ДОКЛАДЫ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

НОВАЯ СЕРИЯ

1953

Том LXXXIX № 2

Доклады Академии Наук СССР
1953. Том LXXXIX, № 2

ФИЗИКА

Ю. Н. ДЕМКОВ

ВАРИАЦИОННЫЕ ПРИНЦИПЫ И ТЕОРЕМА ВИРИАЛА ДЛЯ ЗАДАЧ СПЛОШНОГО СПЕКТРА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

(Представлено академиком В. А. Фоком 12 I 1953)

Рассмотрим уравнение для радиальной функции, определяющее S-рассеяние силовым центром

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r)\right]\psi_k(r) = 0, \quad \psi_k(0) = 0, \quad r \geqslant 0,$$
$$k^2 = \frac{2mE}{h^2}, \quad V(r) = \frac{2m}{h^2}U(r), \tag{1}$$

где k — волновое число; $U(r)$ — потенциальная энергия; E — полная энергия. Предполагаем, что $V(r)$ убывает на бесконечности быстрее, чем $1/r$, и имеет в нуле полюс не выше второго порядка.

Тогда при больших r решение будет иметь асимптотический вид

$$\psi_k(r) \sim A\sin(kr + \eta_0), \tag{2}$$

где η_0 зависит от k. Если образовать функционал

$$I_k(\varphi) = \int\limits_0^\infty \varphi(r)\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r)\right]\varphi(r)\,dr, \tag{3}$$

причем

$$\varphi(0) = 0, \quad \varphi(r) \sim B\sin(kr + \eta), \tag{4}$$

то вариация его при условиях

$$\varphi(r) = \psi_k(r), \quad \delta\psi_k(0) = 0, \quad \psi_k + \delta\psi_k \sim (A + \delta A)\sin(kr + \eta_0 + \delta\eta) \tag{5}$$

будет равна [1]

$$\delta I_k(\psi_k) = -A^2k\delta\eta. \tag{6}$$

Формула (6) позволяет использовать прямые методы для определения ψ_k и η_0. Положим, например,

$$\varphi = \sum_{i=1}^{n} c_i\varphi_i, \tag{7}$$

причем

$$\varphi_i(0) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n; \qquad \varphi_1 \sim \sin kr, \quad \varphi_2 \sim \cos kr,$$
$$\varphi_j(r) = 0 \quad \text{при } r \to \infty, \quad j = 3, 4, \ldots, n. \tag{8}$$

Функционал (3) будет тогда квадратичной формой относительно c_i

$$I_k(\varphi) = \sum_{i,\,j=1}^{n} I_{ij} c_i c_j, \tag{9}$$

где

$$I_{ij} = \int_0^\infty \varphi_i \left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V \right) \varphi_j dr. \tag{10}$$

Тогда уравнение (6) в подпространстве функций (7) сводится к системе

$$\sum_{j=1}^{n} I_{1j} c_j = \frac{kc_2}{2}, \quad \sum_{j=1}^{n} I_{2j} c_j = -\frac{kc_1}{2}, \tag{11}$$

$$\sum_{j=1}^{n} I_{ij}\, c_j = 0, \quad i = 3,\ 4,\ \ldots,\ n.$$

Условие наличия ненулевых решений этой системы

$$\begin{vmatrix} I_{11} & I_{12} - {}^1/_2 k & \ldots & I_{1n} \\ I_{21} + {}^1/_2 k & I_{22} & \ldots & I_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ I_{n1} & I_{n2} & \ldots & I_{nn} \end{vmatrix} = 0, \tag{12}$$

вообще говоря, не выполняется. Отбрасывая одно из уравнений (11), мы делаем систему разрешимой и приходим к различным формулировкам вариационного метода.

В методе Хюльтена (1) полагается $\delta\eta = 0$ и вводится добавочное условие $I_k = 0$, чтобы получить достаточное число уравнений для определения произвольных параметров. Это условие непосредственно вытекает из стационарности функционала I_k относительно вариации нормировочного коэффициента при волновой функции. Такая вариация возможна при выборе функции φ в форме (7) и, соответственно, условие $I_k = 0$ следует из уравнений (11).

Произведем теперь в формуле (6) вариацию масштаба длины, т. е. заменим $\psi_k(r)$ на $\psi_k(r + \varepsilon r)$. При этом изменится асимптотический вид функции φ

$$\psi_k(r + \varepsilon r) \sim A \sin\left[(k + \varepsilon k) r + \eta_0(k)\right]. \tag{13}$$

Для того чтобы функционал имел конечное значение, надо заменить в нем k на $k + \varepsilon k$. Тогда

$$I' = \int_0^\infty \psi_k(r + \varepsilon r) \left[\frac{d^2}{dr^2} + (k + \varepsilon k)^2 - V(r) \right] \psi_k(r + \varepsilon r)\, dr; \tag{14}$$

заменяя $r + \varepsilon r$ на ρ и используя (1), имеем

$$I' = \int_0^\infty \psi_k^2(\rho) \left[(1 + \varepsilon) V(\rho) - \frac{1}{1+\varepsilon} V\left(\frac{\rho}{1+\varepsilon}\right) \right] d\rho. \tag{15}$$

С другой стороны, I' можно рассматривать как функционал $I_{k+\varepsilon k}$, в который подставлена варьированная функция

$$\psi_k(r + \varepsilon r) = \psi_{k+\varepsilon k}(r) + \delta\psi; \tag{16}$$

вариация фазы при этом будет

$$\delta\eta = \eta_0(k) - \eta_0(k + \varepsilon k). \tag{17}$$

Разлагая (15), (16) и (17) по степеням ε, отбрасывая члены порядка ε^2 и выше и используя (6), имеем

$$\int_0^\infty \psi_k^2(r)\left[2V(r) + r\frac{dV}{dr}\right]dr = A^2k^2\,\frac{d\eta_0}{dk}. \tag{18}$$

Случай $l \neq 0$ отличается только добавкой слагаемого $l(l+1)/r^2$ к $V(r)$. Эта добавка исчезает в формуле (18) и, следовательно,

$$\int_0^\infty \psi_{kl}^2(r)\left(2V + r\frac{dV}{dr}\right)dr = A^2k^2\frac{d\eta_l}{dk}, \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{19}$$

Аналогичная формула может быть получена и для трехмерного случая, если исходить из метода, предложенного Коном [2]. В этом случае рассматривается уравнение

$$[\nabla^2 + k^2 - V(\mathbf{r})]\,\psi(\mathbf{r}) = 0 \tag{20}$$

и функционал

$$I(\psi_1, \psi_2) = \int \psi_1(\mathbf{r})\,[\nabla^2 + k^2 - V(\mathbf{r})]\,\psi_2(\mathbf{r})\,d\tau, \tag{21}$$

где ψ_1 и ψ_2 удовлетворяют уравнению (20) и имеют на бесконечности асимптотический вид:

$$\psi_i \sim e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + f_k(\mathbf{k}_i^0, \mathbf{r}^0)\frac{e^{ikr}}{kr}, \quad i = 1, 2, \tag{22}$$

$$|\mathbf{k}_i| = k, \quad \mathbf{k}_i^0 = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad \mathbf{r}^0 = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Если варьировать ψ_1 и ψ_2 так, что

$$\psi_i + \delta\psi_i \sim e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} + [f_k(\mathbf{k}_i^0, \mathbf{r}^0) + \delta f_k(\mathbf{k}_i^0, \mathbf{r}^0)]\,\frac{e^{ikr}}{kr}, \tag{23}$$

то вариация I запишется в виде

$$\delta I(\psi_1, \psi_2) = -\frac{4\pi}{k}\delta f_k(\mathbf{k}_2^0, -\mathbf{k}_1^0). \tag{24}$$

Вариация масштаба длины в (24) приводит к формуле

$$\int \psi_1(\mathbf{r})\,[2V(\mathbf{r}) + \mathbf{r}\nabla V(\mathbf{r})]\,\psi_2(\mathbf{r})\,d\tau = 4\pi\,\frac{\partial f_k(\mathbf{k}_2^0, -\mathbf{k}_1^0)}{\partial k}. \tag{25}$$

Если ~~отметить~~ считать $V(\mathbf{r})$ сферически симметричным, подставить в (25) разложение ψ_1, ψ_2 и f_k по сферическим функциям и проинтегрировать по углам, то получим систему уравнений (19) для фаз и радиальных функций.

Точно таким же образом можно получить формулу (6) из формулы (24).

В дискретном спектре вариация масштаба длины приводит к теореме вириала [3], которая может быть записана в сходной форме

$$\int \psi^2(\mathbf{r})\,[2V(\mathbf{r}) + \mathbf{r}\,\nabla V(\mathbf{r})]\,d\tau = 2\mathscr{E}; \tag{26}$$

здесь ψ нормирована, а $\mathscr{E} = \frac{2mE}{h^2}$.

Формулы (19) и (25) являются обобщением теоремы вириала на сплошной спектр и могут иметь полезные применения как для задач теории столкновений, так и для любых процессов, которые описываются уравнением (19), т. е. для процессов диффракции плоской волны на пространственной неоднородности конечных размеров.

Вывод этих формул имеет некоторое сходство с выводом теоремы вириала для молекул.

Здесь при вариации масштаба приходится менять волновое число, и поэтому в конечную формулу входит производная от фазы по волновому числу. В случае молекулы вариация масштаба меняет расстояние между ядрами и в конечную формулу входит производная от полной энергии по расстоянию между ядрами (в равновесном положении молекулы эта производная обращается в нуль).

Ленинградский государственный университет
им. А. А. Жданова

Поступило
10 XII 1952

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] L. Hulthén, Kungliga Fysiogr. Sällsk. i Lund Förh., 14, 2, Sweden (1944). [2] W. Kohn, Phys. Rev., 74, 1763 (1948). [3] В. Фок, Z. f. Phys., 63, 855 (1930).