Мы увидим в дальнейшем (§ 123), что это оставшееся вырождение снимается так называемыми радиационными поправками (*лэмбовский сдвиг*), не учитываемыми уравнением Дирака одноэлектронной задачи.

Забегая вперед, укажем уже здесь, что по порядку величины эти поправки $\sim mZ^4\alpha^5 \ln(1/\alpha)$. Поправка же второго порядка по спин-орбитальному взаимодействию была бы $\sim m(Z\alpha)^6$, так что ее отноение к радиационным поправкам $\sim Z^2\alpha/\ln(1/\alpha)$. Для водорода ($Z=1$) это отношение заведомо мало, и потому задача о точном решении уравнения Дирака в этом случае не имеет смысла. Эта задача, однако, может иметь смысл для уровней энергии электрона в поле ядра с большим Z (см. § 36).

§ 35. Движение в центрально-симметричном поле

Рассмотрим движение электрона в центрально-симметричном электрическом поле.

Поскольку при движении в центральном поле сохраняются момент и четность (относительно центра поля, выбранного в качестве начала координат), к угловой зависимости волновых функций такого движения относится все сказанное в § 24 по поводу сферических волн свободных частиц. Меняются лишь радиальные функции. Соответственно этому будем искать волновую функцию стационарных состояний (в стандартном представлении) в виде

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(r)\,\Omega_{jlm} \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} g(r)\,\Omega_{jl'm} \end{pmatrix}, \tag{35,1}$$

где $l = j \pm {}^1/_2$, $l' = 2j - l$, а степень -1 введена для упрощения последующих формул.

Уравнение Дирака в стандартном представлении дает следующую систему уравнений для φ и χ:

$$(\varepsilon - m - U)\varphi = \sigma\hat{p}\chi, \qquad (\varepsilon + m - U)\chi = \sigma\hat{p}\varphi, \tag{35,2}$$

где $U(r) = e\Phi(r)$ — потенциальная энергия электрона в поле. Вычисление результата подстановки сюда выражений (35,1) сводится к вычислению правых сторон этих уравнений.

Выражая шаровой спинор $\Omega_{jl'm}$ через Ω_{jlm} согласно

$$\Omega_{jl'm} = i^{l-l'}\left(\sigma \frac{\mathbf{r}}{r}\right)\Omega_{jlm}$$

(см. (24,8)), пишем:

$$(\sigma\hat{\mathbf{p}})\chi = -i(\sigma\hat{\mathbf{p}})(\sigma\mathbf{r})\frac{g}{r}\Omega_{jlm}.$$

Преобразовав теперь произведение $(\sigma\hat{\mathbf{p}})(\sigma\mathbf{r})$ с помощью формулы (33,5), найдем после раскрытия векторных операций

$$(\sigma\hat{\mathbf{p}})\chi = -i\{\hat{\mathbf{p}}\mathbf{r} + i\sigma[\hat{\mathbf{p}}\mathbf{r}]\}\frac{g}{r}\Omega_{jlm} =$$
$$= \{-\operatorname{div}\mathbf{r} - (\mathbf{r}\nabla) - \sigma[\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}]\}\frac{g}{r}\Omega_{jlm} = -\left\{g' + \frac{2}{r}g + \frac{g}{r}\sigma\hat{\mathbf{l}}\right\}\Omega_{jlm},$$

где $\hat{\mathbf{l}} = [\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}}]$ — оператор орбитального момента; штрих означает дифференцирование по r. Собственные значения произведения $\sigma\hat{\mathbf{l}} = 2\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{s}}$ равны

$$2\mathbf{ls} = \mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2 = j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} j - {}^1/_2, & l = j - {}^1/_2, \\ -j - {}^3/_2, & l = j + {}^1/_2. \end{cases}$$

Для единообразия записи формул в обоих случаях $(l = j \pm {}^1/_2)$ удобно ввести обозначение

$$\varkappa = \begin{cases} -(j + {}^1/_2) = -(l+1), & j = l + {}^1/_2, \\ +(j + {}^1/_2) = l, & j = l - {}^1/_2. \end{cases} \qquad (35,3)$$

Число $\varkappa$ пробегает все целые значения, исключая значение 0 (причем положительные числа отвечают случаю $j = l - {}^1/_2$, а отрицательные — случаю $j = l + {}^1/_2$). Тогда $\mathbf{l}\sigma = -(1 + \varkappa)$, так что

$$(\sigma\hat{\mathbf{p}})\chi = -\left(g' + \frac{1-\varkappa}{r}g\right)\Omega_{jlm}.$$

При подстановке этого выражения в первое из уравнений (35,2) шаровой спинор Ω_{jlm} в обеих сторонах уравнения сокращается. Поступив аналогичным образом и со вторым уравнением, получим в результате следующую систему для радиальных функций:

$$\begin{aligned} &f' + \frac{1+\varkappa}{r}f - (\varepsilon + m - U)g = 0, \\ &g' + \frac{1-\varkappa}{r}g + (\varepsilon - m - U)f = 0, \end{aligned} \qquad (35,4)$$

или

$$\begin{aligned} &(fr)' + \frac{\varkappa}{r}(fr) - (\varepsilon + m - U)gr = 0, \\ &(gr)' - \frac{\varkappa}{r}(gr) + (\varepsilon - m - U)fr = 0. \end{aligned} \qquad (35,5)$$

Исследуем поведение f и g на малых расстояниях, предположив, что поле $U(r)$ возрастает при $r \to 0$ быстрее, чем $1/r$. Тогда в области малых r уравнения (35,4) принимают вид

$$f' + Ug = 0, \qquad g' - Uf = 0.$$

Они имеют вещественные решения вида

$$f = \text{const} \cdot \sin\left(\int U\,dr + \delta\right), \quad g = \text{const} \cdot \cos\left(\int U\,dr + \delta\right), \quad (35,6)$$

где δ — произвольная постоянная. Эти функции осциллируют при $r \to 0$, не стремясь ни к какому пределу. Легко видеть, что такая ситуация соответствует в нерелятивистской теории «падению» частицы на центр.

Прежде всего отметим, что область малых расстояний не накладывает в этом случае ограничений на выбор решения: условие при $r = 0$ для осциллирующей функции отсутствует и выбор постоянной δ остается произвольным (правильного же поведения волновой функции в области больших r можно добиться при любом ε надлежащим выбором δ). Можно устранить эту неопределенность, рассматривая сингулярный (при $r = 0$) потенциал как предел при $r_0 \to 0$ потенциала, «обрезанного» на некотором r_0 (т. е. равного $U(r)$ при $r > r_0$ и $U(r_0)$ при $r < r_0$). При конечном r_0 получается, разумеется, определенная система уровней энергии. Однако энергия основного состояния стремится к $-\infty$ при $r_0 \to 0$.

В нерелятивистской теории это как раз и означает «падение» на центр, поскольку частица на глубоком уровне локализована в малой области вокруг $r = 0$. В релятивистской же теории такая ситуация вообще недопустима, так как означает неустойчивость системы относительно самопроизвольного рождения электрон-позитронных пар. Действительно, если в вакууме для рождения такой пары нужна энергия, превышающая $2m$, то в поле достаточна уже меньшая энергия. При наличии связанного состояния электрона с энергией $\varepsilon < m$ возможно рождение пары с затратой лишь энергии $\varepsilon + m < 2m$, причем рождаются свободный позитрон и электрон в связанном состоянии. Если же энергия уровня связанного состояния $\varepsilon < -m$, то такое поле может рождать позитроны (с энергией $-\varepsilon > m$) самопроизвольно, без затраты энергии от внешнего источника. В рассматриваемом же поле при $r_0 \to 0$ имеется бесконечное множество таких «аномальных» уровней с $\varepsilon < -m$. Поэтому поля с потенциалом $\Phi(r)$, возрастающим при $r \to 0$ быстрее, чем $1/r$, в теории Дирака вообще нельзя рассматривать. Подчеркнем, что это относится к потенциалам обоего знака. «Падение» происходит, конечно, лишь в случае притяжения, но поскольку знак $U = e\Phi$ зависит также и от знака заряда, то в одном случае аномально ведут себя электронные, а в другом — позитронные уровни; во втором случае поле рождает свободные электроны.

Рассмотрим далее поведение волновых функций на больших расстояниях. Если поле $U(r)$ достаточно быстро убывает при $r \to \infty$, то при определении асимптотического вида волновых функций на больших расстояниях можно полностью пренебречь полем в уравнениях. При $\varepsilon > m$, т. е. в области непрерывного спектра, мы возвращаемся тогда к уравнению свободного движения, так что асимптотическая форма волновых функций (сферических волн) отличается от таковой для свободной частицы лишь появлением дополнительных «фазовых сдвигов», значения которых определяются видом поля на близких расстояниях[1]. Эти сдвиги зависят от значений j и l, или, что то же, от введенного выше числа $\varkappa$ (а также, разумеется, и от энергии ε). Обозначив их посредством $\delta_\varkappa$ и используя выражение свободной сферической волны (24,7), мы можем сразу написать искомую асимптотическую формулу

$$\psi \approx \frac{2}{r}\frac{1}{\sqrt{2\varepsilon}}\begin{pmatrix} \sqrt{\varepsilon+m}\,\Omega_{jlm}\sin\left(pr-\frac{\pi l}{2}+\delta_\varkappa\right) \\ -\sqrt{\varepsilon-m}\,\Omega_{jl'm}\sin\left(pr-\frac{\pi l'}{2}+\delta_\varkappa\right)\end{pmatrix}, \tag{35,7}$$

или, с учетом определения (35,1):

$$\left.\begin{matrix} f \\ g \end{matrix}\right\} = \frac{\sqrt{2}}{r}\sqrt{\frac{\varepsilon \pm m}{\varepsilon}}\,\begin{matrix}\sin\\ \cos\end{matrix}\left(pr-\frac{\pi l}{2}+\delta_\varkappa\right), \tag{35,8}$$

где $p=\sqrt{\varepsilon^2-m^2}$. Общий коэффициент здесь отвечает нормировке радиальных функций согласно (24,5).

Волновые же функции дискретного спектра ($\varepsilon < m$) при $r\to\infty$ экспоненциально затухают по закону

$$f = -\sqrt{\frac{m+\varepsilon}{m-\varepsilon}}\,g = \frac{A_0}{r}\exp\left(-r\sqrt{m^2-\varepsilon^2}\right), \tag{35,9}$$

где A_0 — постоянная.

Как и в нерелятивистской теории, фазовые сдвиги $\delta_\varkappa$ (точнее, величины $e^{2i\delta_\varkappa}-1$) определяют амплитуду рассеяния в данном поле (об этом будет подробнее идти речь в § 37). Мы не станем исследовать здесь аналитические свойства этих величин (ср. III, § 128). Отметим лишь, что $e^{2i\delta_\varkappa}$ как функция энергии по-прежнему имеет полюсы в точках, соответствующих уровням связанных состояний частицы. Вычет функции $e^{2i\delta_\varkappa}$ в таком полюсе определенным образом связан с коэффициентом в асимптотическом выражении соответствующей волновой функции дискретного спектра. Найдем эту связь, обобщающую нерелятивистскую формулу III (128,17). Необходимые вычисления вполне аналогичны произведенным в III, § 128.

---

[1] Ср. III, § 33. Как и в нерелятивистской теории, $U(r)$ должно убывать быстрее, чем $1/r$. Случай $U \sim 1/r$ будет рассмотрен особо в § 36.

Продифференцируем уравнения (35,5) по энергии:

$$\left(\frac{\partial rf}{\partial \varepsilon}\right)' + \frac{\varkappa}{r}\frac{\partial rf}{\partial \varepsilon} - (\varepsilon + m - U)\frac{\partial rg}{\partial \varepsilon} = rg,$$

$$\left(\frac{\partial rg}{\partial \varepsilon}\right)' - \frac{\varkappa}{r}\frac{\partial rg}{\partial \varepsilon} + (\varepsilon - m - U)\frac{\partial rf}{\partial \varepsilon} = -rf.$$

Умножим эти два уравнения соответственно на rg и на $-rf$, а два уравнения (35,5) — соответственно на $-rg$ и на rf, после чего все четыре уравнения сложим почленно. После всех сокращений получим

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\left(g\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - f\frac{\partial g}{\partial \varepsilon}\right)\right] = r^2(f^2 + g^2).$$

Интегрируем это равенство по r:

$$r^2\left(g\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} - f\frac{\partial g}{\partial \varepsilon}\right) = \int_0^r (f^2 + g^2)\, r^2\, dr,$$

после чего переходим к пределу $r \to \infty$. В силу условия нормировки интеграл в правой стороне равенства обращается в единицу. В левой же стороне учтем, что в асимптотической области функции f и g связаны равенством

$$rg = \frac{(rf)'}{\varepsilon + m},$$

получающимся из (35,5) при пренебрежении членами с U и с $1/r$. В результате получим

$$\frac{1}{\varepsilon + m}\left[(rf)'\frac{\partial rf}{\partial \varepsilon} - rf\left(\frac{\partial rf}{\partial \varepsilon}\right)'\right] = 1. \tag{35,10}$$

Эта формула лишь коэффициентом ($\varepsilon + m$ вместо $2m$) отличается от аналогичной нерелятивистской формулы (для функции χ). Поэтому нет необходимости повторять все дальнейшие вычисления, и мы сразу приведем окончательную формулу, справедливую вблизи точки $\varepsilon = \varepsilon_0$ (ε_0 — уровень энергии):

$$e^{2i\delta_\varkappa} = (-1)^l \frac{2A_0^2}{\varepsilon - \varepsilon_0}\sqrt{\frac{m - \varepsilon_0}{m + \varepsilon_0}}, \tag{35,11}$$

где A_0 — коэффициент в асимптотическом выражении (35,9).

Задача

Найти предельный вид волновой функции при малых r в поле $U \sim r^{-s}$, $s < 1$.

Решение. Для свободной частицы имеем при малых r: $f \sim r^l$, $g \sim r^{l'}$, так что при $l < l'$: $f \gg g$, а при $l > l'$: $f \ll g$. Делаем предположение (оправдывающееся результатом), что такое соотношение сохраняется и в рассматриваемом поле. При $l < l'$ (т. е. $l = j - 1/2$, $\varkappa = -l - 1$) в первом из уравнений (35,4) член с g можно опустить, так что по-прежнему $f \sim r^l$. Из второго же уравнения имеем тогда $g \sim rfU$, т. е. $g \sim r^{l+1-s} = r^{l'-s}$. Аналогичным образом рассматривается случай $l > l'$. В результате находим

$$\text{при } l < l'\colon\ f \sim r^l, \qquad g \sim r^{l'-s};$$
$$\text{при } l > l'\colon\ f \sim r^{l-s}, \qquad g \sim r^{l'}.$$

§ 36. Движение в кулоновом поле

Изучение свойств движения в наиболее важном случае кулонова поля начнем с исследования поведения волновых функций на малых расстояниях. Будем говорить для определенности о поле притяжения: $U = -Z\alpha/r$ [1]).

При малых r в уравнениях (35,5) можно опустить члены с $\varepsilon \pm m$; тогда

$$(fr)' + \frac{\varkappa}{r} fr - \frac{Z\alpha}{r} gr = 0,$$
$$(gr)' - \frac{\varkappa}{r} gr + \frac{Z\alpha}{r} fr = 0.$$

Функции fr и gr входят в каждое из этих уравнений равноправным образом. Поэтому обе ищем в виде одинаковых степеней r: $fr = ar^\gamma$, $gr = br^\gamma$. Подстановка в уравнения дает

$$a(\gamma + \varkappa) - bZ\alpha = 0, \quad aZ\alpha + b(\gamma - \varkappa) = 0,$$

откуда

$$\gamma^2 = \varkappa^2 - (Z\alpha)^2. \tag{36,1}$$

Пусть $(Z\alpha)^2 < \varkappa^2$. Тогда γ вещественно, причем из двух значений должно быть выбрано положительное: соответствующее решение либо не расходится при $r = 0$, либо расходится менее быстро, чем другое. Такой выбор можно обосновать путем рассмотрения потенциала, обрезанного (как было объяснено в предыдущем параграфе) на некотором малом r_0, с дальнейшим переходом к пределу $r_0 \to 0$ (ср. аналогичные рассуждения в III, § 35). Таким образом,

$$f = \frac{Z\alpha}{\gamma + \varkappa} g = \mathrm{const} \cdot r^{-1+\gamma},$$
$$\gamma = \sqrt{\varkappa^2 - Z^2\alpha^2} = \sqrt{(j + 1/2)^2 - Z^2\alpha^2}. \tag{36,2}$$

---

[1]) В обычных единицах $U = -Ze^2/r$. При переходе к релятивистским единицам e^2 заменяется безразмерным α.