Задача рассеивания для одного уравнения Шредингера

Л. П. Нижник

Уравнение Шредингера для частицы с массой m и зарядом e, движущейся в электромагнитном поле с потенциалами $\mathbf{A}$ и φ, при наличии добавочной потенциальной энергии V записывается так (см., напр., [1], стр. 284):

$$ih\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+\frac{ieh}{mc}\mathbf{A}\cdot\operatorname{grad}+\frac{ieh}{2mc}(\operatorname{div}\mathbf{A})+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2+e\varphi+V\right]\psi, \quad \text{(I)}$$

где h — постоянная Планка, а c — скорость света.

В случае, когда $\mathbf{A}$, φ и V не зависят от времени, уравнение (I) сводится разделением переменных к следующему стационарному уравнению Шредингера:

$$-\Delta\psi(x)+i\vec{a}(x)\cdot\operatorname{grad}\psi(x)+c(x)\psi(x)=k^2\psi(x). \quad \text{(II)}$$

Здесь x обозначает точку трехмерного евклидова пространства E^3, $c(x)=c_1(x)+\frac{i}{2}\operatorname{div}\vec{a}(x)$, а k — импульс частицы. Функции $c_1(x)$ и $\vec{a}(x)$ — вещественные, и поэтому дифференциальный оператор $-\Delta+i\vec{a}\cdot\operatorname{grad}+c$ является формально самосопряженным.

Задача квантовой теории рассеивания ставится следующим образом: требуется найти решение уравнения (II), имеющее вид $\psi(x)=e^{ik\mu\cdot x}+v(x)$, где μ — заданный единичный вектор в E^3, а $v(x)$ удовлетворяет условиям излучения

$$|x|v(x)=O(1)\,|\operatorname{grad}v(x)|=O(1),\ |x|\left(\frac{\partial v(x)}{\partial|x|}-ikv(x)\right)=O(1) \quad \text{(III)}$$

($|x|$ обозначает расстояние точки x от начала координат).

В настоящей заметке показано, что при определенных условиях малости на бесконечности, наложенных на коэффициенты $\vec{a}(x)$ и $c(x)$, задача рассеивания имеет единственное решение. Эта заметка является обобщением работы А. Я. Повзнера [2], где решена задача рассеивания в случае $\vec{a}=0$.

Всюду в дальнейшем будем считать, что $\vec{a}(x)$ и $c(x)$ обладают непрерывными первыми производными и $|\vec{a}(x)|=O\left(\frac{1}{|x|^{3+\varepsilon}}\right)$, $|c(x)|=O\left(\frac{1}{|x|^{3+\varepsilon}}\right)$, где $\varepsilon>0$.

Обозначим через Φ_1 пространство Банаха с нормой

$$\|\varphi\|_1=\max\left\{\sup_{x\in E^3}|\varphi(x)|,\ \sup_{x\in E^3}|\operatorname{grad}\varphi(x)|\right\}.$$

Лемма 1. *Задача рассеивания для уравнения* (II) (*задача нахождения функции* $v(x)$) *эквивалентна задаче нахождения решений уравнения* $w(x) = Ie^{ik\mu\cdot x} + Iw(x)$ *в пространстве* Φ_1. I *обозначает оператор*

$$If(x) = -\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ik|x-x_1|}}{|x-x_1|}[i\vec{a}(x_1)\cdot\operatorname{grad} + c(x_1)]f(x_1)\,dx_1.$$

Действительно, пусть существует решение $\psi(x) = e^{ik\mu\cdot x} + v(x)$ уравнения (II). Тогда $(\Delta + k^2)v(x) = [i\vec{a}\cdot\operatorname{grad} + c]\psi(x)$. Так как $v(x)$ удовлетворяет условиям излучения, то (см. [3], стр. 503)

$$v(x) = -\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ik|x-x_1|}}{|x-x_1|}[i\vec{a}(x_1)\cdot\operatorname{grad} + c(x_1)]\psi(x_1)\,dx_1,$$

т. е. $v(x)$ удовлетворяет уравнению $v(x) = Ie^{ik\mu\cdot x} + Iv(x)$. Наоборот, решение уравнения $w(x) = Ie^{ik\mu\cdot x} + Iw(x)$ в пространстве Φ_1 дважды непрерывно дифференцируемо (так как дважды непрерывно дифференцируем свободный член $Ie^{ik\mu\cdot x}$, а оператор I улучшает свойство дифференцируемости) и удовлетворяет условиям излучения. Функция $e^{ik\mu\cdot x} + w(x)$ удовлетворяет уравнению (II) и поэтому является решением задачи рассеивания.

Таким образом, мы пришли к необходимости исследования уравнения $w - Iw = g$ в пространстве Φ_1.

Лемма 2. *Оператор* I *вполне непрерывный в пространстве* Φ_1.

На основании свойств объемного потенциала (см. [4], стр. 100) следует, что если $f\in\Phi_1$, то функция If вместе с первыми производными правильно непрерывна во всем пространстве и равномерно стремится к нулю при $|x|\to\infty$. Полная непрерывность оператора I следует тогда из теоремы Арцела.

Из общей теории уравнений в банаховых пространствах известно, что для разрешимости уравнения $w - Iw = g$ при любой правой части g и единственности решения необходимо и достаточно, чтобы однородное уравнение $Iw = w$ имело только тривиальное решение $w = 0$.

Лемма 3. *При* $\varepsilon > 2$ *решения уравнения* $If = f$ *из пространства* Φ_1 *принадлежат* L_2.

Доказательство. Пусть $f(x)\in\Phi_1$ является решением уравнения $If = f$, тогда $f(x)$ удовлетворяет уравнению (II), которое после разделения вещественной и мнимой частей сводится к следующим равенствам:

$$\begin{aligned}&-\Delta f_1 - \vec{a}\cdot\operatorname{grad} f_2 + c_1 f_1 - \frac{1}{2}(\operatorname{div}\vec{a})f_2 - k^2 f_1 = 0\\&-\Delta f_2 + \vec{a}\cdot\operatorname{grad} f_1 + c_1 f_2 + \frac{1}{2}(\operatorname{div}\vec{a})f_1 - k^2 f_2 = 0\end{aligned}\tag{IV}$$

где $f_1(x) = \operatorname{Re} f(x)$ и $f_2(x) = \operatorname{Im} f(x)$. Умножая первое из равенств (IV) на f_2, а второе — на f_1 и вычитая из первого второе, получаем: $\Delta f_2\cdot f_1 - f_2\cdot\Delta f_1 - \frac{1}{2}\operatorname{div}[\vec{a}\cdot(f_1^2 + f_2^2)] = 0$. Если проинтегрировать последнее равенство по шару радиуса r, а потом воспользоваться формулой Грина и свести объемные интегралы к поверхностным, то получим

$$\int\limits_{S_r}\left(\frac{\partial f_2}{\partial r}f_1 - \frac{\partial f_1}{\partial r}f_2\right)d\sigma - \frac{1}{2}\int\limits_{S_r}|f(x)|^2\vec{a}(x)\cdot\vec{n}\,d\sigma = 0.$$

где Sr — сфера радиуса r, а $\vec{n}$ — орт нормали. Так как $|\vec{a}(x)|$ достаточно быстро убывает при $r = |x|\to\infty$, а функция $|f(x)|$ ограничена, то

$\int\limits_{S_r} |f(x)|^2 \vec{a}(x)\cdot \vec{n} d\sigma \to 0$ при $r \to \infty$. Поэтому

$$\lim_{r\to\infty} \int\limits_{S_r} \left(\frac{\partial f_2}{\partial r} f_1 - \frac{\partial f_1}{\partial r} f_2 \right) d\sigma = 0. \tag{V}$$

Функция $f(x)$ является решением уравнения $If = f$ и поэтому удовлетворяет условиям излучения.

Следовательно, $\lim\limits_{r\to\infty} r \left(\frac{\partial f}{\partial r} - ikf \right) = 0$, или, разделяя вещественную и мнимую части, имеем:

$$\lim_{r\to\infty} r \left(\frac{\partial f_1}{\partial r} + kf_2 \right) = 0. \ \lim_{r\to\infty} r \left(\frac{\partial f_2}{\partial r} - kf_1 \right) = 0. \tag{VI}$$

Перепишем равенство V в виде

$$\lim_{r\to\infty} \left[\int\limits_{S_r} \left(\frac{\partial f_2}{\partial r} - kf_1 \right) f_1 d\sigma - \int\limits_{S_r} \left(\frac{\partial f_1}{\partial r} + kf_2 \right) f_2 d\sigma + k \int\limits_{S_r} (f_1^2 + f_2^2)\, d\sigma \right] = 0. \tag{VII}$$

Так как $f = If$, то на основании леммы 1 (гл. II, работы [2])

$$f(x) = \frac{e^{ik|x|}}{|x|} \int e^{-ikx\cdot s} \rho(s)\, ds + O\left(\frac{1}{|x|^{1+\frac{\varepsilon}{2+\varepsilon}}} \right),$$

где $\rho(x) = -\frac{1}{4\pi} [i\vec{a}(x)\cdot \mathrm{grad} + c(x)] f(x)$, и поэтому $|\rho(x)| = O\left(\frac{1}{|x|^{3+\varepsilon}} \right)$.

Используя в равенстве (VII) это асимптотическое представление и условия (VI), получаем, что $\lim\limits_{r\to\infty} \int\limits_{S_r} |f(x)|^2 d\sigma = 0$, т. е. $|f(x)| = O\left(\frac{1}{|x|^{1+\frac{\varepsilon}{2+\varepsilon}}} \right)$.

При $\varepsilon > 2$ $|f(x)| = O\left(\frac{1}{|x|^{3/2+\delta}} \right)$, где $\delta > 0$, и, следовательно, $f(x) \in L_2$.

Нетривиальное решение уравнения $If = f$ является решением уравнения (II) и на основании леммы 3 является собственной функцией оператора $-\Delta + i\vec{a}\cdot \mathrm{grad} + c$ с собственным значением k^2. Поэтому итогом лемм 1—3 может служить следующая.

Теорема. *Если отсутствует положительный дискретный спектр дифференциального оператора* $-\Delta + i\vec{a}\cdot \mathrm{grad} + c$, *то существует и единственное решение задачи рассеивания для уравнения* (II)

Займемся теперь вопросом, при каких условиях отсутствует положительный дискретный спектр уравнения (II).

Пусть $\vec{a}(x) = 2\mathrm{grad}\, U(x)$ и $\psi(x)$ — решение уравнения (II), тогда $\varphi(x) = \psi(x) e^{-iU(x)}$ удовлетворяет уравнению

$$-\Delta\varphi + [c_1 - (\mathrm{grad}\, U)^2]\varphi = k^2\varphi, \tag{VIII}$$

т. е. дискретный положительный спектр уравнения (II) совпадает с дискретным положительным спектром уравнения (VIII). На основании работы [6] можно утверждать, что положительный дискретный спектр уравнения (II) отсутствует.

Пусть $\vec{a}(x) = 0$ при $|x| > d$. В этом случае также можно утверждать, что положительный дискретный спектр уравнения (II) отсутствует. Действительно, пусть $\lambda = k^2$ будет точкой дискретного спектра уравнения (II), тогда отвечающая ей собственная функция $d(x)$ при $|x| > d$ удовлетворяет уравнению $-\Delta f + cf = \lambda f$ и, на основании [6], $f(x) = 0$ при $|x| > d$.

Но тогда $f(x)=0$ и при $|x|<d$, что следует из единственности задачи Коши для уравнения (II) (см. [5].) Таким образом, $f(x)\equiv 0$. Это противоречит допущению, что $f(x)$ собственная функция.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Шифф, Квантовая механика, Изд-во ИЛ, М., 1957.
2. А. Я. Повзнер, О разложении по собственным функциям оператора $-\Delta u+cu$, Матем. сб., т. 32, в. 1, 1953.
3. А. П. Тихонов и А. А. Самарский, Уравнения математической физики, Гостехиздат, 1951.
4. Н. М. Гюнтер, Теория потенциала, Гостехиздат, 1953.
5. Е. М. Ландис, О некоторых свойствах решений эллиптических уравнений, ДАН СССР, 107, № 5, 1956.
6. Т. Kato, Comm. Pure Appl. Math., 12, 1959.

Поступила 5. IX 1959 г.
Киев