# ИНТЕГРАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПАРЦИАЛЬНЫХ КУЛОНОВСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ПРИ $l = 0$

**Д.В. Федоренко**

Рассмотрим для электрона, движущегося в кулоновском поле и имеющего орбитальный момент $l = 0$, стационарное парциальное уравнение Шредингера [1],

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\alpha}{x}\right\}\Psi(x) = E\Psi(x), \qquad (1)$$

в котором $\Psi(x)$ удовлетворяет граничным условиям $\Psi(0) = 0$; $\Psi(\infty) = 0$.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф.СКОРИНЫ

С целью последующего численного решения уравнения Шредингера, содержащего наряду с кулоновским другие потенциалы, получим эквивалентное (1) интегральное уравнение. Для этого рассмотрим вначале неоднородное уравнение

$$\left\{\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\alpha}{x}\right\}\Psi(x) = f(x). \qquad (2)$$

Неоднородные линейные уравнения можно решать методом функции Грина [2], которая, как известно, имеет вид

$$G(x;y)=\frac{1}{W}\begin{cases}Y_1(x)Y_2(y)\ x\le y;\\ Y_1(y)Y_2(x)\ x\ge y.\end{cases} \tag{3}$$

Здесь $Y_1$ и $Y_2$ - два линейно независимых решения соответствующего однородного уравнения, удовлетворяющие граничным условиям $Y_1(0)=0$, $Y_2(\infty)=0$, а $W$ – вронскиан решений $Y_1$ и $Y_2$.

Для построения функции Грина решим однородное уравнение, соответствующее (2). Введем замену $\Psi(x)=\Phi(2\sqrt{\alpha x})=\Phi(\rho)$, тогда уравнение примет вид

$$\alpha x^{-1}\Phi''_{\rho}-\frac{1}{2}\sqrt{\alpha}x^{-3/2}\Phi'_{\rho}+\alpha x^{-1}\Phi(\rho)=0. \tag{4}$$

Умножим уравнение на $\alpha^{-1}x$ и, делая замену $\Phi=\rho F$, получим уравнение Бесселя

$$\rho^2F''+\rho F'-(1-\rho^2)F=0. \tag{5}$$

Его общее решение имеет вид $F_1=AJ_1(\rho)+BN_1(\rho)$, где $J_1$ и $N_1$ - функции Бесселя и Неймана соответственно. Следовательно, общее решение соответствующего (2) однородного уравнения есть

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф.СКОРИНЫ

$$\Psi(x)=A\sqrt{x}J_1(2\sqrt{\alpha x})+B\sqrt{x}N_1(2\sqrt{\alpha x}). \tag{6}$$

Граничному условию $\Psi(0)=0$ удовлетворяет только функция Бесселя, поэтому $\Psi_1=\sqrt{x}J_1(2\sqrt{\alpha x})$. Выберем также $\Psi_2=\sqrt{x}N_1(2\sqrt{\alpha x})$. Тогда функция Грина рассматриваемой задачи имеет вид

$$G(x;y)=\pi\begin{cases}\sqrt{x}J_1(2\sqrt{\alpha x})\sqrt{y}N_1(2\sqrt{\alpha y})\ \ x\le y\\ \sqrt{y}J_1(2\sqrt{\alpha y})\sqrt{x}N_1(2\sqrt{\alpha x})\ \ x\ge y\end{cases}=$$

$$=\pi\sqrt{x_<}J_1(2\sqrt{\alpha x_<})\sqrt{x_>}N_1(2\sqrt{\alpha x_>}). \tag{7}$$

Решение уравнения (2) при этом выражается интегралом

$$\Psi(x)=\int_0^{\infty}G(x;y)f(y)dy. \tag{8}$$

Заменяя $f(y)$ на $E\Psi(y)$, получаем интегральное уравнение

$$\Psi(x) = E\int_0^{\infty} \pi\sqrt{x_<}\, J_1(2\sqrt{\alpha x_<})\sqrt{x_>}\, N_1(2\sqrt{\alpha x_>})\Psi(y)dy \qquad (9)$$

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф.СКОРИНЫ

для парциальной волновой функции электрона в кулоновском поле.

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 808 с.

2. Владимиров В.С., Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1967. – 436 с.