УДК 517.954

©2013. **В. П. Бурский, А. А. Зарецкая**

О СПЕКТРЕ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЯХ ОПЕРАТОРА ОБЩЕЙ ЭКВИВАРИАНТНОЙ ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧИ ВО ВНЕШНОСТИ ШАРА ДЛЯ ОПЕРАТОРА ШРЁДИНГЕРА С КУЛОНОВСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Рассмотрено уравнение Шредингера для водородоподобного атома с кулоновским потенциалом. Найдены собственные значения и функции в условиях поворотно-инвариантной граничной задачи во внешности шара.

Ключевые слова: *граничная задача, уравнение Шредингера.*

1. Введение. В данной работе найден спектр излучения водородоподобного атома с ядром нетривиального радиуса, который понимается как спектр оператора из названия статьи. Как правило, на решение уравнения Шредингера, то есть на волновую функцию, накладывают два ограничения – ограниченность в нуле и финитность на бесконечности ([7]). В настоящей статье на волновую функцию не ставятся ограничения в нуле, вместо этого поставлена некоторая поворотно-инвариантная граничная задача во внешности шара радиуса r_0. В других случаях, например, для нелинейных эволюционных уравнений Шредингера, краевые задачи были изучены во множестве работ ([1]–[2], [6], [8]–[9]). В данной работе рассмотрена внешняя общая эквивариантная граничная задача для уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом и получены собственные значения, то есть энергии излучения, и соответствующие собственные функции поставленной задачи. Отметим, что полученные значения энергий совпадают с энергиями излучения атома с ядром точечного размера.

2. Основной результат. Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера для частицы с массой M в поле кулонова потенциала с общей граничной задачей во внешности шара $K = \{x \in \mathbf{R}^3, |x| < r_0\}$:

$$(\triangle(x,y,z) + \frac{2M}{\hbar^2}(\frac{\mu^2}{r} + E))\psi(r,\varphi,\theta) = 0, \tag{1}$$

$$A\psi|_{\partial K} + B\psi'_\nu|_{\partial K} = 0. \tag{2}$$

Здесь $-\frac{\mu^2}{r}$ – потенциал, E – собственные значения, $\hbar$ – постоянная Дирака, $\psi(r,\varphi,\theta)$ – искомая волновая функция. Будем предполагать, что граничная задача (2) инвариантна относительно поворотов шара.

Рассмотрим квазирегулярное представление $T: \; G \to GL(L_2(S^{n-1}))$, $[T(g)f]\,(\xi) = f(g^{-1}\xi), f(\xi) \in L_2(S^{n-1}), \; g \in G$ группы Ли $G = SO(3)$. Как известно ([4], [5]), всякий линейный оператор в $L_2(S^2)$, перестановочный со всеми операторами $T(g)$ квазирегулярного представления, является свёрточным. Будем поэтому рассматривать граничные задачи вида

$$\alpha * \psi|_{\partial K} + \beta * \psi'_\nu|_{\partial K} = 0. \tag{3}$$

Здесь α, β – некоторые функции на сфере ∂K.

Найдем общее решение уравнения (1). Пусть в полярных координатах решение представляется в виде

$$\psi(r,\varphi,\theta) = \hat{C}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} R_{l,m}(r)Y_{l,m}(\varphi,\theta), \tag{4}$$

где $R_{l,m}(r)$ – неизвестная радиальная функция, а

$$Y_{l,m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta) \tag{5}$$

– сферические функции, собственные функции оператора квадрата момента импульса с собственными значениями $l(l+1), l = 0,1,2..\infty$, $P_l^m(\cos\theta)$ – присоединённые многочлены Лежандра. При подстановке (4) в (1) получаем следующее уравнение на радиальную часть волновой функции:

$$R''_{l,m} + \frac{2}{r}R'_{l,m} + R_{l,m}(-\frac{1}{r^2}l(l+1) + \frac{1}{r}\frac{2M\mu^2}{\hbar^2} + \frac{2ME}{\hbar^2}) = 0. \tag{6}$$

Будем искать решение уравнения (6) явно. Для этого сделаем замену в уравнении (6):

$$R_{l,m}(\rho) = \widehat{R}_{l,m}(\rho)\rho^l e^{-\rho/2}, \rho = 2nr. \tag{7}$$

И для удобства введем обозначение

$$\sqrt{\frac{-2ME}{\hbar^2}} = n, \tag{8}$$

будем рассматривать случай $E < 0$. Приходим к следующему уравнению:

$$\widehat{R}''_{l,m}\rho + \widehat{R}'_{l,m}(2l+2-\rho) + \widehat{R}_{l,m}(\frac{M\mu^2}{n\hbar^2} - l + 1) = 0. \tag{9}$$

Последнее уравнение – вырожденное гипергеометрическое уравнение с первым параметром $-\frac{M\mu^2}{n\hbar^2} + l - 1$ и со вторым параметром $2l+2$. Поэтому в терминах вырожденных гипергеометрических функций первого и второго рода получим

$$\begin{gathered}\widehat{R}_{l,m}(\rho) = C_1(l,m)\rho^l e^{-\rho/2}\Phi(l - \frac{M\mu^2}{n\hbar^2} - 1, 2l+2, \rho) + \\ + C_2(l,m)\rho^l e^{-\rho/2}\rho^{-2l-1}\Psi(-l - \frac{M\mu^2}{n\hbar^2} - 2, -2l, \rho).\end{gathered} \tag{10}$$

Исследуем поведение радиальной части волновой функции на бесконечности, используя уравнение (6). Пусть r принимает большие значения, тогда в уравнении (6) можно пренебречь некоторыми слагаемыми, а именно теми, которые умножаются на $\frac{1}{r}$ или на $\frac{1}{r^2}$. Получим уравнение $R'' + \frac{2ME}{\hbar^2}R = 0$, которое имеет одно финитное на бесконечности решение $R = e^{-nr}$. Значит, решение уравнения (6) на бесконечности должно вести себя примерно как e^{-nr}. Это значит, что функция $\Psi(-l - \frac{M\mu^2}{n\hbar^2} - 2, -2l, \rho)$ из (10) не должна расти на бесконечности слишком быстро. Однако, как известно ([3]), вырожденная гипергеометрическая функция растет как экспонента своего аргумента.

Для того, чтобы вырожденная гипергеометрическая функция первого рода в (10) не испортила поведения радиальной функции на бесконечности, нужно чтобы первый параметр был бы целым отрицательным

$$\Phi(\alpha,\beta,z) = 1 + \frac{\alpha}{\beta}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{z^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\beta(\beta+1)(\beta+2)}\frac{z^3}{3!} + ... \tag{11}$$

Как видно из определения вырожденной гипергеометрической функции (11), если первый параметр α будет целым отрицательным, то начиная с некоторого момента все слагаемые в ряде обнулятся и, таким образом, функция превратится в полином, а значит, будет иметь не очень большой рост на бесконечности. Обозначим целое отрицательное значение первого параметра первой вырожденной гипергеометрической функции в (10) $-\frac{M\mu^2}{n\hbar^2} + l - 1 = -k + l - 1$. Ясно, что k, главное квантовое число, может быть любым целым положительным числом, $k \geq l-1, k > 0$. Значит, $n = \frac{M\mu^2}{\hbar^2 k}$.

Посмотрим, как ведет себя функция $\Psi(-l-k-2,-2l,x)$ на бесконечности ([3])

$$\begin{aligned}&\Psi(-l-k-2,-2l,x) \approx \\ &\approx \sum_{p=0}^{N}(-1)^p\frac{(-l-k-2)_p(-k+l-1)_p}{p!}x^{k-l-p} + O(|x|^{k-l-N-1}).\end{aligned} \tag{12}$$

Из последнего равенства видно, что функция на бесконечности ведет себя как полином.

Возвращаясь к (8) можно увидеть, что значения энергий будут таковы:

$$E_k = \frac{-M\mu^4}{2\hbar^2k^2},\ k = \overline{1..\infty}. \tag{13}$$

Замечание. Отметим, что в данном случае энергия обратно-пропорционально зависит от квадрата главного квантового числа, так же как и в случае ограниченности волновой функции в нуле.

Полином, полученный из вырожденной гипергеометрической функции первого рода, связан с полиномами Лагерра. Решение (10) с помощью полиномов Лагерра можно переписать так:

$$\begin{aligned}\widehat{R}_{l,m}(\rho) = C_1(l,m)\rho^l e^{-\rho/2}\frac{(k-l+1)!}{(2l+2)_{k-l+1}}L^{2l+1}_{k-l+1}(\rho)+\\ +C_2(l,m)\rho^l e^{-\rho/2}\rho^{-2l-1}\Psi(-l-\frac{M\mu^2}{n\hbar^2}-2,-2l,\rho).\end{aligned} \tag{14}$$

Вернемся к общей граничной задаче

$$\psi|_{\partial K} * \alpha + \psi'_\nu|_{\partial K} * \beta = 0. \tag{15}$$

Пусть

$$\alpha = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\alpha_l^m Y_{l,m}, \quad \beta = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\beta_l^m Y_{l,m} \tag{16}$$

– функции, разложенные в ряды Фурье, $*$ – свертка на ∂K.

$$\psi_k|_{\partial K} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{k,l}^m Y_{l,m}, \quad \psi'_{k\nu}|_{\partial K} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} b_{k,l}^m Y_{l,m}, \tag{17}$$

то есть

$$\psi_k|_{\partial K} * \alpha = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{k,l}^m \alpha_l^1 Y_{l,m}. \tag{18}$$

Граничная задача (15) в терминах коэффициентов Фурье для каждого k запишется в виде

$$a_{k,l}^m\alpha_l^1 + b_{k,l}^m\beta_l^1 = 0. \tag{19}$$

При этом

$$a_{k,l}^m = \widehat{R}_{k,l,m}|_{\rho=\rho_0}, \quad b_{k,l}^m = \frac{1}{\rho_0}\frac{\partial \widehat{R}_{k,l,m}(\rho)}{\partial\rho}\Bigg|_{\rho=\rho_0}, \tag{20}$$

$$\begin{aligned}a_{k,l}^m = C_1(k,l,m)\rho_0^{2l+3}\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)+\\ + C_2(k,l,m)\rho_0^2\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0),\end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}b_{k,l}^m = C_1(k,l,m)\rho_0^{2l+1}(l\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0) - 1/2\rho_0\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)+\\ +\rho_0\frac{l-k-1}{2l+2}\Phi(l-k,2l+3,\rho_0)) + C_2(k,l,m)((-l-1)\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0)-\\ -1/2\rho_0\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0) + \rho_0(l+k+2)\Psi(-k-l-1,-2l+1,\rho_0)).\end{aligned} \tag{22}$$

Граничная задача, таким образом, может быть записана так:

$$\{C_1(k,l,m)\rho_0^{2l+3}\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)+C_2(k,l,m)\rho_0^2\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0)\}\alpha_l^1+$$
$$+\{C_1(k,l,m)\rho_0^{2l+1}(l\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)-1/2\rho_0\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)+$$
$$+\rho_0\frac{l-k-1}{2l+2}\Phi(l-k,2l+3,\rho_0))+C_2(k,l,m)((-l-1)\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0)-$$
$$-1/2\rho_0\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0)+\rho_0(l+k+2)\Psi(-k-l-1,-2l+1,\rho_0))\}\beta_l^1=0. \tag{23}$$

Будем считать, что $C_2(k,l,m)\equiv 1$, так равенство (15) можно разделить и умножить на любое число. Из последнего равенства можем выразить $C_1(k,l,m)$

$$C_1(k,l,m)=-\frac{((-l-1)\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0)-1/2\rho_0\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0)+}{\left(\rho_0^{2l+1}l\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)-1/2\rho_0^{2l+2}\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)+\right.}$$
$$\frac{+\rho_0(l+k+2)\Psi(-k-l-1,-2l+1,\rho_0))\,\beta_l^1+\rho_0^2\Psi(-k-l-2,-2l,\rho_0)\alpha_l^1}{\left.+\rho_0^{2l+2}\frac{l-k-1}{2l+2}\Phi(l-k,2l+3,\rho_0)\right)\beta_l^1+\rho_0^{2l+3}\Phi(l-k-1,2l+2,\rho_0)\alpha_l^1}. \tag{24}$$

Теперь оставшуюся неизвестную константу $\widehat{C}(k,l,m)$ находим из нормировочного условия
$$\int_{\rho_0}^{\infty}|\psi_k(\rho,\varphi,\theta)|^2\rho d\rho=1. \tag{25}$$

Теорема. *Собственные значения и соответствующие собственные функции задачи (1), (2) в вышеизложенных обозначениях, выглядят следующим образом:*

$$E_k=\frac{-M\mu^4}{2\hbar^2k^2},\ k=\overline{1..\infty},$$

$$\psi_k(r,\varphi,\theta)=\hat{C}\sum_{l=0}^{k}\sum_{m=-l}^{l}(C_1(k,l,m)(2nr)^le^{-nr}\Phi(l-k-1,2l+2,2nr)+$$
$$+(2nr)^{-l-1}e^{-nr}\Psi(-l-k-2,-2l,2nr))Y_{l,m}(\varphi,\theta).$$

1. *Бибиков П.Н., Тарасов В.О.* Краевая задача для нелинейного уравнения Шредингера // Теор. и мат. физика. – 1989. – Вып. 3. – С. 334–346.
2. *Бикбаев Р.Ф., Итс А.Р.* Алгеброгеометрические решения краевой задачи для нелинейного уравнения Шредингера // Мат. заметки. – 1989. – Вып. 5. – С. 3–9.
3. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Гипергеометрическая функция. Функции Лежандра. – М.: Наука, 1965. – 296 с.
4. *Бурский В.П.* Методы исследования граничных задач. – Киев.: Наукова думка, 2002. – 315 с.
5. *Виленкин Н.Я.* Специальные функции и теория представления групп. – М.: Наука, 1991. – 576 с.
6. *Владимиров М.В.* Разрешимость смешанной задачи для нелинейного уравнения Шрёдингера // Мат. сборник. – 1986. – Вып. 4. – С. 520–536.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989. – 757 с.

8. *Мазепа Е.А.* Краевые задачи для стационарного уравнения Шредингера на римановых многообразиях // Сибирский математический журнал. – 2002. – Вып. 3. – С. 591–599.
9. *Махмудов Н.М.* Разрешимость краевых задач для уравнения Шредингера с чисто мнимым коэффициентом // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика. – 2011. – Вып. 1. – С. 31–38.

V. P. Burskii, A. A. Zaretskaya

On the spectrum and eigenfunctions of the equivariant general boundary value problem outside the sphere for the Schrödinger operator with Coulomb potential.

We consider the Schrödinger equation of hydrogen-type atom with Coulomb potential. The eigen-value and eigen-function are found in the case of swing-invariant boundary value problem.

Keywords: *boundary value problem, the Schrödinger equation.*

В. П. Бурський, А. О. Зарецька

Про спектр і власні функції оператора загальної еквіваріантної граничної задачі у зовнішності кулі для оператора Шредінгера з кулонівським потенціалом.

Розглянуто рівняння Шредінгера для воднеподібного атома з кулонівським потенціалом. Знайдено власні значення і функції в умовах поворотно-інваріантної граничної задачі у зовнішності кулі.

Ключові слова: *гранична задача, рівняння Шредінгера.*

Ин-т прикл. математики и механики НАН Украины, Донецк
seerall@mail.ru
Получено 12.12.13