Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4 — 1964

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

Р. В. ВЕДРИНСКИЙ

ОЦЕНКА ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ, АНАЛИТИЧЕСКОЙ ПО ЭНЕРГИИ

Рассматривается решение уравнения Шредингера, представленное в виде ряда Тейлора по энергии. При определенных ограничениях на потенциал находится оценка для общего члена ряда. При подстановке полученных пределов в ряд последний суммируется. Находится оценка для логарифмической производной.

В настоящей заметке предлагается метод оценки волновой функции и ее производной при отрицательных энергиях, пригодный для достаточно слабых потенциалов.

Для простоты будем рассматривать лишь случай S-состояния. Уравнение Шредингера для S-волны сводится к уравнению вида

$$u'' - Vu = -Eu, \tag{1}$$

где V — достаточно слабый потенциал, обращающийся в 0 при $r>R$.

Зададимся граничными условиями

$$u|_0 = 0, \quad u'|_0 = 1. \tag{2}$$

Функция $u(E, r)$, удовлетворяющая (1) и (2), является целой функцией энергии, поэтому ее можно разложить в ряд Тейлора, абсолютно сходящийся во всей комплексной плоскости энергии:

$$u(E, r) = \sum_{n=0}^{\infty} (-E)^n u_n(r), \tag{3}$$

где для выполнения (2) необходимо

$$u_n|_0 = 0, \quad u_n'|_0 = \delta_{0n}, \quad \delta_{0n} = \begin{cases} 1 & n = 0 \\ 0 & n \neq 0. \end{cases} \tag{4}$$

Используя (1), получим

$$u_n'' - Vu_n = u_{n-1}, \quad n \neq 0 \tag{5}$$

$$u_0'' - Vu_0 = 0. \tag{6}$$

Решая уравнение (5) с граничными условиями (4), получаем

$$u_n(r) = u_0(r) \int_0^r \frac{\int_0^{r'} u_0(r'') u_{n-1}(r'') dr''}{u_0^2(r')} dr', \tag{7}$$

Используя (7), легко получить замкнутое весьма симметричное выражение для $u_n(r)$, которое и является основой проводимых оценок

$$u_n(r) = u_0(r) \int_0^r \int_0^{r_1} \cdots \int_0^{r_{2n-1}} \left(\frac{u_0(r_2)}{u_0(r_1)}\right)^2 \left(\frac{u_0(r_4)}{u_0(r_3)}\right)^2 \cdots \left(\frac{u_0(r_{2n})}{u_0(r_{2n-1})}\right)^2 dr_1 \cdots dr_{2n}, \tag{8}$$

где $r_1 > r_2 > \ldots r_{2n}$.

Будем работать с такими потенциалами, для которых $u_0(r)$ на участке от 0 до R обращаются в 0 только один раз, причем для $u_0(r)$ можно указать оценку:

$$\beta r \leqslant u_0(r) \leqslant \alpha r, \quad (\alpha > \beta > 0,\ r < R). \tag{9}$$

Например, в случае слабого притягивающего потенциала $\alpha = 1$, $\beta = \dfrac{u_0(R)}{R}$. В случае отталкивательного потенциала любой силы $\alpha = \dfrac{u_0(R)}{R}$, $\beta = 1$.

Легко видеть, что для изучения состояний с $l \neq 0$ вместо (9) надо использовать $\beta r^{l+1} \leqslant u_0(r) \leqslant \alpha r^{l+1}$.

Исходя из (8) и (9), получаем

$$u_0(r)\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{2n} \frac{r^{2n}}{(2n+1)!} \leqslant u_n(r) \leqslant u_0(r)\left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^{2n} \frac{r^{2n}}{(2n+1)!}. \tag{10}$$

Рассмотрим случай отрицательных энергий. При этом все члены ряда (3) положительны. Ряд (3), в котором вместо $u_n(r)$ подставлены верхние и нижние пределы из (10), легко суммируется

$$\frac{\alpha}{\beta}\frac{u_0(r)}{\gamma r}\,\mathrm{sh}\left(\gamma\frac{\beta}{\alpha}r\right) \leqslant u(r) \leqslant \frac{\beta}{\alpha}\frac{u_0(r)}{\gamma r}\,\mathrm{sh}\left(\gamma\frac{\alpha}{\beta}r\right), \tag{11}$$

$$(r < R),$$

где $\gamma = \sqrt{-E}$.

Оценим производную $u'(r)$. Используя (7) и (3), находим

$$u'(r) = u(r)\frac{u_0'(r)}{u_0(r)} + \frac{\gamma^2}{u_0(r)} \int_0^r u_0(r')\,u(r')\,dr'.$$

Для логарифмической производной получаем

$$\frac{u_0'(r)}{u_0(r)} + \frac{\alpha^4}{\beta^2}\frac{r}{u_0^2(r)} \frac{\gamma\frac{\beta}{\alpha}\,\mathrm{ch}\left(\gamma\frac{\beta}{\alpha}r\right) - \mathrm{sh}\left(\gamma\frac{\beta}{\alpha}r\right)}{\mathrm{sh}\left(\gamma\frac{\alpha}{\beta}r\right)} < \frac{u'(r)}{u(r)} < \frac{u_0'(r)}{u_0(r)} +$$

$$+ \frac{\beta^4 r}{\alpha^2 u_0^2(r)} \frac{\gamma\frac{\alpha}{\beta}\,\mathrm{ch}\left(\gamma\frac{\alpha}{\beta}r\right) - \mathrm{sh}\left(\gamma\frac{\alpha}{\beta}r\right)}{\mathrm{sh}\left(\gamma\frac{\beta}{\alpha}r\right)}. \tag{12}$$

Исходя из неравенства (12), можно установить пределы существования связанных состояний. Например, сразу видно, что при $\dfrac{u_0'(R)}{u_0(R)} > 0$ связанных состояний быть не может, при $\dfrac{u_0'(R)}{u_0'(R)} < 0$ они будут всегда. Так как $\dfrac{u_0'(R)}{u_0(R)} = \dfrac{1}{R-a}$ (где a — длина рассеяния), связь будет при $a > R$.

Поступила в редакцию
28.5 1963 г.

НИИЯФ