

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

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r) \right] \psi_k(r) = 0, \quad \psi_k(0) = 0, \quad r \geq 0, \quad (1)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad V(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r),$$

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

$$\psi_k(r) \sim A \sin(kr + \eta_0), \quad (2)$$

где η_0 зависит от k . Если образовать функционал

$$I_k(\varphi) = \int_0^\infty \varphi(r) \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r) \right] \varphi(r) dr, \quad (3)$$

причем

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

то вариация его при условиях

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

будет равна ⁽¹⁾

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

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

$$\varphi = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i, \quad (7)$$

причем

$$\varphi_i(0) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad \varphi_1 \sim \sin kr, \quad \varphi_2 \sim \cos kr, \quad (8)$$

$$\varphi_j(r) = 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty, \quad j = 3, 4, \dots, n.$$

Функционал (3) будет тогда квадратичной формой относительно c_i

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

где

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

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

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n I_{1j} c_j &= \frac{kc_2}{2}, & \sum_{j=1}^n I_{2j} c_j &= -\frac{kc_1}{2}, \\ \sum_{j=1}^n I_{ij} c_j &= 0, & i &= 3, 4, \dots, n. \end{aligned} \quad (11)$$

Условие наличия ненулевых решений этой системы

$$\begin{vmatrix} I_{11} & I_{12} - 1/2k & \dots & I_{1n} \\ I_{21} + 1/2k & I_{22} & \dots & I_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ I_{n1} & I_{n2} & \dots & I_{nn} \end{vmatrix} = 0, \quad (12)$$

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 ψ

$$\psi_k(r + \varepsilon r) \sim A \sin[(k + \varepsilon r)r + \eta_0(k)]. \quad (13)$$

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

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

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

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

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

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

вариация фазы при этом будет

$$\delta\eta = \eta_0(k) - \eta_0(k + \varepsilon k). \quad (17)$$

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

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

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

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

Аналогичная формула может быть получена и для трехмерного случая, если исходить из метода, предложенного Кооном⁽²⁾. В этом случае рассматривается уравнение

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

и функционал

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

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

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

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

Если варьировать ψ_1 и ψ_2 так, что

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

то вариация I запишется в виде

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

Вариация масштаба длины в (24) приводит к формуле

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

Если отметить $V(\mathbf{r})$ 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

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

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

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).
W. Kohn, Phys. Rev., 74, 1763 (1948). ² А. В. Фок, Z. f. Phys., 63, 855 (1930).