\partial a^2} F.$$

Выполняя дифференцирование и учитывая формулы (32) и (34), получим

$$\begin{aligned} G = & \left(\frac{1}{\eta} \cos^2 \frac{\theta'}{2} \cos \theta'\right) \cdot J_1\left(\eta \cos^2 \frac{\theta'}{2}\right) J_0\left(\eta \sin^2 \frac{\theta'}{2}\right) + \\ & + \left(-\frac{1}{\eta} \sin^2 \frac{\theta'}{2} \cos \theta'\right) \cdot J_0\left(\eta \cos^2 \frac{\theta'}{2}\right) J_1\left(\eta \sin^2 \frac{\theta'}{2}\right) + \\ & + \left(-\frac{1}{2} \sin^2 \theta'\right) \cdot J_1\left(\eta \cos^2 \frac{\theta'}{2}\right) J_1\left(\eta \sin^2 \frac{\theta'}{2}\right) + \\ & + \left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta'\right) \cdot J_0\left(\eta \cos^2 \frac{\theta'}{2}\right) J_0\left(\eta \sin^2 \frac{\theta'}{2}\right). \end{aligned}$$

4.3.

Обозначим

$$\begin{aligned} a_1 &= \rho q \operatorname{sh} \tau' \cos^2 \frac{\theta'}{2}, \\ a_2 &= \rho q \operatorname{sh} \tau' \sin^2 \frac{\theta'}{2}, \\ b &= \rho q \operatorname{ch} \tau'. \end{aligned}$$

Вычислим интеграл по $d\tau$ в формуле (33). Он равен сумме четырех интегралов:

$$\frac{2 \cos^2 \frac{\theta'}{2} \cos \theta'}{\rho q \operatorname{sh} \tau'} \cdot F_{10} - \frac{2 \sin^2 \frac{\theta'}{2} \cos \theta'}{\rho q \operatorname{sh} \tau'} \cdot F_{01} - \sin^2 \theta' \cdot F_{11} + \sin^2 \theta' \cdot F_{00},$$

где

$$\begin{aligned} F_{10} &= \int_0^\infty \cos(b \operatorname{sh} \tau) J_1(a_1 \operatorname{ch} \tau) J_0(a_2 \operatorname{ch} \tau) \frac{d\tau}{\operatorname{ch}^2 \tau}, \\ F_{01} &= \int_0^\infty \cos(b \operatorname{sh} \tau) J_0(a_1 \operatorname{ch} \tau) J_1(a_2 \operatorname{ch} \tau) \frac{d\tau}{\operatorname{ch}^2 \tau}, \\ F_{11} &= \int_0^\infty \cos(b \operatorname{sh} \tau) J_1(a_1 \operatorname{ch} \tau) J_1(a_2 \operatorname{ch} \tau) \frac{d\tau}{\operatorname{ch} \tau}, \\ F_{00} &= \int_0^\infty \cos(b \operatorname{sh} \tau) J_0(a_1 \operatorname{ch} \tau) J_0(a_2 \operatorname{ch} \tau) \frac{d\tau}{\operatorname{ch} \tau}. \end{aligned}$$

Вначале рассмотрим интеграл F_{11} . Сделаем замену переменной $t = \operatorname{sh} \tau$. Получим

$$F_{11} = \int_0^\infty \cos(bt) J_1(a_1 \sqrt{1+t^2}) J_1(a_2 \sqrt{1+t^2}) \frac{dt}{1+t^2}. \quad (35)$$

Воспользуемся *формулой Бэйли*, а именно:

$$\int_0^\infty J_\mu(bt) t^{\mu+1} \prod_{n=1}^m \{ J_{\nu_n}(a_n \sqrt{t^2 + z_n^2}) (t^2 + z_n^2)^{-\nu_n/2} \} dt = 0,$$

если

$$\begin{aligned} b &> a_1 + \dots + a_m, \\ \operatorname{Re} \left(\nu_1 + \dots + \nu_m + \frac{m-1}{2} \right) &> \operatorname{Re} \mu > -1. \end{aligned}$$

Применяя эту формулу при

$$m = 2, \quad \nu_1 = \nu_2 = 0, \quad z_1 = z_2 = 1, \quad \mu = -\frac{1}{2},$$

получаем, что интеграл (35) равен нулю.

Аналогичным образом, используя дифференцирование по параметрам, из формулы Бэйли и формулы Сонина-Гегенбауэра можно получить значения всех остальных интегралов. Однако все эти интегралы, как и формула Бэйли при $\mu = -\frac{1}{2}$, легко вычисляются по теореме о вычетах. Неравенство

$$b > a_1 + a_2$$

гарантирует справедливость оценок леммы Жордана. Имеем

$$\begin{aligned} F_{00} &= \int_0^\infty \cos(bt) J_0(a_1 \sqrt{1+t^2}) J_0(a_2 \sqrt{1+t^2}) \frac{dt}{1+t^2} = \\ &= \pi i \cdot \operatorname{res}_{t=i} \left\{ \frac{e^{ibt} J_0(a_1 \sqrt{1+t^2}) J_0(a_2 \sqrt{1+t^2})}{1+t^2} \right\} = \\ &= \pi i \cdot \frac{e^{-b} J_0(0) J_0(0)}{2i} = \frac{\pi}{2} e^{-b}. \end{aligned}$$

Далее,

$$\begin{aligned} F_{10} &= \int_0^\infty \cos(bt) \frac{J_1(a_1 \sqrt{1+t^2})}{\sqrt{1+t^2}} J_0(a_2 \sqrt{1+t^2}) \frac{dt}{1+t^2} = \\ &= \pi i \cdot \operatorname{res}_{t=i} \left\{ \frac{e^{ibt} \frac{J_1(a_1 \sqrt{1+t^2})}{\sqrt{1+t^2}} J_0(a_2 \sqrt{1+t^2})}{1+t^2} \right\} = \\ &= \pi i \cdot \frac{e^{-b} \cdot \frac{a_1}{2} \cdot 1}{2i} = \frac{\pi}{4} a_1 e^{-b}. \end{aligned}$$

Аналогично,

$$F_{01} = \frac{\pi}{4} a_2 e^{-b}.$$

Таким образом, интеграл по $d\tau$ равен

$$\begin{aligned} &\frac{2 \cos^2 \frac{\theta'}{2} \cos \theta'}{\rho q \operatorname{sh} \tau'} \cdot \frac{\pi}{4} a_1 e^{-b} - \frac{2 \sin^2 \frac{\theta'}{2} \cos \theta'}{\rho q \operatorname{sh} \tau'} \cdot \frac{\pi}{4} a_2 e^{-b} + \\ &+ \sin^2 \theta' \cdot \frac{\pi}{2} e^{-b} = \frac{\pi}{2} e^{-\rho q \operatorname{ch} \tau'}. \end{aligned}$$

4.4.

Итак, мы доказали, что

$$\mathcal{F} = 4 \int_0^\infty \rho^2 e^{-\gamma\rho} d\rho = \frac{8}{\gamma^3},$$

где

$$\gamma = 2 + q \operatorname{ch} \tau'.$$

Итак, справедливо

Предложение 4. Если вектор

$$\mathbf{q} = (q_t, q_x, q_y, q_z)$$

принадлежит конусу \mathbb{K}^+ , то атомный форм-фактор равен

$$\mathcal{F}_{\mathbb{K}^+}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(1 + q_t/2)^3}.$$

4.5.

Напомним, что амплитуда рассеяния в борновском приближении вычисляется по формуле

$$f = -\frac{1}{2\pi} \hat{U}_a = -\frac{1}{2\pi} \cdot \hat{U}_c \cdot (1 - \mathcal{F}).$$

Здесь \hat{U}_c – интеграл Фурье от кулоновского потенциала. Выше мы доказали, что $\hat{U}_c = 0$, если $\mathbf{q} \in \mathbb{K}$. Если же $\mathbf{q} \in \mathbb{K}^\pm$, то $\hat{U}_c(\mathbf{q}) = \frac{4\pi^2}{q^3}$, где $q = \sqrt{\mathbf{q}^2} > 0$. Таким образом, справедливо

Предложение 5. Амплитуда рассеяния для невозбужденного атома водорода равна

$$f = -\frac{2\pi}{q^3} \left\{ 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{|q_i|}{2}\right)^3} \right\},$$

где

$$q = 2k \operatorname{sh} \frac{\tau}{2}, \quad q_t = k \operatorname{sh} \tau \operatorname{ch} \vartheta.$$

Напомним, что гиперболические углы рассеяния определены формулами

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau} &= \pm \text{Arcch} \frac{k'_z}{k}, \\ \boldsymbol{\vartheta} &= \text{Arcch} \frac{k'_t}{\sqrt{k'^2_z - k^2}},\end{aligned}$$

при этом, знак $\boldsymbol{\tau}$ совпадает со знаком k'_t (см. п.3.7.).

Таким образом, основным результатом, проведенного нами исследования, служит следующая простая формула для дифференциального сечения рассеяния релятивистского атома водорода, находящегося в невозбужденном основном состоянии:

$$d\sigma = 8\pi^3 \left(2k \operatorname{sh} \frac{\boldsymbol{\tau}}{2}\right)^{-6} \left\{1 - \left(1 + \frac{k}{2} |\operatorname{sh} \boldsymbol{\tau}| \operatorname{ch} \boldsymbol{\vartheta}\right)^{-3}\right\}^2 \operatorname{sh}^2 \boldsymbol{\tau} \operatorname{sh} \boldsymbol{\vartheta} d\boldsymbol{\tau} d\boldsymbol{\vartheta}.$$

В отличие от нерелятивистского случая полное сечение рассеяния здесь бесконечно:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} d\sigma = +\infty.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Козлов В.В., Никишин Е.М. *Релятивистский вариант гамильтонова формализма и волновые функции водородоподобного атома* // Вестник Московского университета. Сер.1. Матем. Механ. 1986. №5. С.11-20.
- [2] Приходько М.А. *Асимптотика информационной энтропии для двумерного аналога релятивистского атома водорода в модели Козлова-Никишина* // Мат. заметки. 2005. Т.78, вып.5.
- [3] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика* / М. 1963.
- [4] Флюгге З. *Задачи по квантовой механике* / М. Мир. 1974.
- [5] Бейтмен Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции. Т.2.* М. Наука. 1965.