ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА 2021. Т. 52. ВЫП. 1. С. 310–311

APPLICATION OF MODIFIED HYPERVIRIAL AND EHRENFEST THEOREMS AND THEIR SEVERAL CONSEQUENCES

A. Khelashvili 1, *, T. Nadareishvili 1, 2

¹ Institute of High Energy Physics, Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Tbilisi
² Faculty of Exact and Natural Sciences, Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Tbilisi

It is well known that if the physical system is located in the restricted area, additional "surface terms" emerge in the traditional form of hypervirial and/or Ehrenfest theorems. In the current literature the one-dimensional Schrödinger equation was mainly considered in this respect. Our observation consists in that this situation emerges automatically in spherical coordinates, as one of the coordinates, namely, radial distance, is restricted by a half-line. In particular, these considerations are clearly manifested when one considers spherically symmetric potentials and operators depending only on distance. Evidently, these additional terms arise owing to the boundary conditions for wave functions and the behavior of the considered operators at the origin of coordinates. We have analyzed the role of these additional terms for various model potentials in the Schrödinger equation. We consider regular as well as soft-singular potentials, and show that the inclusion of these terms is very important for obtaining correct physical results. Some complicated integrals for hypergeometric functions are also derived.

The modified virial relations, derived below, are converted into the usual ones, when the additional terms are absent, and when present, they give reasonable corrections in the right direction. This fact also provides their legitimacy.

Хорошо известно, что, когда физическая система находится в ограниченной области, в традиционной форме гипервириальных соотношений и/или теорем Эренфеста появляются дополнительные «поверхностные члены». В текущих публикациях в основном рассматриваются одномерные задачи в уравнении Шредингера. Наше наблюдение состоит в том, что такая ситуация возникает совершенно естественно в сферических координатах, поскольку одна из переменных — радиальное расстояние — автоматически ограничена полуосью. Особенно наглядно это проявляется, когда рассматриваются сферически-симметричные потенциалы и операторы, зависящие от расстояния. Очевидно, что дополнительные члены порождаются граничными условиями для волновых функций, а также поведением операторов в начале координат. Нами проанализирована роль этих членов для различных модельных потенциалов в уравнении Шредингера. Рассмотрены регулярные, а также слабосингулярные потенциалы, и

^{*}E-mail: anzor.khelashvili@tsu.ge

показано, что включение этих членов очень важно для получения правильных физических результатов. Также получены некоторые сложные интегралы для гипергеометрических функций.

Модифицированные вириальные теоремы, полученные в работе, становятся уже известными, когда дополнительные члены отсутствуют, и дают разумные поправки в правильном направлении, когда они присутствуют. Тем самым доказывается законность их наличия.

PACS: 03.65.-w; 03.65.Ca; 03.65.Ge; 03.65.Ta