УДК 530.145.6

Об особенности функции Грина оператора Шрёдингера с потенциалами, сингулярными в начале координат

С. Л. Яковлев, В. А. Градусов

Кафедра вычислительной физики
Санкт-Петербургский государственный университет
Университетская наб., д. 7/9, Санкт-Петербург, Россия, 199034

Исследуется асимптотика при $\boldsymbol{r} \to 0$ функции Грина оператора Шрёдингера $-\Delta + V(\boldsymbol{r})$ с короткодействующим потенциалом V произвольной формы, имеющим особенность в начале координат вида $r^{-\rho}$ с $\rho > 0$. Под короткодействием потенциала понимается убывание на бесконечности, более быстрое, чем убывание Кулоновского потенциала. Исследование производится при помощи интегрального уравнения Липпманна–Швингера для функции Грина в координатном представлении. Показано, что для описания асимптотики необходимо различить три случая в зависимости от значения параметра потенциала ρ. Если особенность потенциала слабее чем кулоновская, то асимптотика функции Грина имеет стандартное сингулярное поведение, именно особенность вида r^{-1}. В случае особенности потенциала вида $r^{-\rho}$ с $1 \leqslant \rho < 2$ в асимптотике функции Грина возникает дополнительная сингулярность. В случае $\rho = 1$ дополнительная логарифмическая сингулярность имеет ту же форму, что и в случае кулоновского потенциала. В случае $1 < \rho < 2$ дополнительная сингулярность имеет вид полярной особенности вида $r^{-\rho+1}$. Во всех перечисленных случаях сингулярные члены асимптотических разложений выражены в явном виде через параметры потенциала V, определяющие его поведение в начале координат. Исследованная проблема имеет ряд интересных приложений в физике, в частности она имеет важное значение в теории потенциалов нулевого радиуса.

Ключевые слова: теория рассеяния, функция Грина, сингулярные потенциалы, координатные асимптотики.

1. Введение

В работе мы изучаем свойства функции Грина $G(z) = (H - z)^{-1}$, где $z \in \mathbb{C}$, оператора Шрёдингера H, которые нужны для вычисления асимптотического поведения ядра $G^{+}(\boldsymbol{r}, 0, k^2) = \lim_{\varepsilon \to \infty} G(\boldsymbol{r}, 0, k^2 + \mathrm{i}\varepsilon)$ при $\boldsymbol{r} \to 0$ функции Грина в координатном представлении. Предполагается, что H имеет вид

$$H = -\Delta + V(\boldsymbol{r}), \tag{1}$$

где Δ обозначает лапласиан по переменной $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3$. В данной работе мы рассматриваем трёхмерное конфигурационное пространство, а случай произвольной размерности $d > 1$ может быть исследован аналогично.

Предполагается, что $V(\boldsymbol{r})$ является короткодействующим потенциалом, т.е. вещественнозначной гладкой функцией при всех $r \equiv |\boldsymbol{r}| > 0$ и убывает асимптотически как $V(\boldsymbol{r}) \propto r^{-1-\delta}, \quad \delta > 1$ [1] при $r \to \infty$. Более точно, мы предполагаем существование константы $\mathrm{C} > 0$ такой, что неравенство

$$|V(\boldsymbol{r})| \leqslant C(1 + r)^{-1-\delta}, \quad \delta > 1 \tag{2}$$

выполнено при всех $\boldsymbol{r}$ кроме малой окрестности точки $\boldsymbol{r} = 0$. Особый интерес для данной работы представляет сингулярное поведение потенциала $V(\boldsymbol{r}) \propto r^{-\rho}$ при

Статья поступила в редакцию 9 ноября 2013 г.

Данная работа частично поддержана СПбГУ в рамках проекта 11.0.78.2010 и Министерством образования и науки РФ в рамках проекта 2012-1.5-12-000-1003-016.

[1] Условие на δ может быть ослаблено до $\delta > 0$. Тем не менее, в данной работе используется более сильное условие $\delta > 1$, поскольку оно гарантирует абсолютную сходимость возникающих ниже интегралов

$r \to 0$. Более точно, мы предполагаем, что в окрестности начала координат $\boldsymbol{r} = 0$ потенциал $V(\boldsymbol{r})$ может быть представлен в виде

$$V(\boldsymbol{r}) = r^{-\rho} W(\boldsymbol{r}), \tag{3}$$

где $W(\boldsymbol{r})$ есть гладкая ограниченная функция, имеющая конечный предел

$$\lim_{r \to 0} W(\boldsymbol{r}) = V_0. \tag{4}$$

В дальнейшем этот класс потенциалов будет обозначаться $\mathfrak{V}(\rho, \delta)$. Для самосопряжённости H достаточно потребовать $\rho < 2$, и везде далее будем считать, что это условие выполнено.

Заметим, что асимптотика функции Грина $G^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2)$ при $\boldsymbol{r} \to 0$ имеет определяющее значение при построении формализма потенциалов нулевого радиуса [1]. В нашей недавней работе [2] при помощи явного вида кулоновской функции Грина было показано, как стандартный формализм потенциала нулевого радиуса необходимо модифицировать в случае частиц, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала.

В данной работе мы подробно описываем сингулярную часть асимптотики функции Грина $G^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2)$ оператора Шрёдингера с потенциалом класса $\mathfrak{V}(\rho, \delta)$ при $\boldsymbol{r} \to 0$. При этом возникают три различных случая $0 < \rho < 1$, $\rho = 1$ и $1 < \rho < 2$. Если $0 < \rho < 1$, сингулярная часть асимптотики имеет стандартный вид r^{-1}. В случае $\rho = 1$ появляется дополнительная сингулярность, которая имеет вид слагаемого с логарифмической особенностью. В случае $1 < \rho < 2$ дополнительная сингулярность имеет вид полярной особенности вида $r^{-\rho+1}$.

2. Асимптотика функции Грина

Функция Грина определяется как решение неоднородного уравнения

$$\left[-\Delta + V(r) - k^2\right] G^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, k^2) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}). \tag{5}$$

Она удовлетворяет также интегральному уравнению Липпманна–Швингера

$$G^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, k^2) = G_0^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, k^2) - \int \mathrm{d}\boldsymbol{q} G_0^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q}, k^2) V(\boldsymbol{q}) G^+(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r'}, k^2), \tag{6}$$

где

$$G_0^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r'}, k^2) = \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}|)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r'}|}, \tag{7}$$

которое в случае $V \in \mathfrak{V}(\rho, \delta)$ имеет единственное решение [3,4] и полностью определяет функцию Грина G^+. Поскольку мы хотим определить асимптотику в нуле, положим $\boldsymbol{r'} = 0$ и проитерируем (6) один раз, что приводит к

$$\begin{aligned} G^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2) = G_0^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2) - \int \mathrm{d}\boldsymbol{q} G_0^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q}, k^2) V(\boldsymbol{q}) G_0^+(\boldsymbol{q}, 0, k^2) + \\ + \int \mathrm{d}\boldsymbol{q} G_0^+(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{q}, k^2) V(\boldsymbol{q}) \int \mathrm{d}\boldsymbol{q'} G_0^+(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{q'}, k^2) V(\boldsymbol{q'}) G^+(\boldsymbol{q'}, 0, k^2). \end{aligned} \tag{8}$$

Теперь последовательно рассмотрим поведение в нуле слагаемых в правой части. Асимптотика первого слагаемого при $r \to 0$ очевидна

$$G_0^+(\boldsymbol{r},0,k^2)=\frac{1}{4\pi r}+\frac{\mathrm{i}k}{4\pi}+\mathcal{O}(r). \tag{9}$$

Для вычисления второго слагаемого из (8) полезно разбить интеграл на две части, чтобы разделить вклады подынтегрального выражения в начале координат и на бесконечности. Рассмотрим интегралы

$$I_j(\boldsymbol{r})=\int\limits_{\Omega_j}\mathrm{d}\boldsymbol{q}G_0^+(\boldsymbol{r},\boldsymbol{q},k^2)V(\boldsymbol{q})G_0^+(\boldsymbol{q},0,k^2) \tag{10}$$

по областям $\Omega_j\in\mathbb{R}^3$, определённым согласно $\Omega_{1(2)}=\{\boldsymbol{q}: q<(>)r_0\}$. В качестве радиуса r_0 можно выбрать любое конечное положительное число, отделённое от нуля, оно будет указано нами ниже.

В интеграле $I_1(\boldsymbol{r})$ для функций Грина, входящих в подынтегральное выражение, можно воспользоваться формулой Тейлора с точностью до квадратичных членов

$$G_0^+(\boldsymbol{r},\boldsymbol{q},k^2)=1/(4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}|)+\mathrm{i}k/(4\pi)+\mathcal{O}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}|^2) \tag{11}$$

и аналогичным выражением, в котором $\boldsymbol{r}$ положено равным 0 для $G_0^+(\boldsymbol{q},0,k^2)$. Пусть r_0 выбрано таким образом, что для потенциала $V(\boldsymbol{q})$ в Ω_1 можно использовать формулу (3) и функцию $W(\boldsymbol{q})$ представить по формуле Тейлора в виде

$$W(\boldsymbol{q})=V_0+\boldsymbol{q}\cdot\nabla W(0)+\mathcal{O}(q^2). \tag{12}$$

Тогда наиболее сингулярный член $I_1(\boldsymbol{r})$ при $r\to0$ получится подстановкой в (10) с $j=1$ главных членов разложений подынтегральных сомножителей, определённых в (11) и (12). Это приводит к интегралу

$$I_1^s(\boldsymbol{r})=V_0/(4\pi)^2\int\limits_{\Omega_1}\mathrm{d}\boldsymbol{q}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}|^{-1}q^{-\rho-1}. \tag{13}$$

Поскольку мы интересуемся поведением данного интеграла при $r\to0$, мы можем считать $r<r_0$. В этом случае вычисление интеграла в (13) легко выполняется при помощи формулы

$$\frac{1}{|\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}'|}=\frac{1}{q_>}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{q_<^{\ell}}{q_>^{\ell}}P_\ell\left(\hat{\boldsymbol{q}}\cdot\hat{\boldsymbol{q}}'\right), \tag{14}$$

где P_ℓ — полином Лежандра и как обычно $q_>=\max\{q,q'\}$ и $q_<=\min\{q,q'\}$. Под скалярным произведением здесь понимается скалярное произведение векторов в $\mathbb{R}^3$. Получаем два случая, именно если $\rho\neq1$

$$I_1^s(\boldsymbol{r})=\frac{V_0}{4\pi(2-\rho)(\rho-1)}r^{-\rho+1}+\frac{V_0}{4\pi(1-\rho)}r_0^{-\rho+1}, \tag{15}$$

если же $\rho=1$, интеграл I_1^s равен

$$I_1^s(\boldsymbol{r})=-\frac{V_0}{4\pi}\log(r)+\frac{V_0}{4\pi}[1+\log(r_0)]. \tag{16}$$

Из (15) видно, что если $1<\rho<2$, тогда I_1^s имеет полярную сингулярность $r^{-\rho+1}$, если же $\rho<1$, первое слагаемое в (15) исчезает при $r\to0$ и I_1^s регулярен и имеет конечный предел. Из приведённого анализа интеграла (13) ясно, что учёт менее сингулярных членов разложений подынтегральных функций в $I_1(\boldsymbol{r})$ даст несингулярные вклады при $r \to 0$.

Рассмотрим теперь интеграл $I_2(\boldsymbol{r})$. Для абсолютного значения $I_2(\boldsymbol{r})$ легко получить неравенство

$$|I_2(\boldsymbol{r})| \leqslant \frac{1}{(4\pi)^2} \int\limits_{\Omega_2} \mathrm{d}\boldsymbol{q} \frac{|V(\boldsymbol{q})|}{q|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}|}. \tag{17}$$

Предположим теперь, что r_0 выбран таким образом, что неравенство (2) можно применять при $q > r_0$, тогда с помощью (14) правая часть (17) может быть оценена следующим образом

$$\int\limits_{\Omega_2} \mathrm{d}\boldsymbol{q} \frac{|V(\boldsymbol{r})|}{q|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{q}|} \leqslant C \int\limits_{r_0}^{\infty} \mathrm{d}q (1+q)^{-1-\delta}. \tag{18}$$

Поскольку последний интеграл сходится, то интеграл $I_2(\boldsymbol{r})$ равномерно ограничен при всех $\boldsymbol{r}$ таких, что $r < r_0$.

Остаётся оценить последнее слагаемое в (8). Внутренний интеграл по $\boldsymbol{q'}$ по своей структуре аналогичен рассмотренным выше интегралам, если $G^+(\boldsymbol{q'}, 0, k^2)$ заменить на $G_0^+(\boldsymbol{q'}, 0, k^2)$. В этом случае внутренний интеграл как функция $\boldsymbol{q}$ может иметь сингулярность не сильнее чем $q^{-\rho+1}$. Как было показано выше, такая сингулярность подынтегрального выражения во внешнем интеграле по $\boldsymbol{q}$ приводит к несингулярному поведению результата интегрирования как функции $\boldsymbol{r}$ в окрестности точки $\boldsymbol{r} = 0$. Используя итерационные аргументы, этот результат можно распространить на случай подынтегрального выражения в (8) [4]. Таким образом, последнее слагаемое в (8) имеет конечный предел при $r \to 0$.

Объединяя результаты, полученные в данном разделе, сформулируем окончательное утверждение о поведении функции $G^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2)$ при $r \to 0$: в случае $1 < \rho < 2$ имеет место представление

$$G^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2) = \frac{1}{4\pi} \left[1/r + A_0/r^{\rho-1}\right] + B_1 + o(1), \tag{19}$$

в случае $\rho = 1$ справедливо равенство

$$G^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2) = \frac{1}{4\pi} \left[1/r + V_0 \log(r)\right] + B_2 + o(1), \tag{20}$$

и в случае $\rho < 1$ поведение функции Грина имеет стандартный характер

$$G^+(\boldsymbol{r}, 0, k^2) = \frac{1}{4\pi r} + B_3 + o(1). \tag{21}$$

Здесь константа A_0 даётся выражением

$$A_0 = \frac{V_0}{(2-\rho)(1-\rho)}$$

и все конечные вклады от соответствующих интегралов обозначены B_j, $j = 1, 2, 3$.

3. Заключение

Мы показали, что функция Грина оператора Шрёдингера с потенциалом, имеющим в нуле сингулярность вида $\mathcal{O}(r^{-\rho})$, обладает дополнительной сингулярностью вида $\mathcal{O}(r^{-\rho+1})$, кроме случая $\rho = 1$, в котором возникает логарифмическая сингулярность. Мы рассмотрели класс потенциалов $\mathfrak{V}(\rho, \delta)$ с $\rho < 2$ и $\delta > 1$. Такой выбор параметров не является критическим, особенно это касается δ. С небольшими изменениями теория может быть обобщена на случай более слабого условия $\delta > 0$, для чего необходимо получить более тонкие оценки интеграла I_2, оперируя с неабсолютно сходящимися интегралами. Мы не приводим здесь этого анализа во избежание чрезмерного увеличения объёма статьи.

Литература

1. Solvable Models in Quantum Mechanics / S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, H. Holden. — Providence, RI: AMS Chelsea Publishing, 2005.
2. *Yakovlev S. L., Gradusov V. A.* Zero-Range Potential for Particles Interacting Via Coulomb Potential // J. Phys. A. — 2012. — Vol. 46. — P. 035307.
3. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. — Москва: Мир, 1969. [Newton R. G. Scattering Theory of Waves and Particles. — New York: Springer-Verlag, 1982. — (in russian).]
4. *Повзнер А. Я.* О разложении произвольных функций по собственным функциям оператора $-\Delta u + cu$ // Матем. сб. — 1953. — Т. 32(74). — С. 109–156. [Povzner A. Ya. On the Expansion of Arbitrary Functions in Characteristic Functions of the Operator $-\Delta u + cu$ // Matem. Sbornik. — 1953. — Vol. 32(74). — P. 109–156. — (in russian).]

UDC 530.145.6

Singularities of the Green Function for the Schrödinger Operator with a Potential, Singular at the Origin

S. L. Yakovlev, V. A. Gradusov

Department of computational physics
St. Petersburg University
7/9 Universitetskaya embankment, St. Petersburg, Russia, 199034

We study the asymptote $\boldsymbol{r} \to 0$ of the Green function $G^{+}(\boldsymbol{r}, 0, k^2)$ for the Schrödinger operator with a short-range potential of arbitrary form, singular at the origin as $r^{-\rho}$ with $\rho > 0$. A short-range potential by definition is a potential that decreases at infinity more rapidly than the Coulomb one. This is done on the basis of integral Lippmann-Schwinger equation for the Green function in coordinate representation. It is shown that to describe the asymptote one has to distinguish three cases depending on the value of potential's parameter ρ. If the singularity is weaker than that of the Coulomb potential, the Green function has a standard singularity, namely the singularity of the form r^{-1}. In the case $1 \leqslant \rho < 2$ an additional singularity arises. If $\rho = 1$ the additional singularity has the same form as in the case of the Coulomb potential. In the case $1 < \rho < 2$ it has the form of a polar singularity of the form $r^{-\rho+1}$. In all cases described above the singular terms of asymptotic expansions are written in explicit forms via potential V's parameters that describe its behaviour at infinity. The problem that we consider has interesting applications in physics, for example in a theory of zero range potentials.

Key words and phrases: scattering theory, Green function, singular potentials, coordinate asymptotes.