ЖЭТФ, 2019, том 155, вып. 3, стр. 472–480

ФУНКЦИЯ ГРИНА УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В МЕТОДЕ КВАНТОВАНИЯ ПОТЕНЦИАЛА

Б. Я. Балагуров[*]

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 сентября 2018 г.,
после переработки 25 сентября 2018 г.
Принята к публикации 29 сентября 2018 г.

Задача определения функции Грина $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ для стационарного уравнения Шредингера рассмотрена в рамках метода квантования потенциала. Найдено выражение для $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ через собственные функции и собственные значения этого метода. Доказана эквивалентность использованного и традиционного способов решения рассмотренной задачи.

DOI: 10.1134/S004445101903009X

1. ВВЕДЕНИЕ

При решении большинства задач квантовой механики используются различные варианты теории возмущений [1]. В этих задачах ищется, как правило, отклик квантовомеханической системы на некоторое внешнее воздействие, например, слабое электрическое поле. Для нахождения такого отклика нужно решить некоторое неоднородное уравнение, следующее из исходного уравнения Шредингера при введении малой добавки в гамильтониан, обусловленной внешним воздействием. Обычным способом решения таких уравнений является разложение искомой поправки к волновой функции по полной системе волновых функций невозмущенного гамильтониана. При традиционном подходе [1] используется образующая полный набор совокупность волновых функций $\psi_\nu(\mathbf{r})$ связанных состояний (если они есть в данном потенциале) с системой волновых функций $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ непрерывного спектра энергии — решений задачи об упругом рассеянии плоской волны.

Проблему отыскания откликов квантовомеханической системы на разнообразные внешние воздействия можно унифицировать, введя функцию Грина $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ для невозмущенного уравнения Шредингера. Использование метода разложения по системе функций $\left\{\psi_\nu(\mathbf{r}), \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right\}$ позволяет найти для величины $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ точное формальное выражение [2]. При этом предложенный в книге [2] подход дает последовательную схему вычисления функции Грина.

Заметим, что задачу об упругом рассеянии также можно трактовать как проблему отклика на внешнее воздействие — падающую плоскую волну. Однако при решении этой задачи для определения функции Грина необходим другой, отличный от приведенного в книге [2], способ ее вычисления, не требующий привлечения системы $\left\{\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right\}$.

В настоящей работе для вычисления функции Грина $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ применен альтернативный использованному в книге [2] подход, основанный на методе квантования потенциала [3]. Впервые подобный метод был предложен в работе [4], в которой в качестве объекта квантования выбиралась некоторая константа, введенная в уравнение Шредингера как множитель к потенциальной энергии. Сходный подход, при котором квантуется глубина потенциальной ямы, развивался в работе [5] и применялся при решении различных физических задач (см. также [3]).

Использование метода из книги [3] позволило выразить величину $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ через собственные функции $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ и собственные значения α_ν этого метода. Полученная общая формула для функции Грина не содержит посторонних элементов вроде плоской волны и воспроизводит известные результаты в различных предельных случаях. Применение найденного для $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ выражения в задаче об упругом рассеянии дает решение этой проблемы, совпадающее с полученным в статье [6]. Отметим, что методы

[*] E-mail: balagurov@deom.chph.ras.ru, byabalagurov@mail.ru

книг [2, 3] приводят к кардинально различающимся по форме выражениям для функции Грина. Тем не менее, как показано в настоящей работе, оба подхода к вычислению величины $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ эквивалентны.

2. НУЛЕВАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Представим потенциальную энергию $U(\mathbf{r})$ в виде $U(\mathbf{r}) = U^0\, v(\mathbf{r})$, где U^0 — величина потенциала, а функция $v(\mathbf{r})$ задает его форму. Далее ограничимся, как и в работе [6], рассмотрением случая, когда $0 \leqslant v(\mathbf{r}) \leqslant 1$ и $v(\mathbf{r})$ при $r \to \infty$ достаточно быстро (например, экспоненциально) обращается в нуль. Стационарное уравнение Шредингера запишем в виде

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \varepsilon\, \psi(\mathbf{r}) = \alpha\, v(\mathbf{r})\, \psi(\mathbf{r}), \tag{1}$$

где $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$, $\alpha = 2mU^0/\hbar^2$.

Задачу определения функции Грина для уравнения (1) будем решать в общем случае комплексной энергии

$$\varepsilon(q) = q^2, \quad q = k + i\varkappa, \tag{2}$$

используя метод квантования потенциала.

1. Собственные функции $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ этого метода являются решениями уравнения

$$\nabla^2 \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) + q^2\, \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) = \bar{\alpha}_\nu(q)\, v(\mathbf{r})\, \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) \tag{3}$$

с асимптотическим поведением

$$r \to \infty: \quad \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) \sim \frac{e^{iqr}}{r}. \tag{4}$$

(Величи́ны, относящиеся к комплексной энергии, снабжаем черточкой сверху.) При выборе для собственной функции асимптотики вида (4) должно выполняться условие

$$\operatorname{Im} q = \varkappa > 0, \tag{5}$$

которое обеспечивает обращение $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ в нуль в пределе $r \to \infty$. Следовательно, собственные функции $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ и собственные значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$ определены на верхней полуплоскости комплексной переменной q, чему отвечает физический лист [1] соответствующей римановой поверхности комплексной энергии. Для собственных значений $\bar{\alpha}_\nu = \bar{\alpha}_\nu(q)$ и функций $\bar{\varphi}_\nu = \bar{\varphi}_\nu(q;\mathbf{r})$ имеют место соотношения симметрии [3, 6]

$$\bar{\alpha}_\nu(-q^*) = \bar{\alpha}_\nu^*(q), \quad \bar{\varphi}_\nu(-q^*;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu^*(q;\mathbf{r}), \tag{6}$$

справедливые при $\operatorname{Im} q > 0$.

Выражения для собственных значений и собственных функций при отрицательных ($\varepsilon = -\varkappa^2 < 0$) и положительных ($\varepsilon = k^2 > 0$) энергиях следуют из формул для комплексных $\varepsilon = q^2$ в соответствующих пределах; $q \to i\varkappa$ и $q \to k + i0$, так что

$$\alpha_\nu(\varkappa) = \bar{\alpha}_\nu(i\varkappa), \quad \varphi_\nu(\varkappa;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(i\varkappa;\mathbf{r}), \tag{7}$$

$$\alpha_\nu^{(+)}(k) = \bar{\alpha}_\nu(k+i0), \quad \varphi_\nu^{(+)}(k;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(k+i0;\mathbf{r}). \tag{8}$$

Как функции энергии величины $\alpha_\nu^{(+)}(k)$ и $\varphi_\nu^{(+)}(k;\mathbf{r})$ определены на верхнем берегу разреза на физическом листе, а $\alpha_\nu(\varkappa)$ и $\varphi_\nu(\varkappa;\mathbf{r})$ — на отрицательной вещественной полуоси этого листа.

Система функций $\{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\}$ ортонормирована с весом $v(\mathbf{r})$:

$$\int \bar{\varphi}_\mu(\mathbf{r})\, \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\, v(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu} \tag{9}$$

и, по предположению, полна, так что выполняется соотношение

$$v(\mathbf{r}) \sum_\nu \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\, \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{10}$$

Для потенциалов с конечным радиусом действия это равенство справедливо для тех $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$, для которых $v(\mathbf{r}) \neq 0$ и $v(\mathbf{r}') \neq 0$. В соотношениях (9) и (10) обе собственные функции относятся к одной и той же энергии.

Нулевая функция Грина $\bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ является решением уравнения

$$\nabla_{\mathbf{r}}^2\, \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + q^2\, \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{11}$$

с условием $\bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \to 0$ при $r \to \infty$ и имеет вид

$$\bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi\, |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, e^{iq\, |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{12}$$

С помощью (11) дифференциальное уравнение (3) преобразуем в интегральное

$$\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) = \bar{\alpha}_\nu(q) \int \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}'. \tag{13}$$

Отсюда находим асимптотическое выражение для собственной функции при $r \to \infty$:

$$\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) \sim -\frac{\bar{\alpha}_\nu(q)\, \bar{u}_\nu(\mathbf{n}, q)}{4\pi}\, \frac{e^{iqr}}{r}, \tag{14}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ и

$$\bar{u}_\nu(\mathbf{n}, q) = \int e^{-iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}}\, \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\, v(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}. \tag{15}$$

Величины $\bar{u}_\nu(-\mathbf{n},q)$ являются коэффициентами разложения функции $\exp(iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})$ по системе $\{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\}$:

$$e^{iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_\nu \bar{u}_\nu(-\mathbf{n},q)\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}). \qquad (16)$$

Здесь $\mathbf{n}$ — произвольный единичный вектор.

Заменим в уравнении (13) $\mathbf{r}'$ на $\mathbf{r}''$, затем умножим его на $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')/\bar{\alpha}_\nu(q)$ и просуммируем по ν:

$$\sum_\nu \frac{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')}{\bar{\alpha}_\nu(q)} = \int \bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}'')\times \times\left[v(\mathbf{r}'')\sum_\nu \bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}'')\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')\right]d\mathbf{r}''. \qquad (17)$$

Согласно соотношению (10) выражение в квадратных скобках равно $\delta(\mathbf{r}''-\mathbf{r}')$. Поэтому из равенства (17) получаем следующее представление для нулевой функции Грина:

$$\bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \sum_\nu \frac{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')}{\bar{\alpha}_\nu(q)}. \qquad (18)$$

В случае потенциала с конечным радиусом действия представление (18) имеет место, если хотя бы для одного из радиус-векторов $\mathbf{r}$ или $\mathbf{r}'$ функция $v(\mathbf{r})$ отлична от нуля.

Согласно [5] для энергии связанного состояния ν, если оно есть в потенциале $\alpha\, v(\mathbf{r})$, имеем выражение $\varepsilon_\nu = -\varkappa_\nu^2$, где $\varkappa_\nu$ — решение уравнения

$$\alpha_\nu(\varkappa) = \alpha. \qquad (19)$$

Волновая функция $\psi_\nu(\mathbf{r})$ этого состояния имеет вид

$$\psi_\nu(\mathbf{r}) = C_\nu\,\varphi_\nu(\varkappa_\nu;\mathbf{r}), \qquad (20)$$

$$C_\nu = \left(\left[\frac{d\alpha_\nu}{d\varepsilon}\right]_{\varepsilon=-\varkappa_\nu^2}\right)^{-1/2} = \left[\frac{d\varepsilon_\nu(\alpha)}{d\alpha}\right]^{1/2}. \qquad (21)$$

2. Для потенциалов с центральной симметрией рассматриваемая задача может быть упрощена путем отделения от $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ и других функций соответствующих угловых частей. Для этого введем вещественные сферические функции $Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})$:

$$Y_{lm}^{(1)}(\mathbf{n}) = a_{lm}\,P_l^m(\cos\theta)\cos m\phi, \quad 0\leqslant m\leqslant l, \qquad (22)$$

$$Y_{lm}^{(2)}(\mathbf{n}) = a_{lm}\,P_l^m(\cos\theta)\sin m\phi, \quad 1\leqslant m\leqslant l; \qquad (23)$$

$$a_{lm} = \left[\frac{2l+1}{2\pi(1+\delta_{m0})}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{1/2}, \quad l=0,1,2,\ldots \qquad (24)$$

Здесь $P_l^m(x)$ — присоединенные полиномы Лежандра [7] и

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r} = \{\sin\theta\cos\phi,\, \sin\theta\sin\phi,\, \cos\theta\}. \qquad (25)$$

Система сферических функций $\{Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\}$ ($\lambda=1$, 2) является ортонормированной:

$$\int Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{l'm'}^{(\lambda')}(\mathbf{n})\,d\mathbf{n} = \delta_{\lambda\lambda'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}, \qquad (26)$$

где $d\mathbf{n} = do = \sin\theta\,d\theta\,d\phi$, и полной:

$$\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{l} Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') = \delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}'), \qquad (27)$$

$$\delta(\mathbf{n}-\mathbf{n}') = \frac{1}{\sin\theta}\,\delta(\theta-\theta')\,\delta(\phi-\phi'). \qquad (28)$$

Отметим также, что

$$\sum_{\lambda=1}^{2}\sum_{m=0}^{l} Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') = \frac{2l+1}{4\pi}\,P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}'), \qquad (29)$$

где $P_l(x)$ — обычные полиномы Лежандра.

Собственную функцию $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_{\lambda lmn}(r,\theta,\phi)$ представим в виде

$$\bar{\varphi}_{\lambda lmn}(\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_{ln}(r)\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}). \qquad (30)$$

Радиальная собственная функция $\bar{\varphi}_{ln}(r)$ подчиняется уравнению

$$\frac{d^2\bar{\varphi}_{ln}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\,\frac{d\bar{\varphi}_{ln}(r)}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\,\bar{\varphi}_{ln}(r) + {} + q^2\,\bar{\varphi}_{ln}(r) = \bar{\alpha}_{ln}(q)\,v(r)\,\bar{\varphi}_{ln}(r). \qquad (31)$$

Индексом n отмечены различные решения уравнения (31) при фиксированном l. Система радиальных собственных функций $\{\bar{\varphi}_{ln}(r)\}$ при фиксированном l ортонормирована,

$$\int_0^\infty \bar{\varphi}_{ln}(r)\,\bar{\varphi}_{ln'}(r)\,v(r)\,r^2\,dr = \delta_{nn'} \qquad (32)$$

и полна,

$$v(r)\sum_n \bar{\varphi}_{ln}(r)\,\bar{\varphi}_{ln}(r') = \frac{1}{r^2}\,\delta(r-r'). \qquad (33)$$

Для $\bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ из (12) справедливо разложение

$$\bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \sum_{\lambda lm} \bar{G}_l^0(r,r')\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n}') \qquad (34)$$

с парциальной нулевой функцией Грина

$$\bar{G}^0_l(r,r') = -iq\left\{h_l^{(1)}(qr)\,j_l(qr')\,\theta(r-r') + \right. \\ \left. +\ j_l(qr)\,h_l^{(1)}(qr')\,\theta(r'-r)\right\}. \quad (35)$$

Здесь $j_l(x)$ и $h_l^{(1)}(x)$ — сферические функции соответственно Бесселя и Ханкеля (первого рода) [8]; $\theta(x) = 1$ при $x > 0$ и $\theta(x) = 0$ при $x < 0$. Выражение (35) удовлетворяет уравнению

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + q^2\right\}\bar{G}^0_l(r,r') = \\ = \frac{\delta(r-r')}{r^2}. \quad (36)$$

Из формулы (18) следует еще одно представление для парциальной нулевой функции Грина:

$$\bar{G}^0_l(r,r') = \sum_n \frac{\bar{\varphi}_{ln}(r)\,\bar{\varphi}_{ln}(r')}{\bar{\alpha}_{ln}(q)}, \quad (37)$$

также удовлетворяющее, в силу (31), уравнению (36).

Уравнение (31) с помощью $\bar{G}^0_l(r,r')$ преобразуем к интегральному виду

$$\bar{\varphi}_{ln}(r) = \bar{\alpha}_{ln}(q)\int\limits_0^\infty \bar{G}^0_l(r,r')\bar{\varphi}_{ln}(r')\,v(r')\,(r')^2\,dr'. \quad (38)$$

Поскольку при $x\to\infty$

$$h_l^{(1)}(x) \approx (-i)^{l+1}\frac{e^{ix}}{x}, \quad j_l(x) \approx \frac{1}{x}\sin\left(x - l\frac{\pi}{2}\right), \quad (39)$$

из уравнения (38) при $r\to\infty$ следует

$$\bar{\varphi}_{ln}(r) \approx -\frac{\bar{\alpha}_{ln}(q)\,\bar{u}_{ln}(q)}{4\pi}\,\frac{e^{iqr}}{r}, \quad (40)$$

$$\bar{u}_{ln}(q) = 4\pi\,(-i)^l\int\limits_0^\infty j_l(qr)\,\bar{\varphi}_{ln}(r)\,v(r)\,r^2\,dr. \quad (41)$$

Величина $i^l\,\bar{u}_{ln}(q)/(4\pi)$ является коэффициентом разложения функции $j_l(qr)$ по системе $\{\bar{\varphi}_{ln}(r)\}$, так что

$$j_l(qr) = \frac{i^l}{4\pi}\sum_n \bar{u}_{ln}(q)\,\bar{\varphi}_{ln}(r) \quad (42)$$

с $\bar{\varphi}_{ln}(r)$, взятой при $\varepsilon = q^2$.

Положив

$$\bar{u}_\nu(\mathbf{n},q) = \bar{u}_{\lambda lmn}(\mathbf{n},q) = \bar{u}_{ln}(q)\,Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n}), \quad (43)$$

приведем выражение (16) к следующему виду:

$$e^{iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{\lambda lm}(-1)^l\left\{\sum_n \bar{u}_{ln}(q)\,\bar{\varphi}_{ln}(r)\right\}\times \\ \times Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n})\,Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{m}). \quad (44)$$

Здесь $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$ и учтено, что $Y^{(\lambda)}_{lm}(-\mathbf{n}) = (-1)^l\ Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n})$. Согласно (42) сумма в фигурных скобках равна $4\pi\,(-i)^l\,j_l(qr)$, так что из (44) получаем

$$e^{iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}r} = 4\pi\sum_{\lambda lm} i^l\,j_l(qr)\,Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n})\,Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{m}). \quad (45)$$

После суммирования по λ и m отсюда следует

$$e^{iq\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}r} = \sum_{l=0}^\infty i^l\,j_l(qr)\,(2l+1)\,P_l(\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}). \quad (46)$$

Равенства (45) и (46) представляют собой обобщение разложения плоской волны $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ [1] на случай комплексной энергии.

Из выражения (35) с учетом асимптотик (39) при $q\to\infty$ следует

$$\bar{G}^0_l(r,r') \approx \frac{1}{2iqrr'}\left\{e^{iq\,|r-r'|} - (-1)^l\,e^{iq\,(r+r')}\right\}. \quad (47)$$

Подстановка (47) в формулу (34) при $q\to\infty$ дает

$$\bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \approx \frac{1}{2iqrr'}\left\{e^{iq\,|r-r'|}\,\delta(\mathbf{m}-\mathbf{m}') - \right. \\ \left. -\ e^{iq\,(r+r')}\,\delta(\mathbf{m}+\mathbf{m}')\right\}. \quad (48)$$

Отсюда следует, что $\bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = 0$ в пределе $q\to\infty$.

Если в потенциале $\alpha\,v(r)$ имеются связанные состояния, то для соответствующих уровней энергии имеем $\varepsilon_{ln} = -\varkappa^2_{ln}$, где $\varkappa_{ln}$ — корни уравнения

$$\alpha_{ln}(\varkappa) = \alpha. \quad (49)$$

Для радиальной волновой функции связанного состояния $\psi_{ln}(r)$ в этом случае получаем выражение

$$\psi_{ln}(r) = C_{ln}\,\varphi_{ln}(\varkappa_{ln},r), \quad (50)$$

$$C_{ln} = \left(\left[\frac{d\alpha_{ln}}{d\varepsilon}\right]_{\varepsilon=-\varkappa^2_{ln}}\right)^{-1/2} = \left[\frac{d\varepsilon_{ln}(\alpha)}{d\alpha}\right]^{1/2}. \quad (51)$$

Здесь функция $\psi_{ln}(r)$ определена следующим образом:

$$\psi_\nu(\mathbf{r}) = \psi_{\lambda lmn}(\mathbf{r}) = \psi_{ln}(r)\,Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n}).$$

3. ПОЛНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

Полная функция Грина $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ для стационарного уравнения Шредингера (1) является решением уравнения

$$\left\{ \nabla^2_{\mathbf{r}} + q^2 - \alpha\, v(\mathbf{r}) \right\} \bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \tag{52}$$

с условием $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \to 0$ при $r \to \infty$.

1. При традиционном подходе [2] величина $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ищется с помощью разложения по полной системе волновых функций — решений уравнения (1). Это, прежде всего, волновые функции $\psi_\nu(\mathbf{r})$ связанных состояний (если они есть в данном потенциале) с уровнями энергии $\varepsilon_\nu < 0$. К ним необходимо добавить волновые функции $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ непрерывного спектра энергий ($\varepsilon = k^2 > 0$) — решения задачи об упругом рассеянии плоской волны с асимптотикой $r \to \infty$:

$$\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{n}, \mathbf{m})\, \frac{e^{ikr}}{r}. \tag{53}$$

Здесь $f(\mathbf{n}, \mathbf{m})$ — амплитуда рассеяния, $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ и $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$.

Совокупность $\left\{\psi_\nu(\mathbf{r}), \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right\}$ образует полную систему, так что [2]

$$\sum_\nu \psi_\nu(\mathbf{r})\, \psi_\nu(\mathbf{r}') + \int \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \psi^{(+)*}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\, \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{54}$$

Звездочкой в соотношении (54) обозначена операция комплексного сопряжения; волновые функции связанных состояний считаются вещественными.

Решение уравнения (52) с помощью разложения по системе $\left\{\psi_\nu(\mathbf{r}), \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right\}$ дает следующее выражение для функции Грина [2]:

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\nu \frac{\psi_\nu(\mathbf{r})\, \psi_\nu(\mathbf{r}')}{\varepsilon - \varepsilon_\nu} + \int \frac{\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \psi^{(+)*}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')}{\varepsilon - k^2}\, \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \tag{55}$$

При выводе формулы (55) использовались следующие соотношения ортонормированности для волновых функций [2]:

$$\int \psi_\mu(\mathbf{r})\, \psi_\nu(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}, \tag{56}$$

$$\int \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, \psi^{(+)*}_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = (2\pi)^3\, \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \tag{57}$$

$$\int \psi_\nu(\mathbf{r})\, \psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} = 0. \tag{58}$$

Применив к $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ из (55) оператор $\nabla^2_{\mathbf{r}} + q^2 - \alpha\, v(\mathbf{r})$, убедимся, что это выражение удовлетворяет уравнению (52) в силу выполнения соотношения полноты (54).

Согласно (55) величина $\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ является аналитической функцией комплексной переменной ε на всем физическом листе за исключением, возможно, некоторых точек на отрицательной действительной полуоси. Так, если в данном потенциале есть связанное состояние с энергией ε_ν, то в выражении (55) присутствует полюс, при приближении к которому имеем при $\varepsilon \to \varepsilon_\nu$:

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx \frac{\psi_\nu(\mathbf{r})\, \psi_\nu(\mathbf{r}')}{\varepsilon - \varepsilon_\nu}. \tag{59}$$

При $\alpha \to 0$ из формулы (55) следует выражение для нулевой функции Грина $\bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Действительно, при $\alpha = 0$ отсутствуют связанные состояния, а функция $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ сводится к плоской волне $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, так что при $\alpha \to 0$

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \to \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{\varepsilon - k^2}\, \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \tag{60}$$

Отсюда при $\varepsilon = q^2$ для нулевой функции Грина следует выражение (12).

Для вычисления следующих членов ряда по степеням α нужно найти соответствующее разложение для функции $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Удобнее, однако, получать разложение функции Грина по степеням α непосредственно. С этой целью перейдем от дифференциального уравнения (52) к интегральному:

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \alpha \int \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)\, v(\mathbf{r}_1)\, \bar{G}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')\, d\mathbf{r}_1. \tag{61}$$

Для слабого потенциала уравнение (61) может решаться итерациями — разложением по степеням α. В результате получим следующий ряд:

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \alpha \int \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)\, v(\mathbf{r}_1)\, \bar{G}^0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}')\, d\mathbf{r}_1 + \alpha^2 \iint \bar{G}^0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)\, v(\mathbf{r}_1)\, \bar{G}^0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\, v(\mathbf{r}_2) \times \bar{G}^0(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}')\, d\mathbf{r}_1\, d\mathbf{r}_2 + \ldots \tag{62}$$

Для центрально-симметричных потенциалов положим

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_l \bar{G}_l(r, r') \sum_{\lambda m} Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{m})\, Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{m}'), \tag{63}$$

где парциальная функция Грина $\bar{G}_l(r,r')$ подчиняется уравнению

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\,\frac{\partial}{\partial r}+q^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\alpha\,v(r)\right\}\bar{G}_l(r,r') = \\ = \frac{\delta(r-r')}{r^2}. \quad (64)$$

В этом случае $\psi_\nu(\mathbf{r}) = \psi_{\lambda lmn}(\mathbf{r}) = \psi_{ln}(r)\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m})$ и

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = 4\pi\sum_l \psi_{kl}^{(+)}(r)\sum_{\lambda m} Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{n})\,Y_{lm}^{(\lambda)}(\mathbf{m}), \quad (65)$$

где $\mathbf{n}=\mathbf{k}/k$ и $\mathbf{m}=\mathbf{r}/r$.

Подстановка этих функций в формулу (55) дает

$$\bar{G}_l(r,r') = \sum_n \frac{\psi_{ln}(r)\,\psi_{ln}(r')}{\varepsilon-\varepsilon_{ln}} + \\ + \frac{2}{\pi}\int\limits_0^\infty \frac{\psi_{kl}^{(+)}(r)\,\psi_{kl}^{(+)*}(r')}{\varepsilon-k^2}\,k^2\,dk. \quad (66)$$

Аналогичным образом из соотношения (54) получаем

$$\sum_n \psi_{ln}(r)\,\psi_{ln}(r') + \frac{2}{\pi}\int\limits_0^\infty \psi_{kl}^{(+)}(r)\,\psi_{kl}^{(+)*}(r')\,k^2\,dk = \\ = \frac{\delta(r-r')}{r^2}. \quad (67)$$

При наличии связанного состояния имеем при $\varepsilon\to\varepsilon_{ln}$

$$G_l(r,r') \approx \frac{\psi_{ln}(r)\,\psi_{ln}(r')}{\varepsilon-\varepsilon_{ln}}, \quad (68)$$

где ε_{ln} — энергия этого состояния.

2. Заметим, что в случае потенциала с конечным радиусом действия ряд (62) содержит, начиная с линейного по α члена, нулевые функции Грина, в которых по крайней мере один из координатных векторов принадлежит области пространства, где $v(\mathbf{r})\neq 0$. Это обстоятельство позволяет использовать для них разложение (18). Так,

$$\int \bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\,v(\mathbf{r}_1)\,\bar{G}^0(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}_1 = \\ = \sum_\mu\sum_\nu \frac{\bar{\varphi}_\mu(\mathbf{r})\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')}{\bar{\alpha}_\mu(q)\,\bar{\alpha}_\nu(q)}\times \\ \times\int \bar{\varphi}_\mu(\mathbf{r}_1)\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}_1)\,v(\mathbf{r}_1)\,d\mathbf{r}_1 = \sum_\nu \frac{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')}{\left[\bar{\alpha}_\nu(q)\right]^2} \quad (69)$$

и т. д. В результате из разложения (62) получаем

$$\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + \sum_\nu \frac{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')}{\bar{\alpha}_\nu(q)}\times \\ \times\left\{\frac{\alpha}{\bar{\alpha}_\nu(q)} + \left[\frac{\alpha}{\bar{\alpha}_\nu(q)}\right]^2 + \left[\frac{\alpha}{\bar{\alpha}_\nu(q)}\right]^3 + \ldots\right\}, \quad (70)$$

откуда следует

$$\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}')+\alpha\sum_\nu \frac{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')}{\bar{\alpha}_\nu(q)\left[\bar{\alpha}_\nu(q)-\alpha\right]}. \quad (71)$$

Выражение (71) применимо при всех $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ для любых потенциалов, в том числе и с конечным радиусом действия. Если при этом имеет место разложение (18) для нулевой функции Грина, то выражение для $\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ приобретает компактный вид:

$$\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_\nu \frac{\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})\,\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r}')}{\alpha_\nu(q)-\alpha}. \quad (72)$$

Здесь по крайней мере один из радиус-векторов должен принадлежать области пространства, где $v(\mathbf{r})\neq 0$. Нетрудно видеть, что выражения (71) и (72) удовлетворяют уравнениям (52) и (61).

Выражения (71) и (72) для функции Грина $\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ обладают теми же, что и (55), аналитическими свойствами. Действительно, собственные функции $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ и собственные значения $\bar{\alpha}_\nu(q)$ определены как регулярные величины при $\operatorname{Im} q>0$, т. е. на всем физическом листе. Кроме того, выражения (71), (72) при $\varepsilon=\varepsilon_\nu=-\varkappa_\nu^2$, где $\varkappa_\nu$ — корень уравнения (19), также имеют полюс и вблизи него принимают при $\varepsilon\to\varepsilon_\nu$ вид

$$\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \approx \frac{\varphi_\nu(\varkappa_\nu;\mathbf{r})\,\varphi_\nu(\varkappa_\nu;\mathbf{r}')}{\varepsilon-\varepsilon_\nu}\times \\ \times\left(\left[\frac{d\alpha_\nu(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]_{\varepsilon=\varepsilon_\nu}\right)^{-1}. \quad (73)$$

Волновая функция $\psi_\nu(\mathbf{r})$ соответствующего связанного состояния выражается через $\varphi_\nu(\varkappa_\nu;\mathbf{r})$ согласно (20), (21), так что выражения (73) и (59) совпадают.

Для слабого потенциала ($\alpha\to 0$) из (71), (72) очевидным образом следует разложение (62) для функции Грина.

При $q\to\infty$ имеем $|\alpha|/|\bar{\alpha}_\nu(q)|\to 0$, поэтому из выражения (70) при $q\to\infty$ получаем

$$\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}') \approx \bar{G}^0(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad (74)$$

с соответствующей асимптотикой (48) для нулевой функции Грина, так что

$$\lim_{q\to\infty}\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = 0. \quad (75)$$

Для парциальной функции Грина согласно (71), (72) имеем

$$\bar{G}_l(r,r') = \bar{G}^0_l(r,r') + \alpha \sum_n \frac{\bar{\varphi}_{ln}(r)\bar{\varphi}_{ln}(r')}{\bar{\alpha}_{ln}(q)(\bar{\alpha}_{ln}(q)-\alpha)}, \quad (76)$$

$$\bar{G}_l(r,r') = \sum_n \frac{\bar{\varphi}_{ln}(r)\,\bar{\varphi}_{ln}(r')}{\bar{\alpha}_{ln}(q)-\alpha}. \quad (77)$$

Вблизи полюса ($\varepsilon \to \varepsilon_{ln}$) для функции $G_l(r,r')$ с учетом связи (50), (51) волновой функции $\psi_{ln}(r)$ с собственной функцией $\varphi_{ln}(r)$ получаем выражение (68).

3. В задаче об упругом рассеянии плоской волны $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ на потенциале $\alpha\, v(\mathbf{r})$ требуется найти волновую функцию $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — решение уравнения (1) (при $\varepsilon = k^2$) с асимптотическим поведением вида (53).

Положим

$$\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \varphi(\mathbf{r}), \quad (78)$$

где функция $\varphi(\mathbf{r})$ описывает рассеянную волну. Подстановка (78) в (1) приводит к неоднородному уравнению для $\varphi(\mathbf{r})$:

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) + k^2\,\varphi(\mathbf{r}) - \alpha\, v(\mathbf{r})\,\varphi(\mathbf{r}) = \alpha\, v(\mathbf{r})\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (79)$$

Уравнение (79) решаем с помощью функции Грина. В результате получаем

$$\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \alpha \int G^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\, v(\mathbf{r}')\, d\mathbf{r}', \quad (80)$$

где $G^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ — функция $\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ при $q = k + i0$.

В выражении (80) координата $\mathbf{r}'$ принадлежит области, в которой $v(\mathbf{r}') \neq 0$. Это позволяет использовать для функции Грина $G^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ представление (72) при $q = k + i0$, так что для волновой функции непрерывного спектра энергии $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ отсюда следует выражение

$$\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \alpha \sum_\nu \frac{u^{(+)}(-\mathbf{n},k)}{\alpha^{(+)}_\nu(k)-\alpha}\, \varphi^{(+)}_\nu(\mathbf{r}), \quad (81)$$

совпадающее с найденным в работе [6]. При выводе формулы (81) учтено определение (15) для величины $\bar{u}(\mathbf{n},q)$ при $q = k + i0$.

При $r \to \infty$ из формулы (81) для функции $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ следует асимптотическое выражение вида (53) с амплитудой рассеяния [6]

$$f(\mathbf{n},\mathbf{m}) = -\frac{\alpha}{4\pi} \sum_\nu \frac{\alpha^{(+)}_\nu(k)}{\alpha^{(+)}_\nu(k)-\alpha} \times \\ \times u^{(+)}_\nu(-\mathbf{n},k)\, u^{(+)}_\nu(\mathbf{m},k), \quad (82)$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ и $\mathbf{m} = \mathbf{r}/r$. При выводе выражения (82) использована асимптотическая формула (14) для собственной функции $\bar{\varphi}_\nu(\mathbf{r})$ при $q = k + i0$.

В случае потенциала с центральной симметрией для парциальной амплитуды рассеяния $f_l(k)$, определенной согласно

$$f(\mathbf{n},\mathbf{m}) = 4\pi \sum_{\lambda l m} f_l(k)\, Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n})\, Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{m}), \quad (83)$$

из (82) получаем следующее выражение [6]:

$$f_l(k) = (-1)^{l+1} \frac{\alpha}{(4\pi)^2} \times \\ \times \sum_n \frac{\alpha^{(+)}_{ln}(k)}{\alpha^{(+)}_{ln}(k)-\alpha} \left[u^{(+)}_{ln}(k)\right]^2. \quad (84)$$

Здесь, как и выше, учтено, что $Y^{(\lambda)}_{lm}(-\mathbf{n}) = (-1)^l\, Y^{(\lambda)}_{lm}(\mathbf{n})$.

4. ЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ФУНКЦИИ ГРИНА

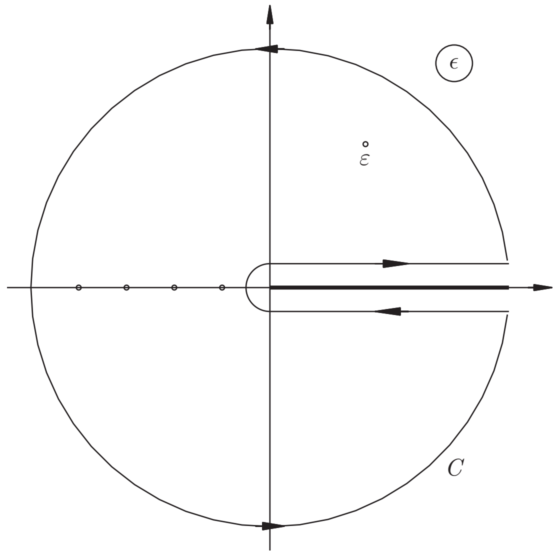
В предыдущем разделе с помощью разных методик для функции Грина $\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ были выведены различающиеся по виду выражения (представления). Оба выражения обладают, тем не менее, одинаковыми общими свойствами и просто описывают одну и ту же величину $\bar{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ разными способами, поэтому между этими представлениями должна существовать непосредственная связь.

Для выяснения соответствия между выражениями (55) и (72) рассмотрим интеграл

$$\int\limits_C \frac{\bar{G}(\epsilon;\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\epsilon-\varepsilon}\, \frac{d\epsilon}{2\pi i}, \quad (85)$$

взятый по изображенному на рисунке замкнутому контуру, состоящему из бесконечно удаленной окружности и обхода вокруг разреза. Здесь у функции Грина в явном виде указана опускавшаяся прежде зависимость от энергии.

Величина (85) равна, с одной стороны, сумме вычетов подынтегрального выражения в полюсах функции Грина при $\epsilon = \varepsilon_\nu$ (если в данном потенциале имеются соответствующие связанные состояния), а также при $\epsilon = \varepsilon$. С другой стороны, интеграл по бесконечно удаленной окружности, с учетом предела (75) для функции Грина при $q \to \infty$ равен нулю, так что остается только интегрирование вдоль



берегов разреза. В результате с использованием выражения (72) получаем

$$
\bar{G}(\varepsilon;\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_\nu \frac{\psi_\nu(\mathbf{r})\,\psi_\nu(\mathbf{r}')}{\varepsilon-\varepsilon_\nu} + \\
+ \int\limits_0^\infty \frac{1}{\epsilon-\varepsilon}\left\{\sum_\nu \frac{\varphi_\nu^{(+)}(\epsilon;\mathbf{r})\,\varphi_\nu^{(+)}(\epsilon;\mathbf{r}')}{\alpha_\nu^{(+)}(\epsilon)-\alpha} - \right. \\
\left. - \sum_\nu \frac{\varphi_\nu^{(+)*}(\epsilon;\mathbf{r})\,\varphi_\nu^{(+)*}(\epsilon;\mathbf{r}')}{\alpha_\nu^{(+)*}(\epsilon)-\alpha}\right\}\frac{d\epsilon}{2\pi i}. \quad (86)
$$

При выводе равенства (86) учтены соотношения (6), а также (20), (21).

Рассмотрим теперь интеграл

$$
I(\varepsilon) = \int \frac{\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})\,\psi_{\mathbf{k}}^{(+)*}(\mathbf{r}')}{\varepsilon-k^2}\,\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (87)
$$

Заметим, что выражение (81) для $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ с учетом разложения (16) при $q=k+i0$ принимает вид

$$
\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \sum_\nu \frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)\,u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n},k)}{\alpha_\nu^{(+)}(k)-\alpha}\,\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}). \quad (88)
$$

Полагая в равенстве (87) $d\mathbf{k} = k^2\,dk\,d\mathbf{n}$ и используя выражение (88), получим

$$
I(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_0^\infty \frac{k^2\,dk}{\varepsilon-k^2}\sum_\nu\sum_\mu \frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)}{\alpha_\nu^{(+)}(k)-\alpha}\times \\
\times \frac{\alpha_\mu^{(+)*}(k)}{\alpha_\mu^{(+)*}(k)-\alpha}\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r}')\times \\
\times \int u_\nu^{(+)}(-\mathbf{n},k)u_\mu^{(+)*}(-\mathbf{n},k)\,d\mathbf{n}. \quad (89)
$$

Далее нам понадобится некоторое соотношение, которое выводится следующим образом. Умножим уравнение для функции $\varphi_\nu^{(+)}(k;\mathbf{r}) = \bar{\varphi}_\nu(k+i0;\mathbf{r})$

$$
\nabla^2\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) + k^2\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) = \alpha_\nu^{(+)}(k)\,v(\mathbf{r})\,\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (90)
$$

на $\varphi_\mu^{(+)*}(k;\mathbf{r})|, d\mathbf{r}|$, соответствующее уравнение для $\varphi_\mu^{(+)*}(k;\mathbf{r})$ — на $\varphi_\nu^{(+)}(k;\mathbf{r})\,d\mathbf{r}$, затем вычтем их друг из друга и проинтегрируем по всему пространству. В результате получим равенство

$$
\lim_{r\to\infty}\left\{r^2\int\left[\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})\,\frac{\partial\varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})}{\partial r} - \right.\right. \\
\left.\left. - \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\,\frac{\partial\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})}{\partial r}\right]d\mathbf{n}\right\} = \left(\alpha_\nu^{(+)} - \alpha_\mu^{(+)*}\right)\times \\
\times \int \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\,\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})\,v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}, \quad (91)
$$

в левой стороне которого интеграл преобразован в поверхностный по сфере радиуса $r\to\infty$. Используя для вычисления этого интеграла асимптотику (14) при $q=k+i0$, найдем соотношение

$$
\frac{ik}{2\pi}\int u_\nu^{(+)}(\mathbf{n},k)\,u_\mu^{(+)*}(\mathbf{n},k)\,\frac{d\mathbf{n}}{4\pi} = \\
= \frac{\alpha_\nu^{(+)}(k)-\alpha_\mu^{(+)*}(k)}{\alpha_\nu^{(+)}(k)\,\alpha_\mu^{(+)*}(k)}\int \varphi_\nu^{(+)}(\mathbf{r})\,\varphi_\mu^{(+)*}(\mathbf{r})\,v(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}. \quad (92)
$$

Из равенства (87), с учетом соотношения (92) и тождества

$$
\frac{\alpha_\mu^{(+)*}(k)-\alpha_\nu^{(+)}(k)}{\left(\alpha_\mu^{(+)*}(k)-\alpha\right)\left(\alpha_\nu^{(+)}(k)-\alpha\right)} = \\
= \frac{1}{\alpha_\nu^{(+)}(k)-\alpha} - \frac{1}{\alpha_\mu^{(+)*}(k)-\alpha}, \quad (93)
$$

находим

$$
I(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi i}\int\limits_0^\infty \frac{d\epsilon}{\epsilon-\varepsilon}\times \\
\times \sum_\nu\sum_\mu\left\{\frac{1}{\alpha_\nu^{(+)}(k)-\alpha} - \frac{1}{\alpha_\mu^{(+)*}(k)-\alpha}\right\}\times \\
\times \varphi_\nu^{(+)}(\epsilon;\mathbf{r})\,\varphi_\mu^{(+)*}(\epsilon;\mathbf{r}')\times \\
\times \int \varphi_\nu^{(+)}(\epsilon;\mathbf{r}'')\,\varphi_\mu^{(+)*}(\epsilon;\mathbf{r}'')\,v(\mathbf{r}'')\,d\mathbf{r}'', \quad (94)
$$

где $\epsilon = k^2$. Наконец, используя соотношение полноты (10) при $q=k+i0$, получим

$$I(\varepsilon) = \int_0^\infty \frac{1}{\epsilon - \varepsilon} \left\{ \sum_\nu \frac{\varphi_\nu^{(+)}(\epsilon; \mathbf{r})\, \varphi_\nu^{(+)}(\epsilon; \mathbf{r}')}{\alpha_\nu^{(+)}(\epsilon) - \alpha} - \right.$$

$$\left. - \sum_\mu \frac{\varphi_\mu^{(+)*}(\epsilon; \mathbf{r})\, \varphi_\mu^{(+)*}(\epsilon; \mathbf{r}')}{\alpha_\mu^{(+)*}(\epsilon) - \alpha} \right\} \frac{d\epsilon}{2\pi i}. \quad (95)$$

Отсюда следует, что выражение (86), с учетом определения $I(\varepsilon)$ из (87), принимает вид (55), так что представления функции Грина (55) и (72) эквивалентны.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).

2. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).

3. Б. Я. Балагуров, *Квантование потенциала в уравнении Шредингера*, URSS, Москва (2018).

4. S. Weinberg, Phys. Rev. **131**, 440 (1963).

5. B. Ya. Balagurov, J. Comp. Methods in Sciences and Engineering, Vol. 10, №№ 4–6, 105 (2010).

6. Б. Я. Балагуров, ЖЭТФ **154**, 543 (2018).

7. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. I. Наука, Москва (1973).

8. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. II. Наука, Москва (1974).