



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

1540 / 2-80

7/4-80

P4 - 12972

Е.Б.Бальбуцев

УЛУЧШЕННАЯ ОЦЕНКА НИЖНЕЙ ГРАНИЦЫ
ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ N ФЕРМИОНОВ

Направлено в "Journal of Physics"

1980

1. ВВЕДЕНИЕ

Недавно в работах^{/1,2/} было предложено усовершенствование известных методов Поста и Холла для определения нижней границы энергии системы N фермионов. Полученные там оригинальные уравнения были решены приближенными методами, которые не всегда применимы. В настоящей работе найдено точное решение этих уравнений, что позволило выявить ошибки, допущенные в^{/1/}.

2. МЕТОД ХОЛЛА

Чтобы оценить снизу энергию системы N фермионов модифицированным методом Холла, нужно решить уравнение^{/1/}

$$[h(\vec{p}) - \epsilon] \psi(\vec{p}) = \beta \cdot \delta(\vec{p}) \quad /1/$$

с граничным условием

$$\psi(0) = 0.$$

Здесь $h(\vec{p}) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{N}{2} v(\vec{p})$; $\mu = m \cdot \lambda$, m - масса частицы; λ - численный множитель, зависящий от определения относительных координат \vec{p} (здесь он равен 2/3); v - двухчастичное взаимодействие; β - неопределенный множитель, который находится в конечном счете из граничного условия. Нижняя граница получается суммированием $N-1$ нижайших уровней энергии ϵ_1 .

Для решения неоднородного уравнения /1/ естественно применить метод функций Грина. Рассмотрим сначала одномерную задачу:

$$[h(x) - \epsilon] \psi(x) = Q(x). \quad /2/$$

Общее решение этого неоднородного дифференциального уравнения второго порядка записывается в виде

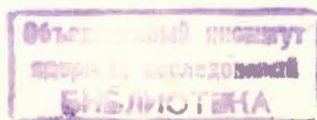
$$\psi(x) = a_1 \phi_1(x) + a_2 \phi_2(x) + f(x),$$

где $f(x)$ - его частное решение. Функции $\phi_1(x)$ и $\phi_2(x)$ суть линейно-независимые решения однородного уравнения

$$[h(x) - \epsilon] \phi(x) = 0.$$

Из них конструируется функция Грина^{/3/} этого уравнения:

$$G(x, x') = \begin{cases} \phi_1(x) \phi_2(x') & \text{при } x > x', \\ \phi_2(x) \phi_1(x') & \text{при } x < x'. \end{cases}$$



С ее помощью уже нетрудно получить частное решение неоднородного уравнения /2/:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, x') \cdot Q(x') dx'$$

Коэффициенты a_1 и a_2 находятся из граничных условий и нормировки.

Решим для иллюстрации задачу N тел с осциллятором взаимодействием:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{N}{2} \gamma x^2 - \epsilon\right) \psi(x) = \beta \cdot \delta(x). \quad /3/$$

Линейно-независимыми решениями соответствующего однородного уравнения являются хорошо известные четные и нечетные осцилляторные функции:

$$\phi_1 = e^{-\xi^2/2} F\left(\frac{1-e}{4}, \frac{1}{2}; \xi^2\right), \quad \phi_2 = \xi \cdot e^{-\xi^2/2} F\left(\frac{3-e}{4}, \frac{3}{2}; \xi^2\right).$$

Здесь F - вырожденная гипергеометрическая функция, $\xi = \left(\frac{\mu \gamma N}{\hbar^2}\right)^{1/4} \cdot x$,

$\epsilon = \left(\frac{\hbar^2 \gamma N}{4\mu}\right)^{1/2} \cdot e = e \cdot \hbar \omega / 2$. Общее решение уравнения /3/ есть

$$\psi(x) = a_1 \phi_1(x) + a_2 \phi_2(x) + \beta G(x, 0),$$

где

$$G(x, 0) = \begin{cases} 0 & \text{при } x > 0, \\ \phi_2(x) & \text{при } x < 0. \end{cases}$$

Из граничного условия $\psi(0) = 0$ следует, что $a_1 = 0$. Чтобы волновая функция обращалась в нуль при $x \rightarrow \pm \infty$, нужно положить $(3-e)/4 = -n$, чем определяется энергетический спектр:

$$\epsilon = (4n+3) \cdot \hbar \omega / 2 = \left[(2n+1) + \frac{1}{2}\right] \hbar \omega = \left(k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad k = 1, 3, 5, \dots \quad /4/$$

Как видно, это та часть спектра, которая соответствует нечетным состояниям обычного осциллятора. В силу симметрии гамильтониана относительно инверсии волновая функция, очевидно, должна быть четной либо нечетной

$$\psi(-x) = \pm \psi(x).$$

Отсюда следует, что β может принимать два значения:

1/ $\beta = 0$, когда волновая функция нечетна: $\psi(x) = a_2 \phi_2(x)$;

2/ $\beta = -2a_2$, когда волновая функция

$$\text{четна: } \psi(x) = \begin{cases} a_2 \phi_2(x) & \text{при } x > 0, \\ -a_2 \phi_2(x) & \text{при } x < 0. \end{cases}$$

Коэффициент a_2 определяется условием нормировки

$$2 a_2^2 \int_0^{\infty} \phi_2^2(x) dx = 1.$$

Таким образом, мы нашли, что спектр собственных значений уравнения /3/ состоит из уровней, соответствующих нечетным состояниям обычного гармонического осциллятора, причем каждый уровень дважды вырожден.

Маннинг /1/ пришел к такому же выводу совершенно иначе. Нечетные волновые функции /вместе с соответствующими уровнями энергии/ он получил, естественно, как решения уравнения /3/ при $\beta = 0$. Чтобы определить его собственные значения при $\beta \neq 0$, нужно было найти корни уравнения

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\phi_{2n}(0)|^2}{e_{2n} - e} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \cdot \frac{1}{4n+1-e} = 0,$$

где ϕ_{2n} - четные осцилляторные функции. Ряд этот, хотя и медленно, но сходится и может быть просуммирован точно. Для корней уравнения получается выражение

$$e_i = 4i + 3,$$

что совпадает с /4/. Результаты расчета нижней границы различными методами показаны в /1/ в виде графиков. Для полноты картины они приведены здесь в табл. 1.

В случае трехмерного осциллятора

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + \frac{N}{2} \gamma r^2 - \epsilon\right) \psi(\vec{r}) = \beta \delta(\vec{r}) \quad /5/$$

описанная процедура уже не работает, т.к. приходится иметь дело с расходящимся рядом

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)!!}{(2n)!!} \cdot \frac{1}{4n+3-e} = 0. \quad /6/$$

Решим эту же задачу методом Функций Грина, хотя в случае осциллятора возможно и более простое и наглядное решение /см. приложение/. Для функции Грина трехмерного уравнения Шредингера справедливо /3/ соотношение

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \sum_{\ell, m} \frac{1}{r \cdot r'} G_{E\ell}(r, r') Y_{\ell m}\left(\frac{\vec{r}}{r}\right) Y_{\ell m}\left(\frac{\vec{r}'}{r'}\right).$$

Здесь $Y_{\ell m}$ - сферические функции, $G_{E\ell}$ - функция Грина радиального уравнения Шредингера:

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} - \xi^2 + 2E\right] R(\xi) = 0, \quad \xi = \left(\frac{\mu \omega}{\hbar}\right)^{1/2} \cdot r, \quad E = \frac{\epsilon}{\hbar \omega}, \quad \omega = \left(\frac{N \gamma}{\mu}\right)^{1/2}.$$

Два его линейно-независимых решения суть

$$R_1(\xi) = \xi^{\ell+1} \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot F\left(\frac{3/2 + \ell - E}{2}, \frac{3}{2} + \ell; \xi^2\right),$$

$$R_2(\xi) = \xi^{-\ell} \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot F\left(\frac{1/2 - \ell - E}{2}, \frac{1}{2} - \ell; \xi^2\right).$$

Отсюда

$$G_{E\ell}(r, r') = -\frac{1}{2\ell+1} \begin{cases} R_2(\xi)R_1(\xi') & \text{при } \xi > \xi', \\ R_1(\xi)R_2(\xi') & \text{при } \xi < \xi'. \end{cases}$$

Частное решение неоднородного уравнения /5/:

$$f(r) = -\beta \frac{2\mu}{\hbar^2} \sum_{\ell, m} \frac{1}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \iiint \frac{1}{r'} G_{E\ell}(r, r') \delta(r^2 - r'^2) dr' Y_{\ell m}^*(\theta', \phi') d\Omega' =$$

$$= -\frac{\beta}{2\pi} \cdot \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{r} \int_0^\infty \frac{1}{r'} G_{E0}(r, r') \delta(r^2 - r'^2) dr'.$$

Таблица 1

Точная энергия одномерной системы N фермионов с осцилляторным взаимодействием и ее нижние границы, вычисленные усовершенствованным /У/ и простым /Пост/ методами Холла, методом Поста /Холл/ а также усовершенствованным и простым /Холл/ методами Карра-Поста. Энергии даны в единицах $(\hbar^2 \gamma N / 2m)^{1/2}$.

	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Точн.	3	8	15	24	35	48	63	80	99
У Холл	2,60	5,20	11,26	17,32	26,85	36,37	49,36	62,35	78,81
Холл	0,87	3,46	7,79	13,86	21,65	31,18	42,44	55,43	70,15
Пост	3	6	9	12	15	18	21	24	27
У Карр-Пост	3	5,20	10,61	15,81	24,01	32,08	43,09	54	67,83
Карр-Пост	1	3,46	7,35	12,65	19,36	27,50	37,04	48	60,37

Общее решение:

$$\psi(\vec{r}) = a \frac{R_1(\xi)}{\xi} Y_{\ell m}(\theta, \phi) + \frac{R_2(\xi)}{\xi} [b \cdot Y_{\ell m}(\theta, \phi) + \frac{\beta}{2\pi} \cdot \frac{\mu^2 \omega}{\hbar^3} \cdot \delta_{\ell, 0}] \cdot r > 0.$$

Требование $\psi(0) = 0$ дает: $b=0$, $\beta=0$, $\ell \neq 0$.

Из условия $\psi(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ находим собственные значения:

$$E = 2n + \ell + \frac{3}{2}, \quad \ell \neq 0.$$

Таким образом, искомый спектр уровней совпадает со спектром обычного трехмерного осциллятора, из которого выброшены все s-уровни. Этот результат отличается от результата работы /1/, где считается, что s-уровни надо сдвинуть вверх на $1\frac{1}{2}\hbar\omega$, а не опускать. По-видимому, там была допущена ошибка при обращении с расходящимся рядом /6/. 0 степени улучшения нижней границы энергии системы можно судить по табл. 2.

Еще один пример - трехмерная система N тел, связанных гравитационными силами:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{N}{2} \cdot \frac{a}{r} - \epsilon\right) \psi(\vec{r}) = \beta \delta(\vec{r}). \quad /7/$$

Здесь можно воспользоваться готовыми результатами. Функция Грина радиального уравнения Шредингера

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \cdot \left(\frac{N}{2} \cdot \frac{a}{r} + \epsilon\right) \right\} R(r) = 0$$

выражается /3/ через функцию Уиттекера $W_{\kappa, \nu}(\xi)^{1/4}$ и гамма-функцию:

$$G(\vec{r}, 0) = \frac{\mu}{2\pi \hbar^2} \cdot \frac{1}{r} \Gamma(1-\kappa) \cdot W_{\kappa, \frac{1}{2}}(-\xi),$$

где $\xi = 2(-2\mu\epsilon/\hbar^2)^{1/2} \cdot r$, $\kappa = aN^2/(-8\epsilon\hbar^2/\mu)^{1/2}$, $\nu = \ell + \frac{1}{2}$. Из двух его линейно-независимых решений только одно имеет нужное нам поведение в нуле:

$$R_1(r) = e^{-\xi/2} \cdot \xi^{\ell+1} \cdot F(\ell - \kappa + 1, 2\ell + 2; \xi).$$

Общее решение неоднородного уравнения /7/ имеет вид:

$$\psi(\vec{r}) = a \frac{R_1(r)}{\xi} Y_{\ell m}(\theta, \phi) + \frac{\beta}{\pi} \sqrt{\frac{-2\mu^3 \epsilon}{\hbar^4}} \cdot \delta_{\ell, 0} \frac{W_{\kappa, \nu}(\xi)}{\xi}.$$

Чтобы выполнялось условие $\psi(0) = 0$, нужно положить $a=0$ при $\ell=0$, а также $\beta=0$, т.к. $W_{\kappa, 1/2}(\xi)/\xi = \ln \xi$ при $\xi \rightarrow 0$. При $r \rightarrow \infty$ волновая функция $\psi(r) \rightarrow 0$, если только $1/2 + \nu - \kappa = -n$. Это равенство определяет энергетический спектр системы:

$$\epsilon_{nl} = -\frac{1}{(n + \ell + 1)^2} \left(\frac{\mu N^2 a^2}{8\hbar^2} \right), \quad \ell \neq 0.$$

Таблица 2

Нижние границы энергии трехмерной системы N фермионов с осцилляторным взаимодействием, рассчитанные усовершенствованным /У/ и простым /5/ методами Холла, методом Поста /6/, а также усовершенствованным и простым /7/ методами Карра-Поста. Энергии даны в единицах $(\hbar^2 \gamma N / 2m)^{1/2}$.

	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
(У) Холл	4,33	8,66	12,99	19,05	25,11	31,18	37,24	43,30	51,10	58,89	66,68
Холл	2,60	6,93	11,26	15,59	21,65	27,71	33,78	39,84	45,90	51,96	59,76
Пост	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55
(У) Карр-Пост	5	8,66	12,25	17,39	22,46	27,50	32,50	37,50	43,98	50,43	56,87
Карр-Пост	3	6,93	10,61	14,23	19,36	24,44	29,48	34,50	39,50	44,50	50,96

Как видно, он совпадает со спектром обычной кулоновской задачи, в котором опущены все s-уровни. Этот результат опять-таки отличается от результата работы /1/. Там тоже спектр состоит из уровней обычной кулоновской задачи, но утверждается, что вместо s-уровней надо подставлять корни уравнения

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|R_{n0}(0)|^2}{\epsilon_{n0} - e} = 0, \quad /8/$$

где $R_{n0}(r)$ - радиальные кулоновские функции s-состояний. Здесь ошибка происходит, по-видимому, оттого, что в уравнении /8/ к сумме по дискретным состояниям не был добавлен интеграл по непрерывному спектру. А это необходимо, т.к. кулоновские волновые функции дискретных состояний не образуют полной системы. Результаты расчетов приведены в табл. 3.

3. МЕТОД КАРРА И ПОСТА

Этот метод был улучшен в работе /2/. Чтобы определить с его помощью нижнюю границу энергии, нужно решить вариационную задачу

$$\delta(\langle \psi | H | \psi \rangle - \epsilon \langle \psi | \psi \rangle) = 0,$$

где
$$H = \sum_{i=2}^N h(\vec{\rho}_i) = \sum_{i=2}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i + \frac{N}{2} v(\vec{\rho}_i) \right\}, \quad \mu = m(N-1)/N,$$

m - масса частицы, $\vec{\rho}_i = \vec{r}_i - \vec{r}_1$, \vec{r}_i - координата частицы i , $\psi(\vec{\rho}_2, \vec{\rho}_3, \dots, \vec{\rho}_N)$ - пробная волновая функция, антисимметричная относительно перестановки своих координат $\vec{\rho}_i$, ϵ - искомая энергия, которая играет здесь роль неопределенного множителя Лагранжа, позволяющего учесть при варьировании условие нормировки $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

В работе /2/ было предложено подчинить пробную функцию еще одному условию:

$$\psi(\vec{\rho}_2, \dots, \vec{\rho}_i = 0, \dots, \vec{\rho}_N) = 0, \quad i=2, 3, \dots, N.$$

Оно естественно для волновой функции, описывающей фермионную систему, ибо равенство $\vec{\rho}_i = 0$ означает, что координаты частиц i и 1 совпадают. Его удобно представить как условие ортогональности ψ с δ -функцией:

$$\int \delta(\vec{\rho}_i) \cdot \psi(\vec{\rho}_2, \dots, \vec{\rho}_N) d\rho_i = 0, \quad i=2, 3, \dots, N. \quad /9/$$

Таблица 3

Нижние границы энергии системы N фермионов, связанных "гравитационным" взаимодействием, рассчитанные усовершенствованным /У/ и простым /Б/ методами Холла, методом Поста /В/, а также усовершенствованным /У/ и простым /Г/ методами Карра-Поста. Энергии даны в единицах $(-mN^2 \alpha^2 / 8\hbar^2)$.

	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
(У) Холл	,17	,33	,50	,57	,65	,72	,80	,87	,94	1,02	1,09	1,13	1,18	1,22
Холл	,67	,83	1,00	1,17	1,33	1,41	1,48	1,56	1,63	1,70	1,78	1,85	1,93	2,0
Пост	,125	,250	,375	,500	,625	,750	,875	1,00	1,125	1,250	1,375	1,50	1,625	1,75
(У) Карр-Пост	,125	,33	,56	,69	,81	,93	1,05	1,16	1,28	1,39	1,50	1,57	1,638	1,70
Карр-Пост	,50	,83	1,125	1,4	1,67	1,81	1,94	2,07	2,20	2,32	2,44	2,56	2,68	2,8

Следует заметить, что на самом деле мы имеем здесь целый континуум условий, т.к. /9/ должно выполняться, естественно, при любых значениях всех остальных координат \vec{p}_k ($k \neq i$). Следовательно, чтобы учесть /9/ при варьировании, нам понадобится также континуум множителей Лагранжа β , т.е. они будут функциями переменных \vec{p}_k ($k \neq i$):

$$\beta = \beta(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_{i-1}, \vec{p}_{i+1}, \dots, \vec{p}_N).$$

Вариационная задача видоизменяется следующим образом:

$$\delta \{ \langle \psi | H | \psi \rangle - \epsilon \langle \psi | \psi \rangle - \sum_{i=2}^N \int d\vec{p}_2 \dots \int d\vec{p}_N \delta(\vec{p}_i) \cdot \beta(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) \cdot \psi(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) \} = 0.$$

В результате варьирования получаем основное уравнение усовершенствованного метода Карра и Поста:

$$(H - \epsilon) \cdot \psi(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) = \sum_{i=2}^N \delta(\vec{p}_i) \cdot \beta(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_{i-1}, \vec{p}_{i+1}, \dots, \vec{p}_N). \quad /10/$$

Как его решать? В том случае, когда все координаты \vec{p}_i отличны от нуля, оно сводится к обычному уравнению Шредингера

$$\sum_{i=2}^N h(\vec{p}_i) \psi(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) = \epsilon \psi(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N),$$

решение которого нам хорошо известно:

$$\psi_\alpha(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) = \det \phi_{\alpha_i}(\vec{p}_i), \quad \epsilon_\alpha = \sum_{i=2}^N \epsilon_{\alpha_i}, \quad /11/$$

$$h(\vec{p}_i) \phi_n(\vec{p}_i) = \epsilon_n \phi_n(\vec{p}_i).$$

Рассмотрим теперь поведение ψ_α как функции какой-либо одной координаты, скажем, ρ_k . Имеем:

$$\psi_\alpha(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) = \begin{cases} \det[\phi_{\alpha_2}(\vec{p}_2) \dots \phi_{\alpha_k}(\rho_k) \dots \phi_{\alpha_N}(\rho_N)] & \text{при } \vec{p}_k \neq 0, \\ 0 & \text{при } \vec{p}_k = 0. \end{cases}$$

Отсюда видно, что должно выполняться условие $\phi_{\alpha_k}(0) = 0$, чтобы ψ_α была непрерывной функцией. Таким образом, получается, что выражение

$$\psi_\alpha(\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) = \det[\phi_{\alpha_2}(\vec{p}_2) \phi_{\alpha_3}(\vec{p}_3) \dots \phi_{\alpha_N}(\vec{p}_N)] \quad /12/$$

справедливо при всех значениях координат \vec{p}_i ($i=2,3,\dots,N$), причем "одночастичные" волновые функции ϕ_{α_i} должны обращаться в нуль в начале координат. Подставим теперь /12/ в /10/ и будем считать \vec{p}_k произвольным, а все остальные координаты отличными от нуля:

$$[h(\vec{\rho}_k) - \epsilon_{\alpha_2}] \phi_{\alpha_2}(\vec{\rho}_k) \cdot A_{k,2} + [h(\vec{\rho}_k) - \epsilon_{\alpha_3}] \phi_{\alpha_3}(\vec{\rho}_k) \cdot A_{k,3} + \dots$$

$$\dots + [h(\vec{\rho}_k) - \epsilon_{\alpha_N}] \phi_{\alpha_N}(\vec{\rho}_k) A_{k,N} = \delta(\vec{\rho}_k) \cdot \beta(\vec{\rho}_2, \dots, \vec{\rho}_{k-1}, \vec{\rho}_{k+1}, \dots, \vec{\rho}_N).$$

Здесь $A_{k,i}$ - алгебраическое дополнение элемента $\phi_{\alpha_i}(\vec{\rho}_k)$ из определителя /12/. Очевидно, что в этом равенстве $\beta(\rho)$ может быть отлично от нуля только в одном случае, когда

$$[h(\vec{\rho}_k) - \epsilon_{\alpha_i}] \phi_{\alpha_i}(\vec{\rho}_k) = c_{\alpha_i} \delta(\vec{\rho}_k) \quad /13/$$

и, конечно, $c_{\alpha_i} \neq 0$. Следовательно, в качестве "одночастичных" функций можно брать не только решения уравнения /11/, но также и решения неоднородного уравнения /13/. Впрочем, удобнее объединить их в одно уравнение, считая, что c_{α} в /13/ может принимать любые значения. О том, как его решать, говорилось в предыдущей главе.

Результаты расчетов нижней границы энергии одномерной и трехмерной систем N фермионов с осцилляторным взаимодействием, а также трехмерной системы с "гравитационным" взаимодействием приведены в табл. 1-3, где можно сравнить модифицированный и простой методы Карра и Поста между собой, а также с методами Холла.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены два улучшенных метода оценки нижней границы энергии основного состояния N фермионов. Дан вывод оригинальных уравнений, которые решены точно методом функций Грина. Проведены иллюстративные расчеты. В случае одномерного гармонического осциллятора воспроизводятся прежние результаты /1,2/. Однако для трехмерного гармонического осциллятора и "гравитационного" взаимодействия оценки отличаются от полученных в /1/. В связи с этим указано на возможные ошибки, допущенные в /1/.

В заключение автор считает своим приятным долгом поблагодарить И.Н.Михайлова и Ф.А.Гареева за плодотворные дискуссии.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Запишем уравнение /5/ в декартовых координатах:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{N}{2} \gamma (x^2 + y^2 + z^2) - \epsilon \right\} \psi(x, y, z) = \beta \delta(x) \delta(y) \delta(z).$$

Оно однородно повсюду, кроме одной точки - начала координат.

нат. Это означает, что его можно рассматривать как обычное уравнение Шредингера, решения которого подчинены некоторому граничному условию в этой точке. Имеем:

$$\psi(x, y, z) = \phi(x) \phi(y) \phi(z), \quad \epsilon = \epsilon_x + \epsilon_y + \epsilon_z.$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{N}{2} \gamma x^2 - \epsilon_x \right] \phi(x) = 0.$$

Чтобы выяснить роль неоднородности, подставим это решение в исходное уравнение и проинтегрируем по какой-либо координате, например по x , в бесконечно малой окрестности нуля.

Интегралы типа $\int_{-0}^{+0} \phi(x) dx$ и тем более $\int_{-0}^{+0} x^2 \phi(x) dx$ должны быть равны нулю - иначе пришлось бы положить $\phi(x) \sim \delta(x)$, что противоречит условию $\psi(0,0,0)=0$. Интегрирование дает в конечном счете:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} [\phi'(x=0) - \phi'(x=-0)] \phi(y) \phi(z) = \beta \delta(y) \delta(z).$$

Если $\phi'(x=0) = \phi'(x=-0)$, т.е. производная $\phi'(x)$ непрерывна при $x=0$, тогда автоматически $\beta=0$. Если же $\phi'(x=0) \neq \phi'(x=-0)$, то получается $\phi(y) \phi(z) = \text{const} \cdot \delta(y) \delta(z)$, что противоречит условию $\psi(0,0,0)=0$. Следовательно, нужно положить $\beta=0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Manning M.R. J.Phys.A: Math.Gen., 1978, 11, p.855.
2. Бальбуцев Е.Б., Михайлов И.Н. ОИЯИ, Р4-11156, Дубна, 1977; Balbutsev E.B., Mikhailov I.N. J.Phys.A: Math.Gen., 1979, 12, p.2445.
3. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. "Наука", М., 1971.
4. Уиттекер Э.Т., Ватсон Дж.Н. Курс современного анализа, ч. II, ФМЛ, М., 1963.
5. Hall R.L. Proc.Phys.Soc., 1967, 91, p.16.
6. Post H.R. Proc.Phys.Soc., 1956, 69, p.936.
7. Carr R.J.M., Post H.R. J.Phys.A: Gen.Phys., 1968, 1, p.596.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 декабря 1979 года.