ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р2 - 7052

Л.Г.Заставенко

ЭЛЕМЕНТАРНОЕ ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ЭКСТРЕМАЛЬНОГО СВОЙСТВА БЕЗУЗЛОВОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

1973

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Заставенко Л.Г. P2 - 7052

Элементарное доказательство экстремального свойства безузлового решения уравнения Шредингера

Дано элементарное доказательство экстремального свойства безузлового решения уравнения Шредингера.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1973

Zastavenko L.G. P2 - 7052

Simple Proof of the Extremum Property of Nodeless Solution of Schrödinger Equation

A simple proof of the extremum property of the nodeless solution of Schrödinger equation is given.

P2 - 7052

Л.Г.Заставенко

ЭЛЕМЕНТАРНОЕ ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ЭКСТРЕМАЛЬНОГО СВОЙСТВА БЕЗУЗЛОВОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Направлено в ЯФ

Как известно /см., например,[1], том I, глава VI/, безузловое решение Ω_0 уравнения Шредингера

$$H\Omega_0 = E_0\Omega_0 \qquad /1/$$

доставляет функционалу

$$\epsilon(\Omega) = \int \Omega^* H \Omega \, d\tau \,/ \int \Omega^* \Omega \, d\tau \qquad /2/$$

наименьшее значение /равное E_0 /:

$$\epsilon(\Omega) > E_0 = \epsilon(\Omega_0) \quad \text{при } \Omega \neq \Omega_0 \,. \qquad /3/$$

Доказательство этого экстремального свойства [1], хотя и не слишком сложное, все же недостаточно просто, чтобы быть включенным в учебник квантовой механики.

Мы дадим элементарное доказательство экстремального свойства /3/.

1. Существенно используем вещественность решения Ω_0 /она следует из вещественности гамильтониана H /. Для определенности примем

$$H = -\frac{1}{2}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \qquad /4/$$

ограничив, таким образом, рассмотрение случаем движения частицы в одномерной потенциальной яме; фактически наше рассмотрение пригодно и для гораздо более сложных систем, как, например, для случая квантовой теории самодействующего бозонного поля /2/.

2. Представим Ω в виде

$$\Omega = U(x)\Omega_0 \; ; \qquad /5/$$

с учетом /1/ и /4/, очевидно, будем иметь

$$(H-E_0)\,\Omega = \{ -\Omega_0 \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial \Omega_0}{\partial x} \} . \qquad /6/$$

Отсюда для функционала $\epsilon(\Omega) - E_0$ получим представление:

$$\int \Omega_0^2 \, |U^2| \, dx \, \{ \epsilon(U\Omega_0) - E_0 \} = - \int dx \, [\frac{1}{2} \Omega_0^2 U^* \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \Omega_0 U^* \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial \Omega_0}{\partial x}] . \qquad /7/$$

Избавившись от второй производной при помощи интегрирования по частям, приведем это выражение к виду

$$\epsilon(U\Omega_0) = \epsilon(\Omega_0) + \frac{1}{2} \int dx \, \Omega_0^2 \frac{\partial U^*}{\partial x} \frac{\partial U}{\partial x} \Big/ \int dx \, \Omega_0^2 U^* U . \qquad /8/$$

Из /8/, очевидно, следует /3/.

3. Возьмем теперь в качестве Ω_0 /вещественное/ решение уравнения Шредингера, имеющее нули. Тогда /8/ показывает, что функционал $\epsilon(\Omega)$ больше, чем $\epsilon(\Omega_0)$, для всех функций Ω, имеющих нули в тех же точках, где их имеет Ω_0. Если же функция Ω отлична от нуля в точке x_0, где функция Ω_0 равна нулю, то функция $U(x) = \Omega / \Omega_0$ имеет полюс в точке $x = z x_0$; в этом случае переход от /7/ к /8/ незаконен и формула /8/ неправильна, так что функционал $\epsilon(\Omega)$ может быть и меньше, чем $\epsilon(\Omega_0)$.

Литература

1. *Р.Курант, Д.Гильберт. Методы математической физики, том. 1, Гостехиздат, 1961.*
2. *Л.Г.Заставенко. ТМФ, 7, 20 /1971/; ТМФ, 8, 335 /1971/; ТМФ 9, 355 /1971/.*

Рукопись поступила в издательский отдел
3 апреля 1973 года.