

Ф.М. Морс, Г. Фешбах

Методы теоретической физики

Том 2

**Москва
«Книга по Требованию»**

Ф11 **Ф.М. Морс**
Методы теоретической физики: Том 2 / Ф.М. Морс, Г. Фешбах – М.: Книга по Требованию, 2023. – 894 с.

ISBN 978-5-458-41388-6

Двухтомный курс Ф. Морса и Г. Фешбаха занимает особое место в литературе по математической физике. Он написан физиками для физиков и инженеров и показывает в действии математические методы, наиболее успешно применяемые при изучении различных полей. В книге излагается ряд важнейших разделов современной математики в плане их применения к задачам физики и техники. Большим достоинством является то, что авторы всюду стремятся выяснить основные идеи, существо и физический смысл излагаемых методов. Поэтому книга представляет значительный интерес и для математиков, которым она покажет новые стороны известных им методов. Некоторые из излагаемых методов (например, метод теории возмущений во втором томе) успешно применяются физиками, но еще недостаточно известны математикам и ждут своего математического обоснования. И физики и математики найдут в книге большое число подробно разобранных примеров важных прикладных задач. Курс Морса и Фешбаха лежит на стыке физики и математики. Он отличается от обычных курсов математической физики своей значительно большей физичностью, а от курсов теоретической физики тем, что в нем основное место уделяется разработке математического аппарата. Книга будет полезной студентам, аспирантам и научным работникам математических, физических и инженерных специальностей и вообще всем лицам, сталкивающимся с применением современной математики.

Эта книга является репринтом оригинала, который мы создали специально для Вас, используя запатентованные технологии производства репринтных книг и печати по требованию.

Сначала мы отсканировали каждую страницу оригинала этой редкой книги на профессиональном оборудовании. Затем с помощью специально разработанных программ мы произвели очистку изображения от пятен, клякс, перегибов и попытались отбелить и выровнять каждую страницу книги. К сожалению, некоторые страницы нельзя вернуть в изначальное состояние, и если их было трудно читать в оригинале, то даже при цифровой реставрации их невозможно улучшить.

Разумеется, автоматизированная программная обработка репринтных книг – не самое лучшее решение для восстановления текста в его первоизданном виде, однако, наша цель – вернуть читателю точную копию книги, которой может быть несколько веков.

Поэтому мы предупреждаем о возможных погрешностях восстановленного репринтного издания. В издании могут отсутствовать одна или несколько страниц текста, могут встретиться невыводимые пятна и кляксы, надписи на полях или подчеркивания в тексте, нечитаемые фрагменты текста или загибы страниц. Покупать или не покупать подобные издания – решать Вам, мы же делаем все возможное, чтобы редкие и ценные книги, еще недавно утраченные и несправедливо забытые, вновь стали доступными для всех читателей.

Первый член можно вычислить двукратным интегрированием по частям. Используя уравнение, которому удовлетворяет φ_n , имеем

$$\int_0^L \varphi_n \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = -k_n^2 \int_0^L \psi \varphi_n dx.$$

Из (9.1.8) и условий ортогональности в (9.1.3) вытекает, что $\int \psi \varphi_n dx = 1$. Подставляя эти результаты, немедленно приходим к (9.1.9).

Мы можем теперь применить метод последовательных приближений к уравнению (9.1.8) и, подставляя получающиеся результаты в (9.1.9), находить последовательные приближения для величины k^2 . За нулевое приближение для ψ_n , $\psi_n^{(0)}$ мы примем φ_n и, подставляя его в правую часть уравнения (9.1.8) вместо ψ , получим первое приближение

$$\psi_n^{(1)} = \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k^2 - k_p^2} \varphi_p, \quad (9.1.10)$$

где

$$U_{pn} = \int_0^L \varphi_p(x_0) U(x_0) \varphi_n(x_0) dx_0. \quad (9.1.11)$$

Второе приближение $\psi_n^{(2)}$ получается подстановкой $\psi_n^{(1)}$ в (9.1.8):

$$\psi_n^{(2)} = \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k^2 - k_p^2} \varphi_p + \lambda^2 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{pq} U_{qn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2)} \varphi_p, \quad (9.1.12)$$

где запись $pq \neq n$ означает, что члены с $p = n$ или $q = n$ в сумме опущены. Вообще

$$\psi_n^{(a)} = \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{\int_0^L \varphi_p U \psi_n^{(a-1)} dx_0}{k^2 - k_p^2} \varphi_p(x),$$

так что

$$\begin{aligned} \psi_n^{(a)} = & \varphi_n + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k^2 - k_p^2} \varphi_p + \dots + \\ & + \lambda^a \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{pq} U_{qr} \dots U_{zn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2) \dots (k^2 - k_z^2)} \varphi_p. \end{aligned} \quad (9.1.13)$$

Следует отметить, что эти формулы содержат неизвестное k^2 . Его теперь можно определить подстановкой (9.1.13) в (9.1.9). Получаемое таким образом соотношение, определяющее k^2 , имеет вид

$$\begin{aligned} k^2 = & k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k^2 - k_p^2} + \dots + \\ & + \lambda^{a+1} \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rs} \dots U_{zn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2)(k^2 - k_r^2) \dots (k^2 - k_z^2)}. \end{aligned} \quad (9.1.14)$$

Это уравнение можно решить методом последовательных приближений. Если обозначить через $(k^2)^{(a)}$ a -е приближение, то

$$(k^2)^{(1)} = k_n^2 + \lambda U_{nn},$$

$$(k^2)^{(2)} = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k_n^2 - k_p^2},$$

$$\begin{aligned}
(k^2)^{(3)} &= k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_p^2} + \\
&\quad + \lambda^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)}, \\
(k^2)^{(4)} &= k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{q \neq n} \frac{U_{nq} U_{qn}}{k_n^2 - k_q^2} - k_p^2} + \\
&\quad + \lambda^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{(k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_p^2)(k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_q^2)} + \\
&\quad + \lambda^4 \sum_{pqr \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2)}.
\end{aligned}$$

Вообще

$$\begin{aligned}
(k^2)^{(a)} &= k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{(k^2)^{(a-2)} - k_p^2} + \\
&\quad + \lambda^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{[(k^2)^{(a-3)} - k_p^2][(k^2)^{(a-3)} - k_q^2]} + \dots + \\
&\quad + \lambda^a \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rs} \dots U_{zn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2) \dots (k_n^2 - k_z^2)}. \quad (9.1.15)
\end{aligned}$$

Соответствующие волновые функции таковы:

$$\begin{aligned}
\psi_n^{(1)} &= \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k_n^2 - k_p^2} \varphi_p(x), \\
\psi_n^{(2)} &= \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{k_n^2 + \lambda U_{nn} - k_p^2} \varphi_p(x) + \\
&\quad + \lambda^2 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{pq} U_{qn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)} \varphi_p(x), \\
\psi_n^{(a)} &= \varphi_n(x) + \lambda \sum_{p \neq n} \frac{U_{pn}}{(k^2)^{(a-1)} - k_p^2} \varphi_p + \\
&\quad + \lambda^2 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{pq} U_{qn}}{[(k^2)^{(a-2)} - k_p^2][(k^2)^{(a-2)} - k_q^2]} \varphi_p + \dots + \\
&\quad + \lambda^a \sum_{pq \dots \neq n} \frac{U_{pq} U_{qr} U_{rs} \dots U_{zn}}{(k_n^2 - k_p^2)(k_n^2 - k_q^2)(k_n^2 - k_r^2) \dots (k_n^2 - k_z^2)} \varphi_p. \quad (9.1.16)
\end{aligned}$$

В каждом случае a -е приближение берется с точностью до λ^a . Необходимо, однако, обратить внимание на то, что (9.1.15) и (9.1.16) не являются разложениями по степеням λ , так как знаменатели содержат λ . Степенной ряд можно получить разложением знаменателей в ряды по степеням λ . Этот процесс приводит к пертурбационным формулам Рэлея—Шредингера¹⁾. Ясно, что эти последние выражения не только

¹⁾ См. любой учебник по квантовой механике, например, Kemble, *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics*, стр. 380—388; McGraw-Hill, New York, 1937. [Или Ландау и Лифшиц, *Квантовая механика*, ч. I, стр. 159—162, М.—Л., ГИИТЛ, 1948.—Прим. ред.]

значительно сложнее, чем (9.1.15) и (9.1.16), но и, вообще говоря, имеют меньший радиус сходимости. Заметим также, что при получении (9.1.15) мы подставляли вместо k^2 ровно такое приближение, которое обеспечивает точность порядка λ^a . На практике часто бывает удобно при вычислениях всюду подставлять $(k^2)^{(a-1)}$ вместо k^2 .

Сходимость рядов. Сходимость рядов, которые дают выражения (9.1.16) для $\psi^{(a)}$ и (9.1.15) для $(k^2)^{(a)}$, является, конечно, существенной для их практического применения. Что касается рядов для $\psi^{(a)}$, то нас интересует их сходимость в среднем (см. 6.3), для которой требуется сходимость сумм квадратов коэффициентов при φ_p в разложении $\psi^{(a)}$. Более точно, если $\psi^{(a)} = \sum A_p \varphi_p$, то мы требуем, чтобы ряд

$$\sum |A_p|^2 = \int_0^L |\psi^{(a)}|^2 dx$$

сходил. Мы можем рассматривать прямо равенства (9.1.16), но более удобно использовать само исходное интегральное уравнение (9.1.4), из которого мы видим, что

$$\psi^{(a)} = \varphi_n - \lambda \int_0^L G_k(x|x_0) U(x_0) \psi^{(a-1)}(x_0) dx_0, \quad (9.1.16a)$$

где штрих у интеграла указывает, что из функции вычитается ее проекция на φ_n . Для сходимости в среднем разложения функции $\psi^{(a)}$ требуется, чтобы второе слагаемое в выражении для $\psi^{(a)}$ было интегрируемо с квадратом. В рассматриваемом одномерном случае G_k является кусочно-непрерывной функцией, хотя имеет разрывную производную. Следовательно, в предположении сходимости разложения для $\psi^{(a-1)}$ необходимым условием сходимости этого интеграла является интегрируемость U . Тем не менее мы видим, что U может иметь особенность, а интеграл все-таки будет сходиться; U может быть дельта-функцией Дирака или даже ее первой производной. Однако вторая производная дельта-функции слишком сингулярна, так как интеграл в этом случае пропорционален второй производной от функции $G_k \cdot \psi^{(a-1)}$, которая сингулярна. (Заметим, что особенность дельта-функции соответствует особенности функции $1/R$ для одного измерения; в n -мерном случае она соответствует особенности $1/R^n$.)

В терминах элементов U_{pn} сходимость в среднем для рядов (9.1.16) будет иметь место, если

$$|U_{pn}|^2 \underset{p \rightarrow \infty}{\asymp} k_p^{3-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0. \quad (9.1.17)$$

Конечно, если U содержит дельта-функцию или ее производную, сходимость рядов для $\psi^{(a)}$ будет медленной, что делает решение практических задач утомительным и поглощающим много времени. Сходимость можно ускорить суммированием в замкнутом виде рядов $\sum B_p \varphi_p$, где B_p приближают A_p все точнее по мере стремления p к бесконечности. Затем этот ряд вычитается из исходного, а сумма в замкнутом виде прибавляется. Полученный таким образом новый ряд сходится быстрее старого. Процедура образования таких сумм наводит на мысль, что ряды, представляющие $\int G_k U \psi^{(a)} dx_0$ и $\int G_0 U \psi^{(a)} dx_0$, сходятся в точности одинаковым образом, так как медленная сходимость происходит из разрывного характера производной функции G_k .

Мы приходим таким образом к рассмотрению функции

$$\chi^{(a)} = \lambda \int_0^L G_0(x|x_0) U(x_0) \psi^{(a-1)} dx_0.$$

Эта функция удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$d^2\chi^{(a)}/dx^2 = \lambda U \psi^{(a-1)}.$$

Тогда функция $\psi^{(a)}$ представима в виде

$$\begin{aligned} \psi^{(a)} &= \varphi_n - (\chi^{(a)})' - \lambda \int_0^L (G_k - G_0) U(x_0) \psi^{(a-1)} dx_0 = \\ &= \varphi_n - (\chi^{(a)})' - \lambda k^2 \sum_{p \neq n} \frac{\int_0^L \varphi_p U \psi^{(a-1)} dx_0}{k_p^2 (k^2 - k_p^2)} \varphi_p. \end{aligned}$$

Здесь штрих у $\chi^{(a)}$ и у интеграла означает, что нужно вычесть компоненту, пропорциональную φ_n , т. е.

$$(\chi^{(a)})' = \chi^{(a)} - \varphi_n \int_0^L \chi^{(a)} \varphi_n dx.$$

Важный вывод, вытекающий из этого рассмотрения, состоит в том, что сходимость можно улучшить, если удастся или решить неоднородную задачу с нулевой энергией в замкнутом виде, или получить для нее сходимость, более быструю, чем для (9.1.16).

Сходимость в среднем рядов в (9.1.16) для $\psi^{(a)}$ не обеспечивает сходимости соответствующих рядов в (9.1.15) для $(k^2)^{(a)}$. Чтобы проверить это утверждение, подставим в равенство (9.1.9) для k^2 равенство (9.1.16a) для $\psi^{(a)}$. Тогда приближенным значением для k^2 будет

$$k^2 \simeq k_n^2 + \lambda U_{nn} - \lambda^2 \int_0^L dx \int_0^L \varphi_n(x) U(x) G_k(x|x_0) U(x_0) \psi^{(a-1)}(x_0) dx_0. \quad (9.1.18)$$

Снова необходимым условием сходимости является интегрируемость U . Функция U может иметь особенность типа дельта-функции, но в отличие от того, что было в случае рядов для ψ , она не может иметь особенности типа первой производной от дельта-функции [так как тогда для вычисления интеграла в (9.1.18) функцию G_k пришлось бы дважды дифференцировать]. Это не делает недействительными наши результаты для $\psi^{(a)}$, но указывает на то, что в данном случае, прежде чем подставить ряды в (9.1.9) для получения k^2 , нужно улучшить их сходимость при помощи указанной выше техники.

Многомерные задачи. Формулы (9.1.7) – (9.1.15) применимы к более общим задачам, чем (9.1.1). Если, например, мы имеем дело с движением частицы в трехмерном пространстве под действием потенциала $U_0 + \lambda U$, то ψ удовлетворяет уравнению

$$\nabla^2 \psi + (k^2 - U_0 - \lambda U) \psi = 0, \quad (9.1.19)$$

где невозмущенная задача с точным решением φ_n и собственным значением k_n^2 состоит в решении уравнения

$$\nabla^2 \varphi_n + (k_n^2 - U_0) \varphi_n = 0.$$

Если мы рассматриваем две частицы, то необходимо ввести шестимерное пространство (три координаты для каждой частицы). Уравнение будет в этом случае следующее:

$$\nabla_1^2 \psi + \nabla_2^2 \psi + (k^2 - U_0 - \lambda U) \psi = 0. \quad (9.1.20)$$

Здесь ψ — функция шести переменных x_1, y_1, z_1 и x_2, y_2, z_2 . В каждом из этих случаев возмущение создается членом λU и поэтому можно использовать результаты (9.1.7) — (9.1.15), причем теперь

$$U_{pn} = \int \dots \int \bar{\varphi}_p(x_1, x_2, \dots, x_N) U(x_1, x_2, \dots, x_N) \times \\ \times \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_N) dx_1 dx_2 \dots dx_N, \quad (9.1.21)$$

где N — число измерений ($= 3$ или 6 в рассмотренных примерах).

В исследовании сходимости нужно внести некоторые изменения, так как характер особенности функции G_k зависит от размерности пространства. В одномерном случае G_k имеет разрывную производную в точке $x = x_0$; в двумерном случае G_k обладает логарифмической особенностью; в случае трех и более измерений $G_k \simeq AR^{-N+2}$, где R — расстояние от источника до точки наблюдения и N — число измерений. Поэтому нужно рассмотреть интеграл

$$\int \frac{U(\mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^{N-2}} dv_0, \quad N \geq 3, \\ \int \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| U(\mathbf{r}_0) dv_0, \quad N = 2,$$

где $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$ — векторы N -мерного пространства.

После интегрирования получится функция (от $\mathbf{r}$), интегрируемая с квадратом в том случае, когда $U(\mathbf{r}_0)$ имеет особенность в точке $\mathbf{r}_1$ вида $|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|^{N-2} \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1)$ или $|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|^{-2}$ для всех N , кроме $N = 2$. В случае $N = 2$ допустимая особенность имеет вид $|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|^\varepsilon \delta(\varepsilon > 0)$. Эти функции дифференцируемы $N - 1$ раз. Следующее дифференцирование дает саму δ -функцию. Следовательно, эти функции имеют разрывы в своих градиентах $(N - 1)$ -го порядка. Мы видим, что при возрастании числа измерений допустимая точечная особенность по совокупности всех координат становится все более слабой. Если $U(\mathbf{r}_0)$ включает только одну из координат, то дело сводится, по существу, к одномерному случаю (это замечание может быть использовано для получения разобранных сейчас результатов).

В терминах элементов U_{pn} сходимость ряда (9.1.15) в среднем имеет место, если

$$|U_{pn}|^2 \underset{p \rightarrow \infty}{\simeq} k_p^{4-N-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0. \quad (9.1.22)$$

Пример. Мы проиллюстрируем применение формул теории возмущений на уравнении Матье

$$\frac{d^2 \psi}{d\theta^2} + [b - s \cos^2 \theta] \psi = 0, \quad \psi(0) = \psi(2\pi), \quad \psi'(0) = \psi'(2\pi).$$

Это уравнение было рассмотрено раньше (см. § 5.2), где был применен метод непрерывных дробей для определения значений величины b , совместимых с периодическими граничными условиями, наложенными на ψ . Физически уравнение Матье интересно при рассмотрении вопроса о распространении волн в эллиптических цилиндрических координатах [см. формулу (11.2.70) и дальше]. Невозмущенные собственные функции

имеют вид

$$\varphi_n^\pm = \sqrt{\frac{\varepsilon_n}{2\pi}} \frac{\cos}{\sin}(n\theta), \quad n=0, 1, 2, \dots; ^1)$$

соответствующие собственные значения равны n^2 . Знак «+» относится к четному решению — косинусу; знак «—» к нечетному — синусу. Эти собственные функции образуют на отрезке $(0, 2\pi)$ полную ортонормальную систему. Возмущение создается членом $s \cos^2 \theta$, где теперь s — параметр, определяющий величину возмущения, так что в формулах теории возмущений надо положить $\lambda = s$, $U = \cos^2 \theta$. Следующий шаг состоит в вычислении элементов U_{nm} для функции $\cos^2 \theta$. Так как $\cos^2 \theta$ — четная функция, то U_{nm} отличен от нуля только в том случае, когда φ_n и φ_m либо обе четные, либо обе нечетные. В этом примере мы сосредоточим внимание на четном случае. Тогда

$$U_{nm} = \frac{1}{2} \delta_{mn} + \frac{1}{4} [\delta_{m, n-2} + \delta_{m, n+2}] \quad \text{при } m \text{ и } n \neq 0,$$

$$U_{m0} = U_{0m} = \frac{1}{\sqrt{8}} \delta_{m2}, \quad m \neq 0, \quad U_{00} = \frac{1}{2},$$

Мы рассмотрим два случая, соответствующих невозмущенным собственным функциям φ_0 с собственным значением 0 и φ_6 с собственным значением $6^2 = 36$. Соответствующие значения b_n выражаются в согласии с формулой (9.1.14) в виде

$$b_n = n^2 + sU_{nn} + s^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np}U_{pn}}{b_n - p^2} + s^3 \sum_{pq \neq n} \frac{U_{np}U_{pq}U_{qn}}{(b_n - p^2)(b_n - q^2)} + \dots$$

В этом примере мы проведем вычисления с точностью до четвертого порядка включительно. Тогда

$$b_0 = 0 + \frac{s}{2} + \frac{s^2}{8(b_0 - 4)} + \frac{s^3}{16(b_0 - 4)^2} + \frac{s^4}{32(b_0 - 4)^2} \left[\frac{1}{b_0 - 4} + \frac{1}{4} \frac{1}{b_0 - 16} \right] + \dots$$

Величина b_0 вычислена для нескольких значений s . Результаты даны в табл. 9.1 вместе с точными значениями. Укажем, что $b_0^{(a)}$ есть a -е при-

Таблица 9.1

s	$b_0^{(0)}$	$b_0^{(1)}$	$b_0^{(2)}$	$b_0^{(3)}$	$b_0^{(4)}$	Точное
0,2	0	0,10000	0,09875			0,09875
1,0	0	0,50000	0,46430	0,46892		0,46896
2,0	0	1,00000	0,83333	0,89197	0,87367	0,87823
4,0	0	2,00000	1,00000	1,77778	1,15407	1,54486

ближение для b_0 . Как и следовало ожидать, сходимость, которая превосходна для $s < 1$, ухудшается при $s > 1$. При $s = 4$ сходимости нет вовсе, последовательные приближения колеблются вокруг точного значения.

Ясно, что эта величина s больше радиуса сходимости пертурбационных рядов или в лучшем случае только совсем немного меньше его.

Как мы увидим на стр. 28, имеется возможность обеспечить аналитическое продолжение за радиус сходимости и получить выражение,

¹⁾ Напомним, что по определению $\varepsilon_0 = 1$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \dots = 2$. — Прим. ред.

справедливое для всех значений s . На данной стадии рассмотрения мы можем применить специальную технику преобразования Эйлера [см. равенство (4.3.16)], которая дает для b_0 при $s=4$ приближенное значение 1,46231.

Для b_6 выражение имеет вид

$$b_6 = 36 + \frac{s}{2} + \frac{s^2}{16} \left[\frac{1}{b_6 - 16} - \frac{1}{64 - b_6} \right] + \frac{s^3}{32} \left[\frac{1}{(b_6 - 16)^2} + \frac{1}{(64 - b_6)^2} \right] + \\ + \frac{s^4}{64} \left\{ \frac{1}{(b_6 - 16)^2} \left[\frac{1}{4(b_6 - 4)} + \frac{1}{b_6 - 16} \right] - \frac{1}{(64 - b_6)^2} \left[\frac{1}{4(100 - b_6)} + \frac{1}{64 - b_6} \right] \right\} + \dots$$

Величины s и последовательные приближения к b_6 приведены в табл. 9.2.

Таблица 9.2

s	$b_6^{(0)}$	$b_6^{(1)}$	$b_6^{(2)}$	$b_6^{(3)}$	Точное
0,5	36	36,25	36,25022		36,25022
2	36	37,00	37,00356		37,00357
30	36	51,00	48,27998	53,28531	51,82897

Сходимость в этом случае аналогична сходимости для случая $n=0$, однако радиус сходимости значительно больше. Этого следовало ожидать, так как возмущающий член $s \cos^2 \theta$ не может приблизиться к невозмущенной величине n^2 до тех пор, пока s не станет достаточно большим. Позже (на стр. 28) мы разовьем приближенный метод, который основывается на этом соображении. Однако при $s=30$ пертурбационный ряд уже не сходится; преобразование Эйлера дает величину 48,89, все еще довольно далекую от точного значения.

Из этих примеров ясно, что метод улучшения сходимости ряда по возрастающим степеням λ был бы крайне желателен. Мы рассмотрим два таких метода — метод Фредгольма и метод Финберга. Формула Фредгольма дает выражение, справедливое для всех значений параметра возмущения λ .

Пертурбационная формула Финберга; вековой определитель. Финберг заметил, что в предшествующих формулах теории возмущений элемент U_{ab} в данном порядке возмущения может встречаться более одного раза, так что появляются $(U_{ab})^2$ и более высокие степени U_{ab} . Это можно увидеть, анализируя член пятого порядка в (9.1.14):

$$\lambda^5 \sum_{pqrs \neq n} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qr} U_{rs} U_{sn}}{(k^2 - k_p^2)(k^2 - k_q^2)(k^2 - k_r^2)(k^2 - k_s^2)}.$$

Ясно, что в процессе суммирования по всем индексам (кроме n) оба индекса p и r мы можем положить равными a и в то же время выбрать индексы q и s равными b , так что в этой сумме будет содержаться член $(U_{ab})^2$. Финберг затем указал, что можно получить пертурбационные формулы, в которых такого повторения элементов не будет.

Основания для такого замечания можно увидеть из следующего соображения. Пусть мы имеем задачу

$$\mathcal{L}(\psi) + k^2 \psi = \lambda U \psi, \quad (9.1.23)$$

где $\mathcal{L}$ — некоторый оператор. В уравнении (9.1.1) $\mathcal{L} = d^2/dx^2$, в (9.1.19) $\mathcal{L} = \nabla^2 - U_0$; в (9.1.20) $\mathcal{L} = \nabla_1^2 + \nabla_1^2 - U_0$. Невозмущенной является задача

$$\mathcal{L}(\varphi_n) + k_n^2 \varphi_n = 0, \quad (9.1.24)$$

где, если $\mathcal{L}$ предполагается эрмитовым оператором, функции φ_n образуют полную ортонормированную систему:

$$\int \bar{\varphi}_n \varphi_m dv = \delta_{nm}. \quad (9.1.25)$$

Разложим теперь ψ в ряд по этой системе:

$$\psi = \sum_p c_p \varphi_p.$$

Подставляя этот ряд в уравнение (9.1.23) и используя (9.1.24), мы получим

$$\sum_p c_p (k^2 - k_p^2) \varphi_p = \lambda \sum_p c_p U \varphi_p.$$

Отсюда

$$(k^2 - k_q^2) c_q = \lambda \sum_p c_p \int \bar{\varphi}_q U \varphi_p dv = \lambda \sum_p c_p U_{qp},$$

или

$$\sum_p [(k^2 - k_q^2) \delta_{qp} - \lambda U_{qp}] c_p = 0. \quad (9.1.26)$$

Это верно для всех q , так что мы имеем систему линейных однородных уравнений для коэффициентов c_p . Такая система имеет ненулевое решение только в том случае, если определитель, образованный из коэффициентов при неизвестных c_p , равен нулю. Поэтому

$$|(k^2 - k_q^2) \delta_{qp} - \lambda U_{qp}| = 0, \quad (9.1.27)$$

или

$$\begin{vmatrix} k^2 - k_0^2 - \lambda U_{00} & -\lambda U_{01} & -\lambda U_{02} & \dots \\ -\lambda U_{10} & k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11} & -\lambda U_{12} & \dots \\ -\lambda U_{20} & -\lambda U_{21} & k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{vmatrix} = 0.$$

Это — уравнение, определяющее k^2 . Определитель слева называется *сековым определителем*. Он был рассмотрен в гл. 4 (стр. 65). Теперь можно видеть, что повторений элемента U_{ab} при раскрытии определителя не встретится. Предположим, например, что мы имеем дело с задачей, в которой отличны от нуля только те U_{ab} , для которых $a \leq 2$, $b \leq 2$. Тогда определитель после раскрытия и перегруппировки членов, которая нужна для приведения его к виду, аналогичному пертурбационной формуле (9.1.15), запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} k^2 = k_0^2 + \lambda U_{00} + \lambda^2 & \left\{ \frac{U_{01}U_{10}}{k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11} - \frac{\lambda^2 U_{21}U_{12}}{k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22}}} + \right. \\ & \left. + \frac{U_{02}U_{20}}{k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22} - \frac{\lambda^2 U_{21}U_{12}}{k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11}}} \right\} + \\ & + \lambda^3 \frac{U_{02}U_{21}U_{10} + U_{20}U_{01}U_{12}}{(k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11})(k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22}) - \lambda^2 U_{12}U_{21}}. \end{aligned}$$

С другой стороны, если мы напишем равенство (9.1.15) для этого случая, то получим не конечное число членов, а бесконечный ряд. Можно показать, что дополнительные члены появляются в результате разложения

в ряд по степеням λ знаменателей в написанном выше выражении:

$$k^2 = k_0^2 + \lambda U_{00} + \lambda^2 \left[\frac{U_{01}U_{10}}{k^2 - k_1^2} + \frac{U_{02}U_{20}}{k^2 - k_2^2} \right] + \lambda^3 \left[\frac{U_{01}U_{11}U_{10}}{(k^2 - k_1^2)^2} + \right. \\ \left. + \frac{U_{01}U_{12}U_{20} + U_{02}U_{21}U_{10}}{(k^2 - k_1^2)(k^2 - k_2^2)} + \frac{U_{02}U_{22}U_{20}}{(k^2 - k_2^2)^2} \right] + \dots$$

Первый и последний члены в скобках при λ^3 являются результатами разложения в ряд дробей $1/(k^2 - k_1^2 - \lambda U_{11})$ и $1/(k^2 - k_2^2 - \lambda U_{22})$, которые появляются в точном выражении. Все такие разложения уменьшают область применимости пертурбационных формул; обычно полезнее видоизменить развитие теории возмущений так, чтобы обойтись без этих разложений.

Рассмотрим для этой цели уравнения (9.1.26), определяющие неизвестные коэффициенты c_p . Предположим, что мы рассматриваем то решение, которое приводит к φ_n , если возмущение исчезает, так что $c_n = 1$. Тогда

$$(k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp}) c_p = \lambda U_{pn} + \lambda \sum_{q \neq np} c_q U_{pq}. \quad (9.1.28)$$

(Запись $q \neq np$ указывает, что в сумме индекс q не может принимать значений n и p .) Для построения метода последовательных приближений мы должны теперь написать уравнение, определяющее c_q . Во избежание повторений матричных элементов нужно выделить в уравнении для c_q члены с индексами p и n :

$$(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}) c_q = \lambda U_{qn} + \lambda c_p U_{qp} + \lambda \sum_{r \neq npq} c_r U_{qr}. \quad (9.1.29)$$

Аналогично для c_r

$$(k^2 - k_r^2 - \lambda U_{rr}) c_r = \lambda U_{rn} + \lambda c_p U_{rp} + \lambda c_q U_{rq} + \lambda \sum_{s \neq npqr} c_s U_{rs}. \quad (9.1.30)$$

Пока еще не было сделано никаких приближений. Для конечного векового определителя, содержащего, следовательно, только конечное число членов в разложении ψ , получится конечное число уравнений вида (9.1.28) — (9.1.30). Если бы мы имели дело, например, с вековым определителем третьего порядка, то уравнение (9.1.29) не содержало бы члена с суммой; для случая определителя четвертого порядка последним уравнением было бы (9.1.30) и оно не содержало бы члена с суммой; и т. д. В каждом случае последнее уравнение не содержит члена с суммой.

Для того чтобы решить уравнения (9.1.28) — (9.1.30) и другие, которые получатся в процессе последовательного выделения коэффициентов, отбросим член с суммой в N -ом уравнении и найдем из него N -е c . Подставив полученный результат в $(N-1)$ -е уравнение, находим $(N-1)$ -е c и т. д. Чтобы получить формулы для бесконечного векового определителя, применим метод полной математической индукции для получения общего решения при любом N , что позволит осуществить предельный переход при $N \rightarrow \infty$.

Мы проиллюстрируем первый шаг этой процедуры, взяв $N = 3$. Из (9.1.29) находим

$$(k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}) c_q = \lambda U_{qn} + \lambda c_p U_{qp}.$$

Подставляя в (9.1.28), получаем формулу

$$\left[k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp} - \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{qp}U_{pq}}{k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}} \right] c_p = \\ = \lambda U_{pn} + \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq}U_{qn}}{k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}}, \quad (9.1.31)$$

дающую c_p до второго порядка точности включительно.

Уравнение, определяющее k^2 , получается, если положить $q = n$ в (9.1.26), а вместо c_n подставить единицу. Тогда

$$k^2 = k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda \sum_{p \neq n} c_p U_{np}. \quad (9.1.32)$$

Подставляя значение c_p из (9.1.31), получаем k^2 с точностью до третьего порядка:

$$\begin{aligned} k^2 = & k_n^2 + \lambda U_{nn} + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \frac{U_{np} U_{pn}}{k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp} - \lambda^2 \sum_{q \neq pn} \frac{U_{pq} U_{qp}}{k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}}} + \\ & + \lambda^3 \sum_{\substack{p \neq n \\ q \neq pn}} \frac{U_{np} U_{pq} U_{qn}}{\left[k^2 - k_p^2 - \lambda U_{pp} - \lambda^2 \sum_{r \neq pn} \frac{U_{pr} U_{rp}}{k^2 - k_r^2 - \lambda U_{rr}} \right] [k^2 - k_q^2 - \lambda U_{qq}]}. \end{aligned} \quad (9.1.33)$$

Сравнение с приведенным выше точным выражением для векового определителя третьего порядка обнаруживает, что равенство (9.1.33) является точным для этого случая. Для определителей более высокого порядка оно дает точное разложение определителей третьего порядка, содержащих $k^2 - k_n^2 - \lambda U_{nn}$, а приближения входят только в алгебраические дополнения.

Легко провести аналогичное рассмотрение для $N = 4$ или больших значений N и увидеть, какова должна быть форма решения для бесконечного N . Мы приведем окончательные результаты.

Пусть

$$\begin{aligned} (x^2)_{np} = & k_p^2 + \lambda U_{pp} + \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq} U_{qp}}{k^2 - (x^2)_{npq}} + \lambda^3 \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{U_{pq} U_{qr} U_{rp}}{[k^2 - (x^2)_{npq}] [k^2 - (x^2)_{npqr}]} + \dots, \\ (x^2)_{npq} = & k_q^2 + \lambda U_{qq} + \lambda^2 \sum_{r \neq npq} \frac{U_{qr} U_{rq}}{k^2 - (x^2)_{npqr}} + \\ & + \lambda^3 \sum_{\substack{r \neq npq \\ s \neq npqr}} \frac{U_{qr} U_{rs} U_{sq}}{[k^2 - (x^2)_{npqr}] [k^2 - (x^2)_{npqrs}]} + \dots \end{aligned} \quad (9.1.34)$$

и т. д. Каждое x , с постепенно удлиняющимся индексом, имеет постепенно уменьшающееся число членов в каждом ряде, умножаемом на различные степени λ ; все больше матричных элементов опускается, и если имеется только конечное число состояний, то ряды в конце концов сводятся к нулю, так как все нулевые матричные элементы опущены. Можно дать общее выражение для c_p через эти константы $(x^2)_{np}, \dots$:

$$\begin{aligned} c_p = & \lambda \frac{U_{pn}}{k^2 - (x^2)_{np}} + \lambda^2 \sum_{q \neq np} \frac{U_{pq} U_{qn}}{[k^2 - (x^2)_{np}] [k^2 - (x^2)_{npq}]} + \\ & + \lambda^3 \sum_{\substack{q \neq np \\ r \neq npq}} \frac{U_{pq} U_{qr} U_{rn}}{[k^2 - (x^2)_{np}] [k^2 - (x^2)_{npq}] [k^2 - (x^2)_{npqr}]} + \dots \end{aligned} \quad (9.1.35)$$