Если известны волновые функции $\psi_0, \psi_1, \ldots, \psi_{n-1}$ первых $n$ состояний, расположенных в порядке возрастания энергии, то на волновой функции $\psi$ следующего состояния достигается минимум функционала $\int \psi^* H \psi \, dx$, при условиях $\int \psi \psi^* \, dx = 1$ и $\int \psi^* \psi_k \, dx = 0$, $k = 0, 1, \ldots, n-1$.

## 3. Одномерное движение

Пусть потенциальная энергия частицы зависит только от одной координаты: $V(x, y, z) = V(x)$. Тогда волновую функцию $\psi(x, y, z)$ можно искать в виде $\psi(x, y, z) = \psi_1(x)\psi_2(y, z)$, где $\psi_2(y, z)$ удовлетворяет уравнению Шредингера для свободной двумерной частицы, а $\psi_1(x)$ — одномерному уравнению Шредингера:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi_1 = 0.$$

Если потенциальная энергия частицы $V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$, то волновую функцию можно искать в виде $\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$, где каждая из $\psi_i$ удовлетворяет одномерному уравнению Шредингера

$$\frac{d^2\psi_i(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_i(x)]\psi_i = 0. \tag{2.4}$$

Покажем, что в одномерной задаче волновые функции финитных состояний имеют различные собственные значения (или, что то же самое, что «энергетические уровни дискретного спектра невырождены»).

Действительно, пусть есть два решения (2.4) $\psi_1$ и $\psi_2$ с одним значением $E$. Тогда

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)] = \frac{\psi_2''}{\psi_2}.$$

Следовательно, $\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = 0$. Интегрируя это уравнение, получаем $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = c$. Поскольку $\psi_1 = \psi_2 = 0$ при $x \to \infty$, то константа $c = 0$. Следовательно, $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = 0$, и, еще раз интегрируя, получаем $\psi_1 = c\psi_2$.

## Одномерное движение, поведение на бесконечности

Пусть $V$ имеет следующую форму, см. рис. 2.4.

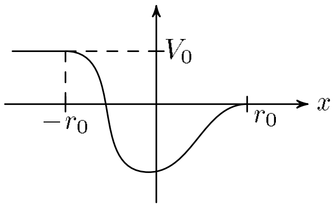



Рис. 2.4.

При таком потенциале волновые функции и их производные должны быть непрерывны. Кроме того, уравнение Шредингера

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0 \tag{2.5}$$

в области $|x| > r_0$ сводится к дифференциальным уравнениям с постоянными коэффициентами

$$\begin{cases} \psi'' + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi = 0, & x < -r_0, \\ \psi'' + \dfrac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0, & x > r_0. \end{cases} \tag{2.6}$$

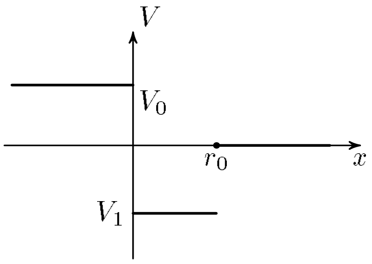
Как всегда, нас интересуют либо квадратично интегрируемые решения, которые являются собственными функциями оператора $H$, либо решения, ограниченные на всей числовой оси, описывающие непрерывный спектр $H$.

(1) $E < 0$. Обозначим $a_1^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$, $a_2^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}E$, $a_i > 0$. Тогда уравнения (2.6) имеют решения:

при $x < -r_0$ $\qquad \psi = c_1 e^{a_1 x} + c_2 e^{-a_1 x}$,
при $x > r_0$ $\qquad \psi = c_1' e^{a_2 x} + c_2' e^{-a_2 x}$.

Квадратичная интегрируемость $\psi$ при $x < -r_0$ означает, что $c_2 = 0$, т. е.при $x < -r_0$ $\psi = e^{\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{V_0 - E}\,x}$. Это же решение при $x > r_0$ является линейной комбинацией $c_1 e^{a_1 x} + c_2 e^{-a_1 x}$ и может быть квадратично интегрируемым только при $c_1 = 0$. Итак, мы стартуем с решения (2.5) $\psi = e^{\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{V_0 - E}\,x}$ при $x < -r_0$; это решение переписываем при $x > r_0$ через фундаментальные решения $c_1 e^{\sqrt{-E}\,x} + c_2 e^{-\sqrt{-E}\,x}$ и приравниваем нулю $c_1$. Уравнение $c_1 = 0$ является, на самом деле, уравнением на $E$: $c_1(E) = 0$. Корни этого уравнения и задают дискретный спектр оператора $H$.

Проделаем предыдущую процедуру явно в случае потенциала, изображенного на рис. 2.5:




$$V = \begin{cases} V_0, & x < 0, \\ V_1, & 0 \leqslant x < r_0, \\ 0, & x \geqslant r_0. \end{cases}$$

Рис. 2.5.

Найдем матрицу преобразования собственных функций (матрица монодромии) при переходе от $V_0$ к $V_1$, от $V_1$ к 0. Для этого обозначим $\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{V_0 - E} = a$, $\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{E - V_1} = b$, $\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{-E} = c$. Общие решение уравнения Шредингера записываются

$$\begin{cases} c_1 e^{ax} + c_2 e^{-ax}, & \text{при } x < 0, & (34) \\ c_1' e^{ibx} + c_2' e^{-ibx}, & \text{при } 0 \leq x < r_0, & (35) \\ c_1'' e^{cx} + c_2'' e^{-cx}, & \text{при } x > r_0, & (36) \end{cases}$$

1) Рассмотрим $\psi_1 = e^{ax}$. При переходе к (2) нужно записать условие непрерывности решения и производной в точке $x = 0$. Получаем систему

$$\begin{cases} c_{11}' + c_{21}' = 1, \\ ibc_{11}' - ibc_{21}' = a, \end{cases}$$

из которой получаем первый столбец матрицы $M_{V_0}^{V_1}$:

$$M_{V_0}^{V_1} = \begin{pmatrix} \frac{a+ib}{2ib} & * \\ \frac{-a+ib}{2ib} & * \end{pmatrix}.$$

Второй столбец получается из первого формальной заменой $a \mapsto -a$. Или

$$M_{V_0}^{V_1} = \begin{pmatrix} \frac{a+ib}{2ib} & \frac{-a+ib}{2ib} \\ \frac{-a+ib}{2ib} & \frac{a+ib}{2ib} \end{pmatrix}.$$

2) Аналогично рассмотрению предыдущего пункта, записывая условие непрерывности решения и производной в точке $x = r_0$, получаем линейные системы на коэффициенты матрицы $M_{V_0}^0$.

$$\textit{Ответ}: \quad M_{V_0}^0 = \begin{pmatrix} e^{(-c+ib)r_0}\frac{c+ib}{2c} & e^{(-c-ib)r_0}\frac{c-ib}{2c} \\ e^{(c+ib)r_0}\frac{c-ib}{2c} & e^{(c-ib)r_0}\frac{c+ib}{2c} \end{pmatrix}.$$

Отсюда следует, что уравнение $c_1(E) = 0$ на дискретный спектр $E$ эквивалентно

$$e^{ibr_0}(c+ib)(a+ib) + e^{-ibr_0}(c-ib)(-a+ib) = 0 \quad \text{или}$$

$$e^{2ibr_0} = \frac{(c-ib)}{(c+ib)}\frac{(a-ib)}{(a+ib)} \Leftrightarrow$$
$$\Leftrightarrow e^{\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}2i\sqrt{E-V_1}\,r_0} = \frac{(\sqrt{-E}-i\sqrt{E-V_1})(\sqrt{V_0-E}-i\sqrt{E-V_1})}{(\sqrt{-E}+i\sqrt{E-V_1})(\sqrt{V_0-E}+i\sqrt{E-V_1})} \qquad (2.7)$$

### Потенциальная яма

Потенциальной ямой называется потенциал следующего вида:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{при } x < 0 \text{ или } x \geqslant r_0, \\ V_1, & \text{при } 0 \leq x < r_0. \end{cases}$$

(см. рис. 2.6). Это частный случай потенциала на рис. 2.5 при $V_0 = 0$.

Уравнение на дискретный спектр оператора $H$ такого потенциала (2.7) упрощается. В результате получаем

$$e^{i\sqrt{E-V_1}r_0\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}} = \frac{\sqrt{-E}-i\sqrt{E-V_1}}{\sqrt{-E}+i\sqrt{E-V_1}}. \qquad (2.8)$$

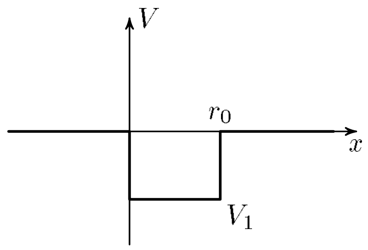



Рис. 2.6.

В случае потенциала

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{при } x < 0 \text{ или } x > r_0, \\ 0, & \text{при } 0 \le x \le r_0. \end{cases}$$

(потенциал с бесконечно высокими стенками) спектр полностью дискретный и имеет вид

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m r_0^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \ldots$$

## Линейный осциллятор

**Определение.** Линейным или гармоническим осциллятором называют физическую систему с гамильтонианом

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m^2 \omega^2 x^2}{2}.$$

## Спектр гармонического осциллятора

Заметим, что $\dfrac{H}{\hbar\omega} = \dfrac{p^2}{2m\hbar\omega} + \dfrac{m\omega x^2}{2\hbar}$ является безразмерной величиной. Введем следующие операторы, которые обычно называются операторами рождения и уничтожения частицы:

$$a = \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x,$$
$$a^+ = \frac{p}{\sqrt{2\hbar m\omega}} + i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x.$$

Если бы операторы $p$ и $x$ коммутировали, то $a \cdot a^+$ было бы разложением $\frac{H}{\hbar\omega}$ по формуле разности квадратов.

Легко проверить, что

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(aa^+ + a^+a); \quad [a, a^+] = 1; \quad H = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right).$$

Определим еще один оператор $\widehat{n} = a^+a$. Для него выполнены соотношения

$$\widehat{n}a^+ = a^+(\widehat{n} + 1),$$
$$\widehat{n}a = a(\widehat{n} - 1).$$

Рассмотрим собственную функцию (состояние) $\psi_0$ оператора $a$ такую, что $a\psi_0 = 0$.Тогда для $\psi_n = (a^+)^n\psi_0$ выполнено $\widehat{n}\psi_n = n\psi_n$.

Отсюда следует, что $\psi_n$ — собственные функции гамильтониана $H$, т. е.$H\psi_n = E_n\psi_n$ и $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$.

Окончательно получаем:

**Теорема.** Гармонический осциллятор обладает лишь дискретным спектром $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, т. е.расстояния между двумя ближайшими уровнями одинаковы и равны $\hbar\omega$.

## Собственные функции гармонического осциллятора

Чтобы найти собственные функции гармонического осциллятора, нужно решить уравнение $a\psi_0 = 0$, которое эквивалентно в координатном представлении (вспоминаем, что $\widehat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$, а $\widehat{x}$ — это умножение на $x$)

$$\frac{d}{dx}\psi_0 = -x\frac{m\omega}{\hbar}\psi_0, \tag{2.9}$$

откуда $\psi_0$ легко находится:

$$\psi_0 = c_0 e^{-\frac{x^2}{2b^2}}, \quad \text{где} \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Из определения $\psi_n = (a^+)^n\psi_0$ получаем

$$\psi_n(x) = \left(\frac{-i}{\sqrt{2}}\right)^n \left(b\frac{d}{dx} - \frac{x}{b}\right)^n \psi_0(x).$$

Естественно сделать замену $z = \dfrac{x}{b}$. Тогда

$$\begin{aligned}\psi_n(bz) &= \left(\frac{-i}{\sqrt{2}}\right)^n \left(\frac{d}{dz} - z\right)^n \psi_0(bz), \quad \text{или} \\ \psi_n(bz) &= \left(\frac{-i}{\sqrt{2}}\right)^n \left(\frac{d}{dz} - z\right)^n e^{-\frac{z^2}{2}}.\end{aligned} \tag{2.10}$$

**Определение.** Полиномы Эрмита $H_n(x)$ определяются из следующих соотношений:

$$\frac{d^n e^{-x^2/2}}{dx^n} = (-1)^n e^{-x^2/2} H_n(x).$$

При этом

1) $\int H_n(x) H_m(x) e^{-x^2/2}\, dx = 0$ при $n \neq m$;
2) $\int H_n^2(x) e^{-x^2/2}\, dx = n!\sqrt{2\pi}$;
3) $H_{n+1}(x) = x H_n(x) - \dfrac{d}{dx} H_n(x)$.

Система $\{H_n(x)\}$ полна в пространстве $L_{2,\rho}(\mathbb{R})$ с $\rho = e^{-x^2/2}$.

# 4. Движение в трехмерном пространстве

## Момент импульса

Пространство изотропно. Это означает, что все направления в нем должны быть эквивалентны. Поэтому гамильтониан замкнутой системы не меняется при поворотах. То есть $VH\psi = HV\psi$, где $V$ — оператор поворота. Если это свойство выполняется для бесконечно малого поворота, то оно будет выполняться и для любого поворота. Найдем вид генератора бесконечно малого поворота.

Пусть $\delta\vec{\varphi}$ — вектор бесконечно малого поворота, направленный по оси поворота и равный по величине углу поворота. Тогда $\delta\vec{r} = [\delta\vec{\varphi}, \vec{r}]$. Это верно для радиус-вектора $\vec{r}_a$ любой частицы $a$. Получаем

$$\begin{aligned}\delta\psi &= \psi(r_1 + \delta r_1, r_2 + \delta r_2, \ldots) - \psi(r_1, r_2, \ldots) = \\ &= \sum_a \delta r_a \nabla_a \psi = \delta\vec{\varphi} \sum [\vec{r}_a, \vec{\nabla}_a]\psi.\end{aligned}$$