



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 71 за 2007 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

В.Н. Сорокин

О модели Козлова-Никишина

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Сорокин В.Н. О модели Козлова-Никишина // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2007. № 71. 38 с.

<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2007-71>

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

В.Н.СОРОКИН

О МОДЕЛИ КОЗЛОВА-НИКИШИНА

МОСКВА, 2007 г.

Сорокин В.Н. ¹

О модели Козлова-Никишина

Аннотация

В рамках релятивистской модели Козлова-Никишина изучаются задача рассеяния на кулоновском потенциале, а также волновые функции дискретного спектра для частицы, движущейся в коническом цилиндре. Работа носит научно-методический характер. Она может быть использована как дополнение к спецкурсу по теории специальных функций.

Sorokin V.N.

On Kozlov-Nikishin model

Abstract

In framework of Kozlov-Nikishin relativity model there are investigated the scattering problem on Columb potential and wavefunctions of discret spectrum for particular in the conic cylinder. The paper has scientific-methodic character. It may be used as supplement to lectures on the theory of special functions.

1. Введение.

Хорошо известны трудности в описании взаимодействия релятивистских частиц [1]. В 1986 г. В.В.Козлов и Е.М.Никишин предложили новую гамильтонову модель взаимодействия, инвариантную относительно симплектического действия группы Лоренца-Пуанкаре [2]. Они применили этот подход к изучению одной из наиболее важных физических моделей – теории водородоподобного атома. К сожалению, в последующие двадцать лет эти результаты не получили дальнейшего развития. Однако, в настоящее время интерес к результатам В.В.Козлова и Е.М.Никишина резко возрос. В работах [3], [4] в дополнение к работе [2] были вычислены волновые функции в импульсном представлении, исследовано асимптотическое поведение информации энтропии Больцмана-Шеннона. В работе [5] мы рассмотрели релятивистскую задачу рассеяния на кулоновском потенциале и на невозбужденном атоме.

В §2 настоящей работы приводится краткое описание модели Козлова-Никишина. В §3 обсуждается постановка задачи рассеяния. В §4 приводятся полученные в [5] результаты. В цитируемой работе задача рассеяния была решена в борновском приближении. Задача рассеяния не является центрально-симметричной,

она обладает аксиальной симметрией. Формула Борна реагирует на эту симметрию и с необходимостью требует разбиения пространства Минковского не только на конические пространственноподобную и времениподобные области, но и на соответствующие цилиндрические области. Основные результаты настоящей работы относятся к изучению движения частиц в таких цилиндрических областях. В §5 мы решаем в борновском приближении задачу рассеяния на кулоновском потенциале, ограниченным пространственноподобным цилиндром. Для этой же модели в §6 мы явно находим волновую функцию рассеяния и сравниваем полученный результат с борновским приближением. В §7 вычисляем дискретный спектр и находим связанные состояния частицы, движущейся в цилиндре. Эту модель называем цилиндрическим атомом. Волновые функции связанных состояний вычислены в параболических координатах с целью дальнейшего изучения расщепления энергетических уровней при включении однородного электрического поля. В §8 волновые функции цилиндрического атома вычислены в сферических координатах, которые соответствуют законам сохранения момента.

Настоящая работа носит научно-методический характер и может быть использована как дополнение к спецкурсам по теории специальных функций.

2. Модель Козлова-Никишина.

В работе [2] была предложена модель взаимодействия двух релятивистских частиц, которая после перехода к системе с началом в центре масс сводится к описанию движения одной частицы во внешнем поле. Мы приводим эту модель взаимодействия в таком виде. Также мы пользуемся атомной системой единиц.

Конфигурационное пространство системы – это четырехмерное пространство Минковского

$$Q = \mathbb{R}^4 = \{\mathbf{s} = (t, x, y, z)\}$$

с индефинитной метрикой

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

Мы используем обозначение t вместо ct , где c – скорость света в вакууме. Таким образом, время t , также как пространственные координаты x, y, z , имеет размерность длины.

В конфигурационном пространстве определим пространственноподобный конус

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

два времениподобных конуса, а именно: конус абсолютно будущего

$$K_+ = \{\mathbf{s} \in Q : \mathbf{s}^2 > 0, t > 0\}$$

и конус абсолютно прошедшего

$$K_- = \{\mathbf{s} \in Q : \mathbf{s}^2 > 0, t < 0\},$$

а также световой конус

$$K_0 = \{\mathbf{s} \in Q : \mathbf{s}^2 = 0\}.$$

Состояние системы определяет волновая функция

$$\psi : K \longrightarrow \mathbb{C}.$$

Выбор пространственноподобного конуса объясняется тем, что величины t и x, y, z не являются собственным временем и собственными координатами частицы. Это – рассогласование собственных времен двух взаимодействующих частиц и разности их координат соответственно. Таким образом, условие

$$t^2 < x^2 + y^2 + z^2$$

означает, что рассогласование времен достаточно мало для того, чтобы частицы могли взаимодействовать.

Волновая функция удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера

$$(\square + U)\psi = E\psi.$$

Здесь

$$\square = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

оператор Даламбера. Он играет роль оператора кинетической энергии. Потенциальная энергия U – это произвольная функция вида

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

Спектральный параметр E назовем энергией. Это – энергия частицы, не включающая внутреннюю энергию покоя и энергию движения центра масс.

Потенциал назовем центрально-симметричным, если он зависит только от длины вектора

$$U(\mathbf{s}) = \mathcal{U}(\rho),$$

где

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

а \mathcal{U} – функция вида

$$\mathcal{U} : \mathbb{R}_+ \longrightarrow \mathbb{R}.$$

Важным примером центрально-симметричного потенциала служит кулоновский потенциал притяжения

$$\mathcal{U}(\rho) = -\frac{2}{\rho}.$$

В работе [2] был исследован дискретный и непрерывный спектр гамильтониана

$$\mathcal{H} = \square - \frac{2}{\rho}.$$

Дискретный спектр состоит из отрицательных уровней энергии, определяемых формулой Бора:

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

Каждый уровень бесконечно вырожден, т.е. соответствующее пространство собственных функций бесконечномерно. Дискретному спектру соответствуют связанные состояния системы, т.е. волновые функции, принадлежащие

гильбертову пространству $L_2(\mathbf{K})$ такие, что

$$\int_{\mathbf{K}} |\psi(\mathbf{s})|^2 dv(\mathbf{s}) < +\infty.$$

Здесь

$$dv(\mathbf{s}) = dt dx dy dz$$

элемент объема.

Связанные состояния были найдены методом разделения переменных в псевдосферических координатах

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

Элемент объема в этих координатах равен

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

В работах [3], [4] были вычислены соответствующие волновые функции в импульсном представлении, исследовано асимптотическое поведение их энтропии.

3. Задача рассеяния.

Рассмотрим движение свободной частицы. Другими словами, исследуем решения уравнения Шредингера

$$\square\psi = E\psi. \quad (3.1)$$

В частности, этому уравнению удовлетворяют так называемые плоские волны

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{s}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}}.$$

Здесь

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

волновой вектор. Через $\mathbf{k}\mathbf{s}$ мы обозначаем индефинитное скалярное произведение

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

Предполагаем, что вектор \mathbf{k} принадлежит пространственноподобному конусу в пространстве импульсов, т.е.

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 - k_t^2 > 0, \quad k > 0.$$

Итак, имеем

$$\square\psi_{\mathbf{k}} = k^2\psi_{\mathbf{k}}.$$

Плоская волна $\psi_{\mathbf{k}}$ описывает поток частиц, движущихся равномерно и прямолинейно в направлении вектора \mathbf{k} с импульсом величины k .

С другой стороны, будем искать центрально-симметричные решения уравнения (3.1), т.е. решения, зависящие только от переменной ρ . Запишем оператор Даламбера в псевдосферических координатах

$$\square = -\nabla_{\rho}^2 + \frac{1}{\rho^2} \left[\nabla_{\tau}^2 - \frac{1}{\text{ch}^2 \tau} \left(\nabla_{\theta}^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \nabla_{\varphi}^2 \right) \right],$$

где

$$\begin{aligned} \nabla_{\varphi}^2 &= \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\ \nabla_{\theta}^2 &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \nabla_{\tau}^2 &= \frac{1}{\text{ch}^2 \tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \text{ch}^2 \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \\ \nabla_{\rho}^2 &= \frac{1}{\rho^3} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^3 \frac{\partial}{\partial \rho}. \end{aligned}$$

Тогда для функции $\psi = \psi(\rho)$ получим уравнение

$$\nabla_{\rho}^2 \psi + k^2 \psi = 0.$$

Делая замену переменной $x = k\rho$ и подстановку

$$\psi(\rho) = \frac{w(x)}{x},$$

приходим к уравнению Бесселя

$$x^2 w'' + x w' + (x^2 - 1) w = 0.$$

Это уравнение имеет два линейно независимых решения, в качестве которых можно взять функции Бесселя третьего рода – первую и вторую функции Ганкеля

$$C^{(1)} H_1^{(1)}(x) \quad C^{(2)} H_1^{(2)}(x),$$

где $C^{(1)}$ и $C^{(2)}$ – произвольные постоянные. Таким образом, мы имеем два линейно независимых центрально-симметричных решения

$$\psi_k^{(1)}(\rho) = C^{(1)} \frac{H_1^{(1)}(k\rho)}{k\rho} \quad \psi_k^{(2)}(\rho) = C^{(2)} \frac{H_1^{(2)}(k\rho)}{k\rho}.$$

Учитывая асимптотическое поведение функций Ганкеля

$$H_\nu^{(1,2)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \exp\{\pm(4x - 2\nu\pi - \pi)/4\}[1 + O(1/x)], \quad x \rightarrow +\infty,$$

при соответствующем выборе постоянных получим

$$\psi_k^{(1)}(\rho) \sim \frac{e^{ik\rho}}{\rho^{3/2}} \quad \psi_k^{(2)}(\rho) \sim \frac{e^{-ik\rho}}{\rho^{3/2}} \quad \rho \rightarrow +\infty.$$

Назовем волновые функции $\psi_k^{(1)}$ и $\psi_k^{(2)}$ расходящейся и сходящейся сферической волной соответственно. Функция $\psi_k^{(1)}$ описывает поток частиц, равномерно по всем направлениям уходящих от начала координат на бесконечность.

Вероятностный смысл имеет величина

$$|\psi_k^{(1)}|^2 dv = d\rho \operatorname{ch}^2 \tau d\tau \sin \theta d\theta d\varphi.$$

В отличие от нерелятивистской ситуации полный интеграл по всем углам, т.е. объем псевдосферы, равен бесконечности

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{ch}^2 \tau d\tau \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = +\infty.$$

По аналогии с нерелятивистским случаем под задачей рассеяния на потенциале U мы понимаем нахождение волновой функции рассеяния, т.е. решения уравнения Шредингера

$$(\square + U)\psi = k^2\psi,$$

удовлетворяющего следующему асимптотическому условию

$$\psi = e^{ikz} + f \cdot \frac{e^{ik\rho}}{\rho^{3/2}} + o(1/\rho^{3/2}), \quad \rho \rightarrow +\infty.$$

При этом предполагаем, что функция f не зависит от ρ . Смысл этого условия состоит в следующем. "До момента рассеяния" мы имеем поток частиц, движущихся равномерно и прямолинейно (без ограничения общности вдоль оси z) с импульсом k . Функция f называется амплитудой рассеяния. Величина $|f|^2$ является относительной вероятностью рассеяния частиц по различным направлениям.

4. Приближение Борна.

В соответствии с предложенной выше постановкой задачи рассеяния волновой вектор частицы, падающей на рассеивающий центр, имеет вид

$$\mathbf{k}^{(0)} = (0, 0, 0, k), \quad k > 0.$$

Обозначим

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

волновой вектор "рассеянной" частицы. Мы изучаем упругое рассеяние, при котором сохраняется длина волнового вектора

$$\mathbf{k}^2 = k_t^2 - k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 = -k^2. \quad (4.1)$$

В 1926 г. Максом Борном была предложена приближенная формула для вычисления амплитуды рассеяния, основанная на стационарной теории возмущений. Релятивистский аналог этой формулы выглядит следующим образом

$$f = -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbf{K}} \psi_{\mathbf{k}^{(0)}}(\mathbf{s}) U(\mathbf{s}) \overline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{s})} dv(\mathbf{s}).$$

Конечно, даже в нерелятивистской теории формула Борна имеет ограниченную область применения. Она дает хороший результат лишь для быстро убывающих потенциалов. Однако, предполагая уникальность потенциала Кулона мы в работе [5] применили эту формулу к указанному потенциалу. Ниже мы процитируем и обсудим полученный в [5] результат.

Рассмотрим разность волновых векторов

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}^{(0)},$$

т.е. переданный импульс. Тогда формула Борна сводится к вычислению интеграла Фурье

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^4 \int_{\mathbf{K}} U(\mathbf{s}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{s}} dv(\mathbf{s}).$$

Напомним, что мы изучаем потенциал Кулона

$$U(\mathbf{s}) = -\frac{1}{\rho}, \quad \rho^2 = -\mathbf{s}^2, \quad \rho > 0.$$

Формула Борна дает зависимость амплитуды рассеяния f от волнового вектора \mathbf{k} . Другими словами, она определяет амплитуду рассеяния в импульсном представлении. Функция $\hat{U}(\mathbf{q})$ является нерегулярной обобщенной

функцией. Она имеет сингулярность на световом конусе. Ограничения этой функции на пространственноподобный конус и на времениподобные конусы суть регулярные обобщенные функции.

Если $\mathbf{q}^2 < 0$, то $\hat{U}(\mathbf{q}) = 0$. Это специфика кулоновского потенциала.

Если $\mathbf{q}^2 = q^2 > 0$, где $q > 0$, то

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{q^3}.$$

Носитель функции $f(\mathbf{k})$ устроен следующим образом. Уравнение (4.1) определяет в пространстве импульсов

$$\mathbf{Q}^* = \mathbb{R}^4 = \{\mathbf{k} = (k_t, k_x, k_y, k_z)\}$$

трехмерный однополостный гиперболоид $\mathbf{\Gamma}$. Условие

$$q^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{k}^{(0)})^2 = k_t^2 - k_x^2 - k_y^2 - (k_z - k)^2 > 0$$

вместе с уравнением (4.1) равносильно условию

$$k_z > k.$$

Это полупространство отсекает от гиперболоида $\mathbf{\Gamma}$ поверхность $\overset{\circ}{\mathbf{\Gamma}}$, на которой только и возможно рассеяние. На границе $\overset{\circ}{\mathbf{\Gamma}}$ функция f имеет сингулярную составляющую.

На поверхности $\overset{\circ}{\mathbf{\Gamma}}$ можно ввести следующие криволинейные координаты:

$$\begin{cases} k_z = k \operatorname{ch} \tau \\ k_t = \pm k \operatorname{sh} \tau \operatorname{ch} \theta \\ k_y = k \operatorname{sh} \tau \operatorname{sh} \theta \sin \varphi \\ k_x = k \operatorname{sh} \tau \operatorname{sh} \theta \cos \varphi, \end{cases} \quad \begin{cases} 0 \leq \tau < +\infty \\ 0 \leq \theta < +\infty \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{cases}$$

Гиперболические углы τ и θ будем называть углами рассеяния. Обозначим $d\omega$ нормированную меру Лебега на поверхности $\overset{\circ}{\mathbf{\Gamma}}$. В новых координатах она имеет вид

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

Далее,

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

или

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

Таким образом, для кулоновского потенциала амплитуда рассеяния зависит только от одного угла рассеяния. Дифференциальное сечение рассеяния равно

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

Эта формула аналогична формуле Резерфорда. Как и в нерелятивистском случае полное сечение рассеяния для кулоновского потенциала бесконечно

$$\sigma = \int_{\mathring{\Gamma}} d\sigma = +\infty.$$

Другими словами, рассеяние происходит преимущественно на малые углы.

Тот факт, что между векторами $\mathbf{k}^{(0)}$ и \mathbf{k} определен гиперболический угол, можно интерпретировать следующим образом. Если ось собственного времени частицы направить вдоль оси z , то рассеяние будет происходить в конусе абсолютно будущего, что согласуется с принципом причинности.

5. Рассеяние в цилиндре.

5.1.

Индефинитность метрики пространства Минковского требует разбиения всего конфигурационного пространства световым конусом на пространственноподобную и времениподобные области. С другой стороны, рассмотренная выше задача рассеяния нарушает центральную симметрию и вводит аксиальную симметрию относительно оси z . Формула Борна реагирует на это и требует дальнейшего разбиения пространства. А именно, необходимо рассмотреть пространственноподобный и времениподобные конусы в подпространстве, ортогональном оси z , и построить на них цилиндры с образующей, параллельной этой оси.

Введем соответствующие обозначения. Рассмотрим пространственноподобный конический цилиндр

$$C = \{\mathbf{s} \in Q : x^2 + y^2 - t^2 > 0\},$$

два времениподобных конических цилиндра, а именно, цилиндр абсолютно будущего

$$C_+ = \{\mathbf{s} \in Q : t^2 - x^2 - y^2 > 0, t > 0\}$$

и цилиндр абсолютно прошедшего

$$C_- = \{\mathbf{s} \in Q : t^2 - x^2 - y^2 > 0, t < 0\},$$

а также световой конический цилиндр

$$C_0 = \{\mathbf{s} \in Q : t^2 - x^2 - y^2 = 0\}.$$

Пространственноподобный цилиндр лежит в пространственноподобном конусе

$$C \subset K.$$

В противоположность этому, времениподобные цилиндры пересекают этот конус по четырем областям

$$C_{\pm}^+ = C_{\pm} \cap K \cap \{z > 0\},$$

$$C_{\pm}^- = C_{\pm} \cap K \cap \{z < 0\}.$$

Результат предыдущего параграфа означает, что рассеяние возможно лишь в областях C_{\pm}^+ .

В то же время, более привычное представление о рассеянии имеет движение частицы в цилиндре C . В настоящем параграфе мы решим эту задачу также в борновском приближении. Частица по прежнему рассеивается на кулоновском потенциале $-1/\rho$, но теперь ей запрещено выходить за пределы цилиндра C .

5.2.

Амплитуду рассеяния вычисляем по формуле

$$f(\mathbf{k}) = -2\pi\hat{U}(\mathbf{q}),$$

где

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}^{(0)},$$

и

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^4 \int_{\mathbf{C}} \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{s}}}{\rho} dv(\mathbf{s}). \quad (5.1)$$

Интегрирование ведется по цилиндру \mathbf{C} .

Будем вычислять этот интеграл в цилиндрических координатах

$$\begin{cases} z = z \\ t = r \operatorname{sh} \tau \\ y = r \operatorname{ch} \tau \sin \varphi \\ x = r \operatorname{ch} \tau \cos \varphi, \end{cases} \quad \begin{cases} -\infty < z < +\infty \\ 0 \leq r < +\infty \\ -\infty < \tau < +\infty \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{cases} \quad (5.2)$$

Заметим, что

$$r^2 = x^2 + y^2 - t^2,$$

а также

$$\rho^2 = r^2 + z^2.$$

Элемент объема в цилиндрических координатах равен

$$dv(\mathbf{s}) = dz r^2 dr \operatorname{ch} \tau d\tau d\varphi.$$

Будем использовать обозначение

$$\mathbf{q} = (t', x', y', z').$$

Это – произвольный вектор пространства импульсов.

При вычислении интеграла (5.1) рассмотрим два случая: 1) вектор \mathbf{q} лежит в цилиндре \mathbf{C} , 2) он лежит вне этого цилиндра. Рассмотрим первый случай. В цилиндре $\mathbf{C} \subset \mathbf{Q}^*$ введем аналогичные (5.2) цилиндрические координаты. Тогда интеграл (5.1) примет вид

$$\begin{aligned} \hat{U}(\mathbf{q}) = & \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{+\infty} r^2 dr \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{ch} \tau d\tau \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \frac{1}{\sqrt{r^2 + z^2}} \cdot \\ & \cdot \exp\{izz' + irr'[-\operatorname{sh} \tau \operatorname{sh} \tau' + \operatorname{ch} \tau \operatorname{ch} \tau'(\sin \varphi \sin \varphi' + \cos \varphi \cos \varphi')]\}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

5.3.

Вычислим входящий в (5.3) интеграл по $d\varphi$, а именно:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \exp\{irr' \operatorname{ch} \tau \operatorname{ch} \tau' \cos(\varphi - \varphi')\}. \quad (5.4)$$

Этот интеграл не зависит от φ' . Для его вычисления воспользуемся формулой Бесселя:

$$2\pi J_n(\zeta) = i^{-n} \int_0^{2\pi} e^{i\zeta \cos \varphi} \cos(n\varphi) d\varphi, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \zeta \in \mathbb{C}.$$

Здесь $J_n(\zeta)$ – функции Бесселя первого рода. Все необходимые формулы из теории бesselевых функций можно найти в [6]. Полагая

$$\zeta = rr' \operatorname{ch} \tau \operatorname{ch} \tau'$$

и $n = 0$, получим, что интеграл (5.4) равен

$$2\pi J_0(\zeta).$$

Вычислим теперь входящий в (5.3) интеграл по $d\tau$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{ch} \tau d\tau \exp\{-irr' \operatorname{sh} \tau \operatorname{sh} \tau'\} J_0(rr' \operatorname{ch} \tau \operatorname{ch} \tau'). \quad (5.5)$$

Введем обозначения

$$\begin{cases} a = \eta \operatorname{ch} \tau' \\ b = \eta \operatorname{sh} \tau', \end{cases}$$

где $\eta = rr'$. Тогда интеграл (5.5) примет вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ib \operatorname{sh} \tau} J_0(a \operatorname{ch} \tau) \operatorname{ch} \tau d\tau = 2 \int_0^{+\infty} \cos(b \operatorname{sh} \tau) J_0(a \operatorname{ch} \tau) \operatorname{ch} \tau d\tau.$$

Сделаем замену переменной $t = \operatorname{sh} \tau$. Рассмотрим интеграл

$$\int_0^{\infty} \cos(bt) J_0(a\sqrt{t^2 + 1}) dt. \quad (5.6)$$

Для его вычисления применим формулу Сонина-Гегенбауера. Интеграл

$$\int_0^{\infty} J_{\mu}(bt) t^{\mu+1} \frac{J_{\nu}(a\sqrt{t^2 + z^2})}{(t^2 + z^2)^{\nu/2}} dt \quad (5.7)$$

либо равен нулю, если $b > a > 0$; либо равен

$$\frac{b^{\mu} z^{1+\mu-\nu}}{a^{\nu} (a^2 - b^2)^{\frac{1+\mu-\nu}{2}}} J_{\nu-\mu-1}(z\sqrt{a^2 - b^2}),$$

при $a > b > 0$. Здесь $z > 0$, $\operatorname{Re} \nu > \operatorname{Re} \mu > -1$. Положим в этой формуле $z = 1$, $\mu = -1/2$, $\nu = 0$. Тогда при $a > b > 0$ имеем

$$\int_0^\infty J_{-\frac{1}{2}}(bt) \sqrt{t} J_0(a\sqrt{t^2+1}) dt = \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{J_{-\frac{1}{2}}(\sqrt{a^2-b^2})}{(\sqrt{a^2-b^2})^{1/2}}.$$

Пусть без ограничения общности $\tau' > 0$. В нашем случае неравенство $a > b > 0$ выполняется. При этом

$$a^2 - b^2 = \eta^2.$$

Далее, справедлива формула

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

Поэтому интеграл (5.6) равен

$$\int_0^\infty \sqrt{\frac{\pi bt}{2}} J_{-\frac{1}{2}}(bt) J_0(a\sqrt{t^2+1}) dt = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{J_{-\frac{1}{2}}(\eta)}{\sqrt{\eta}} = \frac{\cos \eta}{\eta}.$$

Таким образом, получаем

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{\sqrt{r^2+z^2}} \frac{\cos rr'}{rr'} e^{izz'}. \quad (5.8)$$

5.4.

Вычислим входящий в (5.8) интеграл по dz :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{izz'}}{\sqrt{r^2+z^2}} dz. \quad (5.9)$$

Сделаем замену переменной $z = \xi r$ и введем обозначение $\lambda = rz'$. Тогда интеграл (5.9) будет равен

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\lambda\xi}}{\sqrt{\xi^2+1}} d\xi. \quad (5.10)$$

Пусть без ограничения общности $\lambda > 0$. Прodefормируем контур интегрирования в (5.10) на комплексной $\xi = x + iy$ - плоскости. (Во всех вспомогательных формулах используются локальные обозначения; здесь x, y не являются пространственными координатами.) Получим

$$2 \int_1^\infty \frac{e^{-\lambda y}}{\sqrt{y^2-1}} dy. \quad (5.11)$$

Для вычисления этого интеграла воспользуемся следующим интегральным представлением модифицированных функций Ганкеля (функций Макдональда)

$$\Gamma\left(\frac{1}{2} - \nu\right) K_\nu(\lambda) = \sqrt{\pi} \left(\frac{2}{\lambda}\right)^\nu \int_1^\infty e^{-\lambda y} (y^2 - 1)^{-\nu - \frac{1}{2}} dy,$$

где $\operatorname{Re} \lambda > 0$, $\operatorname{Re} \nu < \frac{1}{2}$. В частности, при $\nu = 0$ получаем

$$K_0(\lambda) = \int_1^\infty \frac{e^{-\lambda y}}{\sqrt{y^2 - 1}} dy.$$

Таким образом, интеграл (5.11) равен $2K_0(\lambda)$. Тем самым,

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty K_0(r|z'|) \frac{\cos(rr')}{rr'} r^2 dr. \quad (5.12)$$

5.5.

Сделаем в интеграле (5.12) замену переменной $x = r|z'|$ и введем обозначение $\lambda = r'/|z'|$. Тогда получим

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{r'} \frac{1}{|z'|^2} \int_0^\infty K_0(x) \cos(\lambda x) x dx.$$

Хорошо известно преобразование Лапласа функции Макдональда

$$F(p) = \int_0^\infty K_0(x) e^{-px} dx = \frac{\log(p + \sqrt{p^2 - 1})}{\sqrt{p^2 - 1}}.$$

Формула справедлива в полуплоскости $\operatorname{Re} p > -1$. Ветви многозначных функций выделяются условиями

$$\sqrt{p^2 - 1} \sim p, \quad \log(p + \sqrt{p^2 - 1}) \sim \log p,$$

при $p \rightarrow \infty$ (главные ветви). Дифференцируя по параметру получаем

$$\begin{aligned} \int_0^\infty K_0(x) e^{-px} x dx &= -F'(p) = \\ &= \frac{p}{(p^2 - 1)^{3/2}} \log(p + \sqrt{p^2 - 1}) - \frac{1}{p^2 - 1}. \end{aligned}$$

Полагая $p = i\lambda$, где $\lambda > 0$, будем иметь

$$\int_0^\infty K_0(x) e^{-i\lambda x} x dx = -\frac{\lambda}{(\lambda^2 + 1)^{3/2}} \log(i\lambda + i\sqrt{\lambda^2 + 1}) + \frac{1}{\lambda^2 + 1}.$$

Выделяя вещественную часть находим

$$\int_0^{\infty} K_0(x) \cos(\lambda x) x dx = \frac{1}{\lambda^2 + 1} - \frac{\lambda}{(\lambda^2 + 1)^{3/2}} \log(\lambda + \sqrt{\lambda^2 + 1}).$$

Таким образом,

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{1}{r'(r'^2 + z'^2)} - \frac{\log\left(\frac{r' + \sqrt{r'^2 + z'^2}}{|z'|}\right)}{(r'^2 + z'^2)^{3/2}} \right\}. \quad (5.13)$$

5.6.

Мы вычислили интеграл (5.1) для векторов $\mathbf{q} \in \mathbf{C}$. Рассмотрим второй случай, когда вектор \mathbf{q} лежит вне цилиндра \mathbf{C} . Пусть, например, $\mathbf{q} \in \mathbf{C}_+$. Введем в этом цилиндре свои цилиндрические координаты:

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

Тогда интеграл (5.1) примет вид

$$\hat{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_0^{\infty} r^2 dr \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{ch} \tau d\tau \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{\sqrt{r^2 + z^2}} \exp\{iz z' + irr'[-\operatorname{sh} \tau \operatorname{ch} \tau' + \operatorname{ch} \tau \operatorname{sh} \tau'(\sin \varphi \sin \varphi' + \cos \varphi \cos \varphi')]\}. \quad (5.14)$$

Интегрирование по углу φ , как и выше, дает

$$2\pi J_0(rr' \operatorname{ch} \tau \operatorname{sh} \tau').$$

Вычислим входящий в (5.14) интеграл по $d\tau$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{ch} \tau d\tau \exp\{-irr' \operatorname{sh} \tau \operatorname{ch} \tau'\} J_0(rr' \operatorname{ch} \tau \operatorname{sh} \tau'). \quad (5.15)$$

Используем обозначения

$$\begin{cases} a = \eta \operatorname{sh} \tau' \\ b = \eta \operatorname{ch} \tau', \end{cases}$$

где $\eta = rr'$. Тогда интеграл (5.15) запишется в виде

$$2 \int_0^{\infty} \cos(b \operatorname{sh} \tau) J_0(a \operatorname{ch} \tau) \operatorname{ch} \tau d\tau.$$

После замены $t = \operatorname{sh} \tau$ мы снова приходим к интегралу Сони́на-Гегенбауэра (5.7). Но теперь выполняется неравенство $b > |a|$. Следовательно, этот интеграл равен нулю.

5.7.

Нами доказано

Предложение 5.1. *Преобразование Фурье кулоновского потенциала, ограниченного пространственноподобным цилиндром, имеет носитель в пространственноподобном цилиндре и вычисляется по формуле (5.13).*

Замечание. Функция $\hat{U}(\mathbf{q})$ имеет сингулярность на световом цилиндре. Вспомним, что выполняется условие

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 - k_t^2 = k^2, \quad (5.16)$$

которое определяет трехмерный однополостный гиперboloид Γ . Далее,

$$\mathbf{q} = (k_t, k_x, k_y, k_z - k).$$

Условие $\mathbf{q} \in \mathcal{C}$ означает, что

$$k_x^2 + k_y^2 - k_t^2 > 0. \quad (5.17)$$

Таким образом, рассеяние возможно лишь на векторах

$$\mathbf{k} \in \tilde{\Gamma} = \Gamma \cap \mathcal{C}.$$

Из (5.16) и (5.17) вытекает, что

$$|k_z| < k. \quad (5.18)$$

Следовательно, $\tilde{\Gamma}$ – это часть гиперboloида Γ , ограниченная двумя плоскостями $k_z = \pm k$. Условие (5.18) позволяет ввести между векторами $\mathbf{k}^{(0)}$ и \mathbf{k} сферический угол θ . Точнее, введем на поверхности $\tilde{\Gamma}$ следующие координаты

$$\begin{cases} k_z = k \cos \theta \\ k_t = k \sin \theta \operatorname{sh} \tau \\ k_y = k \sin \theta \operatorname{ch} \tau \sin \varphi \\ k_x = k \sin \theta \operatorname{ch} \tau \cos \varphi, \end{cases} \quad \begin{cases} 0 \leq \theta \leq \pi \\ -\infty < \tau < +\infty \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{cases}$$

Нормированная мера Лебега на поверхности $\tilde{\Gamma}$ в этих координатах имеет вид

$$d\omega = \sin^2 \theta d\theta \operatorname{ch} \tau d\tau d\varphi.$$

Сферический угол θ и гиперболический угол τ будем называть углами рассеяния. Далее, имеем

$$\begin{aligned} r' &= \sqrt{k_x^2 + k_y^2 - k_t^2} = k \sin \theta \\ \rho' &= \sqrt{r'^2 + (k_z - k)^2} = 2k \sin \frac{\theta}{2}. \end{aligned}$$

Тогда из предложения 5.1 получаем следующий результат.

Теорема 5.1. Амплитуда рассеяния на кулоновском потенциале в пространственноподобном цилиндре в борновском приближении равна

$$f(\theta) = \frac{\sec \frac{\theta}{2} - \log \operatorname{ctg} \frac{\theta}{4}}{2k^3 \sin^3 \frac{\theta}{2}}.$$

Полное сечение рассеяния бесконечно

$$\int_{\tilde{\Gamma}} |f|^2 d\omega = +\infty.$$

Рассеяние происходит преимущественно на малые углы. Амплитуда рассеяния зависит только от одного угла рассеяния θ . При малых углах θ можно пользоваться приближенной формулой

$$f(\theta) \sim \frac{\log \theta}{2k^3 \sin^3 \frac{\theta}{2}}, \quad \theta \rightarrow 0.$$

6. Параболические координаты.

В этом параграфе мы найдем волновую функцию рассеяния в пространственноподобном цилиндре и сравним полученный результат с борновским приближением.

Введем в цилиндре \mathcal{C} параболические координаты

$$\begin{cases} z = \frac{1}{2}(\xi - \eta) \\ t = \sqrt{\xi\eta} \operatorname{sh} \tau \\ y = \sqrt{\xi\eta} \operatorname{ch} \tau \sin \varphi \\ x = \sqrt{\xi\eta} \operatorname{ch} \tau \cos \varphi, \end{cases} \quad \begin{cases} 0 \leq \xi < +\infty \\ 0 \leq \eta < +\infty \\ -\infty < \tau < +\infty \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{cases}$$

Первая квадратичная форма пространства Минковского в этих координатах имеет вид

$$ds^2 = -\frac{\xi + \eta}{4\xi} d\xi^2 - \frac{\xi + \eta}{4\eta} d\eta^2 + \xi\eta d\tau^2 - \xi\eta \operatorname{ch}^2 \tau d\varphi^2.$$

Элемент объема равен

$$dv = \frac{\xi + \eta}{4} \sqrt{\xi\eta} d\xi d\eta \operatorname{ch} \tau d\tau d\varphi.$$

Величина

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2 - t^2}$$

равна

$$\rho = \frac{1}{2}(\xi + \eta).$$

Запишем оператор Даламбера в параболических координатах

$$\square = -(\nabla_\xi^2 + \nabla_\eta^2) + \frac{1}{\xi\eta} (\nabla_\tau^2 - \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \tau} \nabla_\varphi^2),$$

где

$$\begin{aligned} \nabla_\varphi^2 &= \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \\ \nabla_\tau^2 &= \frac{1}{\operatorname{ch} \tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \operatorname{ch} \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \\ \nabla_\xi^2 &= \frac{4}{\xi + \eta} \frac{1}{\sqrt{\xi}} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \sqrt{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \nabla_\eta^2 &= \frac{4}{\xi + \eta} \frac{1}{\sqrt{\eta}} \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \sqrt{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta}. \end{aligned}$$

Будем решать уравнение Шредингера

$$\left(\square - \frac{2}{\rho} \right) \psi = k^2 \psi, \quad k > 0,$$

методом разделения переменных в параболических координатах

$$\psi = \Xi(\xi) \mathbb{H}(\eta) \mathbb{T}(\tau) \Phi(\varphi).$$

Получим систему уравнений

$$\nabla_\varphi^2 \Phi + m^2 \Phi = 0 \tag{6.1}$$

$$\nabla_\tau^2 \mathbb{T} + \frac{m^2}{\operatorname{ch}^2 \tau} \mathbb{T} = \lambda \mathbb{T} \tag{6.2}$$

$$\frac{\xi + \eta}{4} \nabla_\xi^2 \Xi + \left(\frac{k^2}{4} \xi - \frac{\lambda}{4} \frac{1}{\xi} \right) \Xi = \beta_\xi \Xi \tag{6.3}$$

$$\frac{\xi + \eta}{4} \nabla_\eta^2 \mathbb{H} + \left(\frac{k^2}{4} \eta - \frac{\lambda}{4} \frac{1}{\eta} \right) \mathbb{H} = \beta_\eta \mathbb{H}, \tag{6.4}$$

где $m, \lambda, \beta_\xi, \beta_\eta$ – постоянные разделения. При этом выполняется соотношение

$$\beta_\xi + \beta_\eta = -1.$$

Предполагая, что волновая функция рассеяния не зависит от углов φ и τ , получаем

$$\begin{aligned} \Phi &= 1, & m &= 0, \\ \Gamma &= 1, & \lambda &= 0. \end{aligned}$$

Функция

$$\Xi(\xi) = e^{\frac{ik\xi}{2}}$$

удовлетворяет соответствующему уравнению с постоянной

$$\beta_\xi = \frac{3ik}{4}.$$

Функцию $H(\eta)$ ищем в виде

$$H(\eta) = e^{-\frac{ik\eta}{2}} w(\eta).$$

Тогда получим уравнение

$$\eta w'' + \left(\frac{3}{2} - ik\eta\right) w' + w = 0.$$

Полагая $x = ik\eta$, а также $w(\eta) = u(x)$, будем иметь

$$xu'' + \left(\frac{3}{2} - x\right)u' - \frac{i}{k}u = 0. \quad (6.5)$$

Вырожденным гипергеометрическим уравнением называется уравнение вида

$$zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0,$$

где α и γ – произвольные комплексные параметры. Пусть $\alpha, \gamma \neq 0, -1, -2, \dots$. Голоморфное в нуле решение этого уравнения называется вырожденной гипергеометрической функцией

$$F(\alpha, \gamma; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n}{(\gamma)_n} \frac{z^n}{n!}, \quad (6.6)$$

где

$$(p)_n = p(p+1) \dots (p+n-1)$$

символ Похгаммера. В уравнении (6.5) $\alpha = \frac{i}{k}$, $\gamma = \frac{3}{2}$. Таким образом, волновая функция рассеяния имеет вид

$$\psi = C e^{\frac{ik}{2}(\xi-\eta)} F\left(\frac{i}{k}, \frac{3}{2}; ik\eta\right),$$

где C – нормировочная постоянная. Хорошо известно асимптотическое разложение при $z \rightarrow \infty$ функции (6.6):

$$F(\alpha, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-z)^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_n (\alpha - \gamma + 1)_n}{n! (-z)^n} + \\ + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha - \gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\gamma - \alpha)_n (1 - \alpha)_n}{n! z^n}.$$

Мы видим, что эта асимптотика не согласуется с поставленной в §3 задачей рассеяния. Тем не менее, определим амплитуду рассеяния выделяя лишь главные члены в каждом слагаемом. Имеем

$$\psi \approx C e^{ikz} \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{3}{2} - \frac{i}{k})} \exp\left\{-\frac{i}{k} \log(k\eta)\right\} e^{-\frac{\pi}{2k}} + \\ + C \frac{e^{ik\rho}}{(k\eta)^{3/2}} \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{i}{k})} \exp\left\{\frac{i}{k} \log(k\eta)\right\} e^{-\frac{\pi}{2k}} e^{-\frac{3\pi i}{4}}.$$

Положим

$$C = \frac{\Gamma(\frac{3}{2} - \frac{i}{k})}{\Gamma(\frac{3}{2})} e^{\frac{\pi}{2k}}.$$

Введем сферический угол θ такой, что $z = \rho \cos \theta$. Получим

$$\psi \approx e^{ikz} \exp\left\{-\frac{i}{k} \log(k\rho(1 - \cos \theta))\right\} + \\ + \frac{e^{ik\rho}}{(k\rho(1 - \cos \theta))^{3/2}} \frac{\Gamma(\frac{3}{2} - \frac{i}{k})}{\Gamma(\frac{i}{k})} \exp\left\{\frac{i}{k} \log(k\rho(1 - \cos \theta)) - \frac{3\pi i}{4}\right\}.$$

Не учитывая в этой формуле медленно меняющуюся фазу будем иметь

Предложение 6.1. Амплитуда рассеяния для кулоновского потенциала в пространственноподобном цилиндре имеет вид

$$f(\theta) = \frac{\Gamma(\frac{3}{2} - \frac{i}{k})}{\Gamma(\frac{i}{k})} \frac{1}{(2k \sin^2 \frac{\theta}{2})^{3/2}}.$$

Вычислим квадрат модуля амплитуды рассеяния. Имеем

$$\begin{aligned} \left| \Gamma\left(\frac{3}{2} - \frac{i}{k}\right) \right|^2 &= \Gamma\left(\frac{3}{2} - \frac{i}{k}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2} + \frac{i}{k}\right) = \\ &= \left(\frac{1}{2} - \frac{i}{k}\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{i}{k}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{i}{k}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{i}{k}\right) = \\ &= \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{k^2}\right) \frac{\pi}{\sin \pi\left(\frac{1}{2} - \frac{i}{k}\right)} = \frac{k^2 + 4}{4k^2} \frac{\pi}{\operatorname{ch} \frac{\pi}{k}}. \end{aligned}$$

Аналогично,

$$\left| \Gamma\left(\frac{i}{k}\right) \right|^2 = \Gamma\left(\frac{i}{k}\right) \Gamma\left(-\frac{i}{k}\right) = \frac{\Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) \Gamma\left(-\frac{i}{k}\right)}{\left(\frac{i}{k}\right)} = \frac{1}{i/k} \frac{\pi}{\sin\left(-\frac{\pi i}{k}\right)} = \frac{\pi k}{\operatorname{sh} \frac{\pi}{k}}.$$

Окончательно,

$$|f(\theta)|^2 = \frac{k^2 + 4}{4k^3} \operatorname{th} \frac{\pi}{k} \frac{1}{8k^3 \sin^6 \frac{\theta}{2}}.$$

Для медленных электронов, т.е. при $k \rightarrow 0$, приближенно имеем

$$|f(\theta)|^2 \approx \frac{\pi}{8k^6 \sin^6 \frac{\theta}{2}}. \quad (6.7)$$

Полученное в §5 борновское приближение отличается от (6.7) логарифмическим множителем.

7. Цилиндрический атом.

7.1.

Рассмотрим движение электрона в поле кулоновского потенциала, ограниченного пространственноподобным цилиндром \mathcal{C} . Будем искать связанные состояния системы, т.е. волновые функции, принадлежащие гильбертову пространству $L_2(\mathcal{C})$. Эту модель назовем цилиндрическим атомом. Волновые функции нормируем условием

$$\int_{\mathcal{C}} |\psi|^2 dv = 1.$$

Тогда $|\psi|^2$ будет плотностью вероятности нахождения электрона в данной точке цилиндра \mathcal{C} , другими словами, плотностью заряда электронного облака.

Применим метод разделения переменных в параболических координатах. Получим систему уравнений (6.1) – (6.4) с $k^2 = E$. Решения уравнения

(6.1) имеют физический смысл для целых значений постоянной разделения m . Это – 2π - периодические решения, а именно:

$$\Phi_m(\varphi) = C_m^\Phi e^{im\varphi}, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (7.1)$$

где C_m^Φ – нормировочные постоянные. Они находятся из условия

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m|^2 d\varphi = 1,$$

и следовательно равны

$$C_m^\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \quad (7.2)$$

7.2.

Рассмотрим уравнение (6.2). Сделаем подстановку

$$T(\tau) = \frac{\tilde{T}(\tau)}{\sqrt{\operatorname{ch} \tau}}$$

и введем обозначение

$$\nu^2 = \lambda + \frac{1}{4}, \quad \nu > 0.$$

Придем к уравнению

$$-\tilde{T}'' - \frac{m^2 - 1/4}{\operatorname{ch}^2 \tau} \tilde{T} = -\nu^2 \tilde{T}. \quad (7.3)$$

Это уравнение имеет вид одномерного уравнения Шредингера с эффективным потенциалом Пешля-Теллера. Известно [7], что дискретный спектр уравнения лежит в области отрицательных значений энергии: $-\nu^2 < 0$, и состоит из конечного числа уровней

$$\nu = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, |m| - \frac{1}{2}.$$

В частности, при $m = 0$ связанных состояний нет. Соответствующие волновые функции с точностью до нормировки определяются формулой

$$\tilde{T}_{\nu,m}(\tau) = \frac{1}{(\operatorname{ch} \tau)^\nu} \sum_{k=0}^{m-\frac{1}{2}-\nu} \frac{(\nu - m + \frac{1}{2})_k (\nu + m + \frac{1}{2})_k}{(\nu + 1)_k k!} \frac{1}{(e^{2\tau} + 1)^k}.$$

Здесь, без ограничения общности, $m > 0$.

Докажем справедливость этой формулы, установим ее связь с многочленами Якоби и вычислим нормировочные постоянные. Будем искать решения уравнения (7.3) в виде

$$\tilde{T}(\tau) = \frac{Q(y)}{(\operatorname{ch} \tau)^\nu}, \quad y = \frac{1}{e^{2\tau} + 1}.$$

Получим уравнение

$$y(1-y)Q'' + (1+\nu)(1-2y)Q' + \varkappa Q = 0,$$

где

$$\varkappa = m^2 - \frac{1}{4} - \nu(\nu + 1).$$

Сделаем подстановку

$$Q(y) = P(x), \quad x = 1 - 2y \quad x = \operatorname{th} \tau.$$

Будем иметь

$$(1-x^2)P'' - 2(1+\nu)xP' + \varkappa P = 0. \quad (7.4)$$

Это гипергеометрическое уравнение имеет полиномиальные решения, тогда и только тогда, когда

$$\varkappa = k(k + 2\nu + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Следовательно,

$$\nu = m - k - \frac{1}{2}.$$

Решениями служат многочлены Якоби $P_k^{(\nu, \nu)}$. Это – многочлены степени k , удовлетворяющие следующим соотношениям ортогональности

$$\int_{-1}^{+1} P_k^{(\nu, \nu)}(x) x^\mu (1-x^2)^\nu dx = 0, \quad \mu = 0, \dots, k-1.$$

В стандартизованной форме они могут быть определены формулой Родрига

$$P_k^{(\nu, \nu)}(x)(1-x^2)^\nu = \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx} \right)^k \left\{ (1-x^2)^{\nu+k} \right\}.$$

Окончательно,

$$\Gamma_{\nu, m}(\tau) = C_{\nu, m}^{\Gamma} \frac{P_{m-\nu-1/2}^{(\nu, \nu)}(\operatorname{th} \tau)}{(\operatorname{ch} \tau)^{\nu+1/2}}. \quad (7.5)$$

Нормировочная постоянная определяется из условия

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Gamma_{\nu, m}(\tau)|^2 \operatorname{ch} \tau d\tau = 1.$$

Неполиномиальные решения уравнения (7.4) приводят к расходящемуся интегралу.

7.3.

Справедлива

Лемма 7.1. Нормировочная постоянная $C_{\nu,m}^T$ вычисляется по формуле

$$C_{\nu,m}^T = \left\{ 2^{2k+2\nu} \frac{(\nu+1)_k}{k!} B(\nu, k+\nu+1) \right\}^{-\frac{1}{2}}, \quad (7.6)$$

где $k = m - \nu - 1/2$.

Доказательство. Вычислим интеграл

$$\mathcal{J} = \int_{-\infty}^{+\infty} |P(\operatorname{th} \tau)|^2 \frac{d\tau}{(\operatorname{ch} \tau)^{2\nu}},$$

где $P = P_k^{(\nu,\nu)}$. Сделаем подстановку $x = \operatorname{th} \tau$. Получим

$$\mathcal{J} = \int_{-1}^{+1} |P(x)|^2 (1-x^2)^{\nu-1} dx.$$

Запишем

$$P(x) = A(x)(1-x^2) + B(x),$$

где A и B – многочлены, причем $\deg B \leq 1$. Если k – четное, то $B(x) = b$ – некоторая константа; если k – нечетное, то $B(x) = bx$. В обоих случаях $b = P(1)$. Из формулы Родрига следует, что

$$P(x) = \frac{(\nu+1)_k}{k!} (1+x)^k + O(1-x), \quad x \rightarrow 1.$$

Таким образом

$$b = \frac{(\nu+1)_k}{k!} 2^k.$$

Вначале рассмотрим случай $\nu \geq 3/2$. Пусть k – четное. Тогда

$$\mathcal{J} = \int_{-1}^{+1} \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx} \right)^k \left\{ (1-x^2)^{\nu+k} \right\} \frac{b}{2} \left\{ \frac{1}{1-x} + \frac{1}{1+x} \right\} dx.$$

Интегрируя по частям получим

$$\mathcal{J} = \frac{b}{2} \int_{-1}^{+1} (1-x^2)^{\nu+k} \left\{ \frac{1}{(1-x)^{k+1}} + \frac{1}{(1+x)^{k+1}} \right\} dx$$

или

$$\mathcal{J} = b \int_{-1}^{+1} (1-x)^{\nu-1} (1+x)^{\nu+k} dx.$$

Сделаем подстановку $x = 2y - 1$. Получим

$$\mathcal{J} = b \cdot 2^{k+2\nu} \cdot \int_0^1 (1-y)^{\nu-1} y^{\nu+k} dy$$

или

$$\mathcal{J} = b \cdot 2^{k+2\nu} \cdot B(\nu, k + \nu + 1).$$

Для нечетных k аналогичные вычисления приводят к тому же результату. Таким образом, при $\nu \geq 3/2$ лемма доказана.

При $\nu = 1/2$ получаем многочлены Чебышева второго рода. Из формулы Родрига следует, что старший коэффициент стандартизованного многочлена равен

$$(-1)^k \frac{(k+2)_k}{k!}.$$

С другой стороны, эти многочлены могут быть записаны в тригонометрической форме, как

$$\frac{\sin(k+1)\varphi}{\sin \varphi}, \quad x = \cos \varphi,$$

со старшим коэффициентом 2^k . Таким образом,

$$P_k^{(1/2, 1/2)}(x) = A_k \frac{\sin(k+1)\varphi}{\sin \varphi},$$

где

$$A_k = (-1)^k \frac{(k+2)_k}{k! 2^k}.$$

Тогда

$$\mathcal{J} = A_k^2 \tilde{\mathcal{J}},$$

где

$$\tilde{\mathcal{J}} = \int_0^\pi \left(\frac{\sin(k+1)\varphi}{\sin \varphi} \right)^2 d\varphi$$

или

$$\tilde{\mathcal{J}} = \int_0^{2\pi} \frac{2 - e^{i(k+1)\varphi} - e^{-i(k+1)\varphi}}{2 - e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}} \frac{d\varphi}{2}.$$

Делая подстановку $z = e^{i\varphi}$ получим

$$\tilde{\mathcal{J}} = \frac{1}{2i} \oint_{|z|=1} \left(\frac{z^{k+1} - 1}{z - 1} \right)^2 \frac{dz}{z^{k+1}}.$$

Поскольку

$$\operatorname{res}_{z=0} \left\{ \frac{(1 + z + \dots + z^k)^2}{z^{k+1}} \right\} = k + 1,$$

то

$$\tilde{\mathcal{J}} = (k + 1)\pi.$$

Откуда следует формула (7.6) при $\nu = 1/2$.

Лемма доказана.

7.4.

Рассмотрим уравнение (6.3):

$$\frac{1}{\sqrt{\xi}} \frac{\partial}{\partial \xi} \xi^{3/2} \frac{\partial}{\partial \xi} \Xi + \left(\frac{E}{4} \xi - \frac{\lambda}{4} \frac{1}{\xi} \right) = \beta_\xi \Xi,$$

где $\lambda = \nu^2 - 1/4$. Введем обозначение

$$E = -\frac{1}{n^2}, \quad n > 0.$$

Сделаем подстановку

$$\Xi(\xi) = f(x), \quad x = \frac{\xi}{n}.$$

Получим

$$\frac{1}{\sqrt{x}} \frac{\partial}{\partial x} x^{3/2} \frac{\partial}{\partial x} f(x) - \frac{1}{4} \left(x + \frac{\lambda}{x} \right) f(x) = n\beta_\xi f(x)$$

или

$$x f'' + \frac{3}{2} f' - \frac{1}{4} \left(x + \frac{\lambda}{x} \right) f = n\beta_\xi f.$$

Будем искать решения в виде

$$f(x) = e^{-\frac{x}{2}} w(x).$$

Получим

$$x w'' - \left(x - \frac{3}{2} \right) w' - \frac{\lambda}{4x} w = \left(n\beta_\xi + \frac{3}{4} \right) w.$$

При $x \rightarrow 0$ одно из решений ведет себя, как

$$w(x) \approx x^\alpha, \quad \alpha = \frac{\nu}{2} - \frac{1}{4}.$$

Поэтому полагаем

$$w(x) = x^\alpha u(x).$$

Тогда получим

$$x u'' + (\nu + 1 - x) u' - \left(\frac{\nu + 1}{2} + n\beta_\xi \right) u = 0.$$

Вырожденное гипергеометрической уравнение

$$xu'' + (b - x)u' - au = 0$$

имеет полиномиальные решения при

$$a = -k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (7.7)$$

Тогда u – многочлен степени k , а именно, обобщенный многочлен Лагерра

$$u(x) = L_k^{(b-1)}(x).$$

Условие (7.7) означает, что

$$k = n_\xi = -\left(\frac{\nu + 1}{2} + n\beta_\xi\right), \quad (7.8)$$

при этом $u = L_k^{(\nu)}$.

Многочлены Лагерра удовлетворяют следующим соотношениям ортогональности

$$\int_0^\infty L_k^{(\nu)}(x) x^\mu \cdot x^\nu e^{-x} dx = 0, \quad \mu = 0, \dots, k - 1.$$

Стандартизованные многочлены Лагерра можно определить формулой Родрига

$$L_k^{(\nu)}(x) x^\nu e^{-x} = \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx}\right)^k \left\{ x^{\nu+k} e^{-x} \right\}.$$

Окончательно,

$$\Xi_{n_\xi, \nu}(\xi) = f\left(\frac{\xi}{n}\right), \quad (7.9)$$

где

$$n = \frac{1}{\sqrt{-E}},$$

и

$$f(x) = x^{\frac{\nu}{2} - \frac{1}{4}} e^{-\frac{x}{2}} L_{n_\xi}^{(\nu)}(x). \quad (7.10)$$

При этом квантовые числа (7.8) принимают целые неотрицательные значения.

Аналогично,

$$\mathbb{H}_{n_\eta, \nu}(\eta) = g\left(\frac{\eta}{n}\right), \quad (7.11)$$

где

$$g(y) = y^{\frac{\nu}{2} - \frac{1}{4}} e^{-\frac{y}{2}} L_{n_\eta}^{(\nu)}(y). \quad (7.12)$$

Квантовое число

$$n_\eta = -\left(\frac{\nu + 1}{2} + n\beta_\eta\right)$$

принимает целые неотрицательные значения.

Из соотношения $\beta_\xi + \beta_\eta = -1$ следует, что

$$n_\xi + n_\eta = n - \nu - 1.$$

Обозначим

$$R_{n_\xi, n_\eta, \nu} = C_{n_\xi, n_\eta, \nu}^R \Xi_{n_\xi, \nu} \mathbf{H}_{n_\eta, \nu}. \quad (7.13)$$

Нормировочная постоянная находится из условия

$$\iint\limits_0^\infty |R_{n_\xi, n_\eta, \nu}(\xi, \eta)|^2 \frac{\xi + \eta}{4} \sqrt{\xi\eta} d\xi d\eta = 1.$$

7.5.

Справедлива

Лемма 7.2. Нормировочная постоянная $C_{n_\xi, n_\eta, \nu}^R$ вычисляется по формуле

$$C_{n_\xi, n_\eta, \nu}^R = \left\{ \frac{n^5}{2} \frac{\Gamma(n_\xi + \nu + 1)}{n_\xi!} \frac{\Gamma(n_\eta + \nu + 1)}{n_\eta!} \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (7.14)$$

Доказательство. Вычислим интеграл

$$\mathcal{J} = \iint\limits_0^\infty \left| \left(\frac{\xi}{n}\right)^{\frac{\nu}{2}-\frac{1}{4}} \left(\frac{\eta}{n}\right)^{\frac{\nu}{2}-\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi}{2n}} e^{-\frac{\eta}{2n}} L_{n_\xi}^{(\nu)}\left(\frac{\xi}{n}\right) L_{n_\eta}^{(\nu)}\left(\frac{\eta}{n}\right) \right|^2 \frac{\xi + \eta}{4} \sqrt{\xi\eta} d\xi d\eta$$

или

$$\mathcal{J} = \frac{n^4}{4} \iint\limits_0^\infty x^{\nu-1/2} y^{\nu-1/2} e^{-x} e^{-y} |L_{n_\xi}^{(\nu)}(x)|^2 |L_{n_\eta}^{(\nu)}(y)|^2 (x + y) \sqrt{xy} dx dy.$$

Введем обозначения

$$\alpha_k = \int_0^\infty x^{\nu-1/2} e^{-x} |L_k^{(\nu)}(x)|^2 x^{3/2} dx,$$

$$\beta_k = \int_0^\infty x^{\nu-1/2} e^{-x} |L_k^{(\nu)}(x)|^2 x^{1/2} dx.$$

Тогда

$$\mathcal{J} = \frac{n^4}{4} \{ \alpha_{n\xi} \beta_{n\eta} + \alpha_{n\eta} \beta_{n\xi} \}.$$

Введем следующие обозначения для коэффициентов многочлена Лагерра:

$$L_k^{(\nu)}(x) = \lambda_k x^k + \lambda'_k x^{k-1} + \dots$$

Тогда

$$\begin{aligned} \beta_k &= \int_0^\infty L_k^{(\nu)}(x) \cdot \lambda_k x^k \cdot x^\nu e^{-x} dx, \\ \alpha_k &= \int_0^\infty L_k^{(\nu)}(x) \cdot \{ \lambda_k x^{k+1} + \lambda'_k x^k \} \cdot x^\nu e^{-x} dx. \end{aligned}$$

Из формулы Родрига следует, что

$$\lambda_k = \frac{(-1)^k}{k!}, \quad \lambda'_k = \frac{(-1)^{k-1}}{(k-1)!} (\nu + k).$$

Вычислим интеграл

$$b_k = \int_0^\infty L_k^{(\nu)}(x) \cdot x^k \cdot x^\nu e^{-x} dx.$$

Интегрируя по частям получим

$$\begin{aligned} b_k &= \int_0^\infty \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx} \right)^k \left\{ x^{k+\nu} e^{-x} \right\} \cdot x^k \cdot dx = \\ &= (-1)^k \int_0^\infty x^{k+\nu} e^{-x} dx = (-1)^k \Gamma(k + \nu + 1). \end{aligned}$$

Вычислим интеграл

$$a_k = \int_0^\infty L_k^{(\nu)}(x) \cdot x^{k+1} \cdot x^\nu e^{-x} dx.$$

Интегрируя по частям получим

$$\begin{aligned} a_k &= \int_0^\infty \frac{1}{k!} \left(\frac{d}{dx} \right)^k \left\{ x^{k+\nu} e^{-x} \right\} \cdot x^{k+1} dx = \\ &= (-1)^k (k+1) \int_0^\infty x^{k+\nu+1} e^{-x} dx = (-1)^k (k+1) \Gamma(k + \nu + 2). \end{aligned}$$

Далее,

$$\beta_k = \lambda_k b_k = \frac{\Gamma(k + \nu + 1)}{k!},$$

и

$$\alpha_k = \lambda_k a_k + \lambda'_k b_k = (2k + \nu + 1) \frac{\Gamma(k + \nu + 1)}{k!}.$$

Откуда следует утверждение леммы.

7.6.

Итак, справедлива

Теорема 7.1.

1) Базис пространства связанных состояний цилиндрического атома составляют волновые функции $\psi_{n_\xi, n_\eta, \nu, m}$, зависящие от четырех квантовых чисел, а именно:

а) параболические квантовые числа n_ξ и n_η принимают любые целые неотрицательные значения

$$n_\xi, n_\eta = 0, 1, 2, \dots;$$

б) гиперболическое квантовое число ν принимает полуцелые значения

$$\nu = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - 1,$$

где главное квантовое число n также принимает полуцелые значения

$$n = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots,$$

при этом

$$n_\xi + n_\eta = n - \nu - 1; \quad (7.15)$$

с) магнитное квантовое число m принимает целые значения

$$\pm m = \nu + \frac{1}{2}, \nu + \frac{3}{2}, \dots$$

2) Волновым функциям, удовлетворяющим соотношению (7.15), соответствует один уровень энергии

$$E_n = -\frac{1}{n^2}.$$

Все уровни энергии имеют бесконечное вырождение.

3) В параболических координатах волновые функции имеют следующий вид

$$\psi_{n_\xi, n_\eta, \nu, m}(\xi, \eta, \tau, \varphi) = R_{n_\xi, n_\eta, \nu}(\xi, \eta) T_{\nu, m}(\tau) \Phi_m(\varphi),$$

где $R_{n_\xi, n_\eta, \nu}$ определена формулами (7.9 – 7.14), $T_{\nu, m}$ – формулами (7.5), (7.6), а Φ_m – (7.1), (7.2).

Следствие 7.1. Волновые функции основного невозбужденного состояния, соответствующие квантовым числам

$$n = \frac{3}{2}, \quad \nu = \frac{1}{2}, \quad n_\xi = n_\eta = 0, \quad m = \pm 1,$$

суть

$$\psi = \frac{8\sqrt{2}}{9\sqrt{3}} \frac{1}{\pi\sqrt{\pi}} \frac{e^{\pm i\varphi}}{\operatorname{ch} \tau} e^{-\frac{\xi+\eta}{3}}.$$

8. Сферические координаты

8.1.

В этом параграфе мы вычислим волновые функции цилиндрического атома в сферических координатах

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

Первая квадратичная форма пространства Минковского в этих координатах имеет вид

$$ds^2 = -d\rho^2 - \rho^2 d\theta^2 + \rho^2 \sin^2 \theta d\tau^2 - \rho^2 \sin^2 \theta \operatorname{ch}^2 \tau d\varphi^2.$$

Элемент объема равен

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

Запишем оператор Даламбера в сферических координатах

$$\square = -\nabla_{\rho}^2 - \frac{1}{\rho^2} \left[\nabla_{\theta}^2 - \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\nabla_{\tau}^2 - \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \tau} \nabla_{\varphi}^2 \right) \right],$$

где

$$\begin{aligned} \nabla_{\rho}^2 &= \frac{1}{\rho^3} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^3 \frac{\partial}{\partial \rho} \\ \nabla_{\theta}^2 &= \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \nabla_{\tau}^2 &= \frac{1}{\operatorname{ch} \tau} \frac{\partial}{\partial \tau} \operatorname{ch} \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \\ \nabla_{\varphi}^2 &= \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \end{aligned}$$

Применим метод разделения переменных

$$\psi = R(\rho)\Theta(\theta)T(\tau)\Phi(\varphi).$$

Получим систему уравнений

$$\nabla_{\varphi}^2 \Phi + m^2 \Phi = 0 \quad (8.1)$$

$$\nabla_{\tau}^2 \Gamma + \frac{m^2}{\text{ch}^2 \tau} \Gamma = \lambda \Gamma \quad (8.2)$$

$$-\nabla_{\theta}^2 \Theta + \frac{\lambda}{\sin^2 \theta} \Theta = \mu \Theta \quad (8.3)$$

$$-\nabla_{\rho}^2 R + \left\{ -\frac{2}{\rho} - E + \frac{\mu}{\rho^2} \right\} = 0, \quad (8.4)$$

где m, λ, μ – постоянные разделения. Уравнения (8.1) и (8.2) совпадают с уравнениями (6.1) и (6.2) соответственно. Решение уравнения (8.1) – $\Phi_m(\varphi)$ определено формулами (7.1), (7.2). Магнитное квантовое число m принимает целые значения

$$m = \pm 1, \pm 2, \dots$$

Решение уравнения (8.2) – $\Gamma_{\nu, m}(\tau)$ определено формулами (7.5), (7.6). Гиперболическое квантовое число ν принимает полуцелые значения

$$\nu = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, |m| - \frac{1}{2}.$$

При этом

$$\lambda = \nu^2 - \frac{1}{4}.$$

8.2.

Рассмотрим уравнение (8.3). При $\theta \rightarrow 0$ одно из решений ведет себя как

$$\Theta(\theta) \approx \theta^{\alpha}, \quad \alpha = \nu - 1/2.$$

Поэтому будем искать решение в виде

$$\Theta(\theta) = \sin^{\alpha} \theta y(\theta).$$

Тогда

$$y'' + 2(\alpha + 1) \text{ctg} \theta y' - (\alpha^2 + 2\alpha - \mu)y = 0.$$

Положим

$$y(\theta) = u(x), \quad x = \cos \theta.$$

Получим

$$(1 - x^2)u'' - 2(\nu + 1)xu' - (\nu^2 + \nu - 3/4 - \mu)u = 0.$$

Это гипергеометрическое уравнение имеет полиномиальные решения, когда

$$-(\nu^2 + \nu - 3/4 - \mu) = k(k + 2\nu + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Следовательно,

$$\mu = l(l + 2), \quad k = l - \nu + 1/2, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Решениями служат многочлены Якоби

$$u(x) = P_k^{(\nu, \nu)}(x).$$

Окончательно, получаем сферические функции

$$\Theta_{l, \nu}(\theta) = C_{l, \nu}^{\Theta} \sin^{\nu-1/2} \theta P_k^{(\nu, \nu)}(\cos \theta). \quad (8.5)$$

Нормировочный множитель определяется из условия

$$\int_0^{\pi} |\Theta_{l, \nu}(\theta)|^2 \sin^2 \theta d\theta = 1.$$

Лемма 8.1. Нормировочный множитель $C_{l, \nu}^{\Theta}$ вычисляется по формуле

$$C_{l, \nu}^{\Theta} = \left\{ \frac{(2\nu + k + 1)_k}{k!} B(\nu + k + 1, 1/2) \right\}^{-1/2}, \quad (8.6)$$

где $k = l - \nu + 1/2$.

Доказательство леммы проводится с помощью формулы Родрига также, как в §7.

8.3.

Рассмотрим уравнение (8.4), где $\mu = l(l + 2)$. Введем обозначение

$$E = -\frac{1}{n^2}, \quad n > 0,$$

и сделаем подстановку

$$R(\rho) = w(t), \quad t = \frac{\rho}{n}.$$

Получим

$$w'' + \frac{3}{t}w' + \left\{ \frac{2n}{t} - 1 - \frac{l(l + 2)}{t^2} \right\} w = 0.$$

При $t \rightarrow 0$ интегрируемое решение ведет себя, как

$$w(t) \approx t^l,$$

а при $t \rightarrow +\infty$, как

$$w(t) \approx e^{-t}.$$

Поэтому будем искать решение в виде

$$w(t) = t^l e^{-t} u(x), \quad x = 2t.$$

Получим вырожденное гипергеометрическое уравнение

$$xu'' + (2l + 3 - x)u' + \left(n - l - \frac{3}{2}\right)u = 0.$$

Оно имеет полиномиальные решения, когда радиальное квантовое число

$$k = n - l - \frac{3}{2}$$

принимает целые значения: $k = 0, 1, 2, \dots$, и тем самым, главное квантовое число n принимает полуцелые значения

$$n = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

Решением служит многочлен Лагерра

$$u(x) = L_k^{(2l+2)}(x).$$

Окончательно, получаем

$$R_{n,l}(\rho) = C_{n,l}^R \left(\frac{\rho}{n}\right)^l e^{-\frac{\rho}{n}} L_k^{(2l+2)}\left(\frac{2\rho}{n}\right). \quad (8.7)$$

Нормировочная постоянная находится из условия

$$\int_0^\infty |R_{n,l}(\rho)|^2 \rho^3 d\rho = 1.$$

Лемма 8.2. Нормировочная постоянная $C_{n,l}^R$ вычисляется по формуле

$$C_{n,l}^R = \left\{ \frac{n^5}{2^{2l+3}} \frac{\Gamma(k + 2l + 3)}{k!} \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (8.8)$$

8.4.

Таким образом, доказана

Теорема 8.1.

1) Базис пространства связанных состояний цилиндрического атома составляют волновые функции $\psi_{n,l,\nu,m}$, зависящие от четырех квантовых чисел, а именно:

a) главное квантовое число n принимает полуцелые значения

$$n = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots;$$

b) орбитальное квантовое число l принимает целые значения

$$l = 0, 1, \dots, n - \frac{3}{2};$$

c) гиперболическое квантовое число ν принимает полуцелые значения

$$\nu = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, l + \frac{1}{2};$$

d) магнитное квантовое число m принимает целые значения

$$\pm m = \nu + \frac{1}{2}, \nu + \frac{3}{2}, \dots$$

2) Уровни энергии определяются главным квантовым числом n по формуле

$$E_n = -\frac{1}{n^2}.$$

Все уровни энергии бесконечно вырождены.

3) Волновые функции связанных состояний имеют вид

$$\psi_{n,l,\nu,m} = R_{n,l} \Theta_{l,\nu} T_{\nu,m} \Phi_m,$$

где радиальные волновые функции $R_{n,l}$ определены формулами (8.7), (8.8); сферические функции $\Theta_{l,\nu}$ – формулами (8.5), (8.6); гиперболические функции $T_{\nu,m}$ – формулами (7.5), (7.6); а Φ_m – формулами (7.1), (7.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Dirac P.A.M. *Generalized Hamiltonian Dynamics* // Can. J. Math. 1950. V2. P.129 - 148.
Дирак П.А.М. *Принципы квантовой механики*. М. 1960.
- [2] Козлов В.В., Никишин Е.М. *Релятивистский вариант гамильтонова формализма и волновые функции водородоподобного атома*// Вестник Московского университета. Сер.1. Матем. Механ. 1986. N5. С.11-20.
- [3] Приходько М.А. *Асимптотика информационной энтропии для двумерного аналога релятивистского атома водорода в модели Козлова-Никишина*// Матем. заметки. 2005. Т.78, вып.5. С.727-744.
- [4] Приходько М.А. *Информационная энтропия релятивистской модели Козлова-Никишина*// Теоретическая и математическая физика. 2006.Т.148. N3. С.444-458.
- [5] Сорокин В.Н. *Упругие столкновения быстрых электронов с релятивистским атомом водорода*// Препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, 2006, N24. С.1-31.
- [6] Бейтмен Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции*. Т.2. М. Наука, 1965.
- [7] Флюге З. *Задачи по квантовой механике*. М. Наука. 1974.