Доклады Академии наук СССР
1972. Том 204, № 5

УДК 530.145.6 *МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА*

А. Г. РАММ

РАСЧЕТ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ В НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

(Представлено академиком В. А. Фоком 4 X 1971)

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$(-\nabla^2+V(x)-k^2)\psi=0,\quad V(x)=0 \text{ при } |x|>R_0, \tag{1}$$

с финитным (т. е. равным нулю вне некоторой конечной области) потенциалом $V(x)$, $x=(x_1, x_2, x_3)$. Уравнение (1) имеет растущие на бесконечности решения при некоторых значениях параметра k. Эти значения называются квазистационарными состояниями. Их изучению посвящена обширная литература, цитированная в [1, 2]. Физические свойства квазистационарных состояний во многом аналогичны свойствам стационарных состояний. Квазистационарные состояния часто интерпретируются как резонансы [1-3]. В литературе, по-видимому, отсутствуют методы вычисления квазистационарных состояний в тех случаях, когда решение задачи рассеяния невозможно получить в явном виде. В данной работе предлагается общий метод расчета квазистационарных состояний для произвольного, не обязательно сферически симметричного, финитного потенциала. Этот метод годится для вычисления комплексных собственных частот открытых систем.

1. Основы метода. Заменим уравнение (1) эквивалентным интегральным уравнением

$$\psi(x)=-\int G(x,y,k)V(y)\psi(y)\,dy\equiv T(k)\psi,\qquad G(x,y,k)=\frac{\exp(ik|x-y|)}{4\pi|x-y|}, \tag{2}$$

считая, что асимптотически функция ψ ведет себя как

$$\exp(ik|x|)\,|x|^{-1}f(n),\quad n=x\cdot|x|^{-1},\quad |x|\to\infty.$$

Рассмотрим уравнение (2) в пространстве $H=L_{2,R_0}$ функций со скалярным произведением $(\Phi,\psi)=\int\limits_{|x|\leqslant R_0}\Phi(x)\overline{\psi(x)}\,dx$ и нормой $\|\Phi\|=(\Phi,\Phi)^{1/2}$. Всякому ненулевому решению уравнения (2) в H отвечает нетривиальное решение уравнения (1), а всякому нетривиальному решению уравнения (1) отвечает ненулевое решение уравнения (2) в H.

Возьмем произвольную полную и ортонормированную в H систему функций $\{\Phi_j\}$. Будем искать нетривиальное решение уравнения (2) в виде

$$\psi_N=\sum_{j=1}^{N}c_j\Phi_j. \tag{3}$$

Подставляя (3) в (2) и умножая скалярно в H на Φ_i, получим систему

$$\sum_{j=1}^{N}a_{ij}(k)c_j=0, \tag{4}$$

где

$$a_{ij}(k)=\delta_{ij}-(T\Phi_j,\Phi_i). \tag{5}$$

Система (4) имеет ненулевое решение только тогда, когда

$$\det a_{ij}(k) = 0. \qquad (6)$$

Из последнего уравнения приближенно определяются искомые квазистационарные значения $k_j^{(N)}$, $1 \leqslant j \leqslant \infty$, как корни трансцендентного уравнения (6) относительно переменного k. В частности, если $N = 1$, то равенство (6) принимает вид

$$1 = (T(k)\Phi_1, \Phi_1). \qquad (7)$$

Изучение уравнения (2) в $L_{2,\,R_0}$ позволяет обойти трудности, связанные с ростом волновых функций квазистационарных состояний на бесконечности. Предложенный метод дает возможность вычислить все точки, в которых оператор $I - T(k)$ не имеет обратного в H, т. е. все полюса функции Грина оператора Шредингера (1). Среди этих полюсов находятся не только квазистационарные состояния, но и связанные состояния. Последние лежат в полуплоскости $\operatorname{Im} k > 0$.

2. Обоснование метода. Нужно доказать, что при $N \to \infty$ величины $k_j^{(N)}$ сходятся к квазистационарным состояниям k_j и что все квазистационарные состояния могут быть получены таким образом.

Покажем сначала, что $k_j^{(N)} \xrightarrow[N\to\infty]{} k_j$. Выберем на комплексной плоскости k круг K_R произвольного радиуса R. Пусть числа k_j, $1 \leqslant j \leqslant m$, лежат в этом круге, а остальные числа k_j — вне круга. Обозначим через $\varepsilon > 0$ сколь угодно малое число. Положим $D_{\varepsilon,R} = \{k\colon |k - k_j| \geqslant \varepsilon,\ |k| \leqslant R\}$. Оператор $(I - T(k))^{-1}$ равномерно ограничен в $D_{\varepsilon,R}$:

$$\|(I - T(k))^{-1}\| \leqslant M, \quad k \subset D_{\varepsilon,R}, \quad M = M_{\varepsilon,R}. \qquad (8)$$

Равенство (4) можно записать в операторном виде так:

$$\psi_N = P_N T(k)\psi_N, \quad \psi_N \subset E_N, \qquad (9)$$

где E_N — линейная оболочка первых N функций Φ_j, P_N — проектор в H на E_N, $T(k)$ — оператор, определенный формулой (2). Легко проверить, что оператор $T(k)$ при любом k вполне непрерывен в H, если V — финитная непрерывная функция. Так как ортопроекторы P_N сильно сходятся к единичному оператору, а оператор $T(k)$ вполне непрерывен, то $\|(I - P_N)\cdot T(k)\| \xrightarrow[N\to\infty]{} 0$. Следовательно, при $N \to \infty$ операторы $I - T(k)$ и $I - P_N T(k)$ отличаются по норме сколь угодно мало. Так как оператор $I - T(k)$ обратим при $k \subset D_{\varepsilon,R}$, то по известной теореме Банаха ([6]) при $k \subset D_{\varepsilon,R}$ обратим и оператор $I - P_N T(k)$. Но оператор $I - P_N T(k)$ не имеет обратного при $k = k_j^{(N)}$. Поэтому при $N \to \infty$ все числа $k_j^{(N)}$, лежащие в круге K_R, попадут в ε-окрестность точек k_j, что и требовалось доказать.

Покажем теперь, что для всякого квазистационарного состояния k_j найдется последовательность $k_j^{(N)}$ корней уравнения (6) таких, что $k_j^{(N)} \to k_j$. Пусть $|k - k_j| = \varepsilon$ — малая окружность такая, что внутри нее нет других квазистационарных состояний (т. е. точек, в которых оператор $I - T(k)$ не имеет ограниченного обратного). Тогда $\|(I - T(k))^{-1}\| \leqslant M$ при $|k - k_j| = \varepsilon$. Поэтому для сколь угодно близкого по норме оператора $I - P_N T(k)$ при $N \to \infty$ верна аналогичная оценка $\|(I - P_N T(k))^{-1}\| \leqslant M_1$ при $|k - k_j| = \varepsilon$. Предположим, что в круге $|k - k_j| \leqslant \varepsilon$ нет чисел $k_j^{(N)}$. Тогда оператор $(I - P_N T(k))^{-1}$ существует и ограничен при $|k - k_j| \leqslant \varepsilon$. Так как $T(k)$ — аналитическая вполне непрерывная оператор-функция, то $(I - P_N T(k))^{-1}$ — аналитическая оператор-функция при $|k - k_j| \leqslant \varepsilon$ ([4]). По принципу максимума модуля $\|(I - P_N T(k))^{-1}\| \leqslant M_1$ при $|k - k_j| \leqslant \varepsilon$, $N \to \infty$. Но отсюда следует, что оператор $(I - T(k))^{-1}$ существует при $|k - k_j| \leqslant \varepsilon$, что противоречит условию. Поэтому при $N > N_\varepsilon$ в круге $|k - k_j| \leqslant \varepsilon$ лежит хотя бы одно число k_j^N, что и требовалось доказать. Использованные при доказательстве соображения часто встречаются при обосновании применимости методов типа Галеркина — Ритца для вычисления спектра линейных операторов ([5], [6]).

3. Вычисление комплексных собственных частот открытых систем. Изложенный метод без всяких затруднений применим к задаче о расчете комплексных собственных частот (квазистационарных состояний) открытых систем призвольного вида. Например, пусть требуется вычислить эти частоты в задаче о внешних свободных колебаниях импедансного тела произвольной формы с поверхностью Г:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = 0 \text{ в } \Omega. \tag{10}$$

$$\partial\psi / \partial N - h\psi|_\Gamma = 0, \tag{11}$$

$$\psi \sim \frac{\exp(ik|x|)}{|x|} f(n), \quad |x| \to \infty, \quad \frac{x}{|x|} = n. \tag{12}$$

Если искать ψ в виде

$$\psi = \int_\Gamma G(x, y, k)\sigma(y)\,dy, \tag{13}$$

то подставляя это выражение в граничное условие (11), придем к уравнению

$$\sigma = Q\sigma, \tag{14}$$

где

$$Q\sigma \equiv \int_\Gamma \frac{\partial}{\partial N_t}\frac{\exp(ikr_{st})}{2\pi r_{ts}}\sigma(s)\,ds - h\int_\Gamma \frac{\exp(ikr_{st})}{2\pi r_{st}}\sigma(s)\,ds, \quad r_{st} = |s-t|. \tag{15}$$

Выберем полную ортонормированную в $H = L_2(\Gamma)$ систему функций $\{\Phi_j\}$. Полагая

$$\sigma_N = \sum_{j=1}^{N} c_j\Phi_j, \tag{16}$$

подставляя в равенство (14), умножая скалярно в H на Φ_i, придем к системе

$$\sum_{j=1}^{N} b_{ij}(k)\,c_j = 0, \quad b_{ij}(k) = \delta_{ij} - (Q\Phi_j, \Phi_i). \tag{17}$$

Отсюда следует характеристическое уравнение

$$\det b_{ij}(k) = 0. \tag{18}$$

Как и в п. 2 доказывается, что корни $k_j^{(N)}$ уравнения (18) при $N\to\infty$ сходятся к комплексным собственным частотам задачи (10)—(12) и что все эти частоты могут быть получены указанным образом. Если граничное условие (11) имеет вид

$$\psi|_\Gamma = 0, \tag{19}$$

то уравнение (14) примет вид

$$B\sigma \equiv \int_\Gamma \frac{\exp(ikr_{st})}{4\pi r_{st}}\sigma(s)\,ds = 0, \tag{20}$$

а уравнение (18) примет вид

$$\det \beta_{ij}(k) = 0, \tag{21}$$

причем $\beta_{ij}(k) \equiv (B\Phi_j, \Phi_i)$.

В литературе, по-видимому, отсутствовал метод расчета комплексных собственных частот для открытых систем произвольного вида, хотя для ряда конкретных систем были рассчитаны эти частоты с помощью приемов, использующих специфику геометрии изучаемой открытой системы.

В качестве иллюстративного примера рассмотрим внешние колебания проводящего шара. Эта задача решается точно с помощью разделения переменных ([7], стр. 324). Если в качестве функций Φ_j взять сферические функции, то уравнение (21) при $N \to \infty$ позволит вычислить точные значения комплексных собственных частот внешней задачи дифракции на проводящем шаре.

Заметим, что при практических расчетах не обязательно пользоваться ортонормированной системой функций. Вместо нее можно использовать полную линейно независимую систему функций. Сходимость k к квазистационарным состояниям (или комплексным собственным частотам) может быть доказана при подходящих предположениях (см. ([5])).

Автор выражает искреннюю благодарность акад. В. А. Фоку и проф. Х. Л. Смолицкому за внимание к работе, а также проф. Ю. Н. Демкову и Г. Ф. Друкареву и участникам их семинара в ЛГУ, где докладывалась работа.

Ленинградский институт
точной механики и оптики

Поступило
16 VI 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, Рассеяние реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, «Наука», 1966. [2] Р. Ньютон, Теория рассеяния волн и частиц, М., 1969. [3] А. Г. Рамм, ДАН, **166**, № 6, 1319 (1966). [4] А. Г. Рамм, Изв. АН АрмССР, Математика, **3**, № 6, 443 (1968). [5] М. А. Красносельский и др., Приближенное решение операторных уравнений, «Наука», 1969. [6] Л. В. Канторович, Г. П. Акилов, Функциональный анализ в нормированных пространствах, М., 1959. [7] Л. А. Вайнштейн, Открытые резонаторы и открытые волноводы, М., 1966. [8] Лазеры, Сборн. пер., М., 1963. [9] В. С. Булдырев, Э. С. Фрадкин, Оптика и спектроскопия, **17**, № 4, 583 (1964).