Рассмотрим, в частности, частицу, движущуюся в потенциальной яме кубической формы, т. е. случай $l_1 = l_2 = l_3 = l$. Энергия частицы в этом случае равна

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right). \tag{9,9}$$

Из формулы (9,9) легко увидеть, что одно и то же значение энергии может осуществляться при помощи различных комбинаций чисел n_1, n_2 и n_3. Это означает, что несколько различных квантовых состояний с разными волновыми функциями отвечают одному и тому же значению энергии. Такие уровни энергии называются вырожденными, а число различных состояний, отвечающих данному уровню энергии, — кратностью вырождения.

Рассмотрим, например, уровень энергии

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \cdot 6,$$

где $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$. Так как каждое из n — целое число, большее нуля, то этому равенству можно удовлетворить тремя различными комбинациями чисел n_1, n_2, n_3:

$$\begin{aligned} &1)\ n_1 = 2, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 1,\\ &2)\ n_1 = 1, \quad n_2 = 2, \quad n_3 = 1,\\ &3)\ n_1 = 1, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 2. \end{aligned}$$

Таким образом, данному уровню энергии отвечают 3 различных состояния ψ_{211}, ψ_{121}, ψ_{112}. Следовательно, кратность вырождения данного уровня равна трем. С явлением вырождения мы часто будем сталкиваться при рассмотрении более сложных систем, например, атомов.

§ 10. Линейный осциллятор

Переходя к более сложным квантовомеханическим системам, мы остановимся на теории линейного гармонического осциллятора. Такой осциллятор представляет квантовый аналог частицы, совершающей малые линейные колебания около положения равновесия. Примером малых колебаний в атомных системах могут служить малые колебания атомов в молекуле (ср. § 41 ч. III).

Не менее важным примером может служить также тепловое движение кристалла, которое может быть представлено в виде совокупности линейных гармонических осцилляторов. С задачей о гармоническом осцилляторе мы встретимся также и в квантовой электродинамике, где произвольное электромагнитное поле представляется в виде суперпозиции независимых квантовых осцилляторов (см. § 101).

Приведенные примеры показывают, что теория линейного гармонического осциллятора является одной из важных задач квантовой механики.

Потенциальная энергия линейного гармонического осциллятора дается известной формулой $U=\frac{m\omega^2x^2}{2}$. Поэтому уравнение Шредингера (6,6) для линейного гармонического осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2}\psi=E\psi. \tag{10,1}$$

При его решении удобно перейти к безразмерным переменным

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x;\ \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{10,2}$$

В новых обозначениях уравнение Шредингера приобретает вид

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\xi^2\psi=\lambda\psi. \tag{10,3}$$

Важным отличием осциллятора от рассмотренных выше примеров является то, что в этом случае движение частицы не ограничено какой-либо непроницаемой стенкой. Поэтому у осциллятора нет граничных условий, подобных условиям (8,1). Единственным требованием, которое налагается на волновую функцию осциллятора, является требование ее квадратичной интегрируемости. Мы увидим, что уравнение Шредингера для осциллятора имеет решение, удовлетворяющее последнему требованию, только при некоторых вполне определенных значениях параметра λ. Эти значения называются собственными значениями уравнения (10,3).

Для того чтобы выяснить общий характер решений последнего уравнения, рассмотрим асимптотическое поведение $\psi(\xi)$ при очень больших значениях аргумента $\xi\gg\lambda$.

При $\xi\gg\lambda$ в уравнении (10,3) можно опустить $\lambda\psi$ по сравнению с $\xi^2\psi$. При этом имеем, очевидно,

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}-\xi^2\psi=0. \tag{10,4}$$

Асимптотическим решением последнего уравнения, удовлетворяющим требованию конечности при больших ξ, служит функция

$$\psi=A\xi^m e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \tag{10,5}$$

где A — некоторая постоянная и m — любое конечное число.

Второе независимое решение уравнения (10,4) $\psi \sim e^{+\frac{\xi^2}{2}}$ неограниченно возрастает при $\xi \to \infty$ и должно быть опущено.

Будем пытаться искать решение уравнения (10,3) в виде

$$\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi), \tag{10,6}$$

где $f(\xi)$ — новая неизвестная функция, которая при $\xi \to \infty$ ведет себя как ξ^m. Подставляя (10,6) в (10,3), приходим к следующему уравнению для функции f:

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} - 2\xi \frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1) f = 0. \tag{10,7}$$

Поскольку точка $\xi = 0$ не является особой точкой уравнения (10,7), решение этого уравнения будем искать в виде степенного ряда

$$f(\xi) = \sum_{k=0} a_k \xi^k. \tag{10,8}$$

Производные $\frac{df}{d\xi}$ и $\frac{d^2 f}{d\xi^2}$ имеют вид

$$\frac{df}{d\xi} = \sum k a_k \xi^{k-1}, \quad \frac{d^2 f}{d\xi^2} = \sum k(k-1) a_k \xi^{k-2}. \tag{10,9}$$

Подставляем ряды (10,9) в уравнение (10,7), получаем

$$\sum k(k-1) a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum a_k \xi^k = 0. \tag{10,10}$$

Для того чтобы степенной ряд вида $\sum\limits_n c_n \xi^n$ был тождественно равен нулю, необходимо, чтобы обращались в нуль все коэффициенты c_n. Полагая равным нулю коэффициент при ξ^k, получаем рекуррентную формулу

$$a_{k+2} = \frac{2k + 1 - \lambda}{(k+2)(k+1)} a_k. \tag{10,11}$$

Нетрудно видеть, что при $\xi \to \infty$ такой ряд ведет себя, как e^{ξ^2}, так как в этом случае существенны большие k и (10,11) дает $a_{k+2} \approx (^2/_k) a_k$. При этом функция ψ (10, 6) неограниченно возрастает. Но такое решение должно быть опущено.

Мы получим решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности и ведущее себя при $\xi \to \infty$ как (10,5) только в том случае, если ряд (10,8) сведется к полиному, т. е. оборвется на каком-то члене. Так, предположим, что $a_n \neq 0$, $a_{n+2} = 0$. Тогда все последующие коэффициенты также обратятся в нуль, и функция f сведется к полиному n-й степени.

Из (10,11) следует, что при этом выполняется условие

$$2n + 1 - \lambda = 0, \tag{10,12}$$

где n — целое число, $n \geqslant 0$, так как n — это номер члена, на котором ряд обрывается.

Подставляя в (10,2) значение λ, получаем

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \qquad (10,13)$$

Отсюда видно, что энергия осциллятора может принимать только дискретные значения, причем уровни энергии расположены друг от друга на одинаковых расстояниях, равных $\hbar\omega$.

Выпишем волновую функцию, отвечающую n-му возбужденному уровню энергии в виде

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} f_n(\xi), \qquad (10,14)$$

где $f_n(\xi)$ — полином n-й степени с коэффициентами, определяемыми соотношением (10, 11), и A_n — множитель, определяемый условием нормировки. Полиномы $f_n(\xi)$ носят название полиномов Чебышева — Эрмита и обозначаются через $H_n(\xi)$. Полиномы Чебышева — Эрмита часто представляют в виде

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \qquad (10,15)$$

Они удовлетворяют дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0, \qquad (10,16)$$

которое получается из (10, 7) с учетом условия (10, 12).

Выпишем несколько первых полиномов Чебышева — Эрмита:

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,$$
$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi, \quad H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12. \qquad (10,17)$$

Зная общий вид полиномов Чебышева — Эрмита, можно вычислить нормировочный интеграл. При этом для A_n получается [1])

$$A_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \sqrt{\frac{1}{n!\,2^n}}. \qquad (10,18)$$

Вид волновых функций для разных квантовых чисел n указан на рис. 3. Отметим, что волновая функция, отвечающая основному состоянию осциллятора $n = 0$, нигде не обращается в нуль. Волновая функция $\psi_1(x)$, отвечающая уровню $n = 1$, обращается в нуль один раз при $x = 0$, $\psi_2(x)$ $(n = 2)$ обращается в нуль два раза и т. д. Точки, в которых волновая функция обращается в нуль, называются узлами волновой функции. Легко заметить,

[1]) См., например, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 94.

что число узлов волновой функции равно квантовому числу n. Последнее утверждение не является специфическим для осциллятора. Можно утверждать, что вообще в одномерном случае

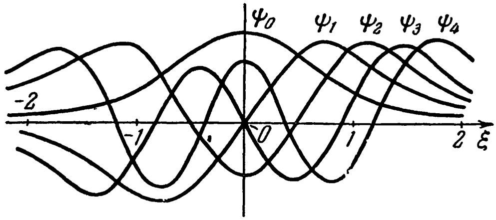

Рис. 3.

число узлов волновой функции определяется квантовым числом n [1]). Вероятность найти частицу в точке x, в интервале dx равна

$$W_n(x)\,dx = |\psi_n(x)|^2\,dx.$$

Эти вероятности для разных n изображены на рис. 4. Сравним полученные выражения с вероятностью нахождения частицы в данной точке, вычисленной с помощью классической механики. Последняя определяется как отношение времени dt пребывания в окрестности данной точки к периоду движения. Классическая вероятность оказывается наибольшей вблизи точек поворота $x = \pm x_0$, в которых скорость движения обращается в нуль. Напротив, в окрестности точки $x=0$ частица имеет наибольшую скорость и вероятность ее обнаружения минимальна.

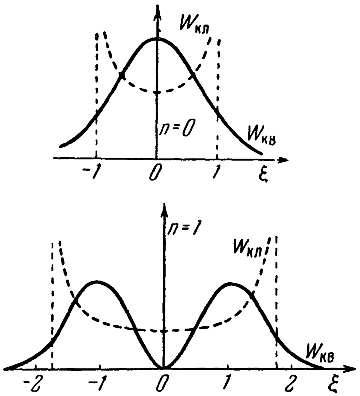

Рис. 4.

Из рассмотрения кривых рис. 4 видно, что вероятность найти квантовую частицу отлична от нуля и в классически недостижимой области за пределами точек поворота. При больших квантовых числах (рис. 5) в согласии с принципом соответствия квантовое распределение вероятности приближается к классическому.

В заключение отметим, что наименьшее возможное значение энергии осциллятора, равное $\frac{\hbar\omega}{2}$, отлично от нуля. Это озна-

[1]) Р. Курант и Д. Гильберт, Методы математической физики, Гостехиздат, 1951, т. I, стр. 382.

чает, что квантовый осциллятор никогда не может находиться в состоянии абсолютного покоя. Это обстоятельство в свою очередь связано с соотношением неопределенности. По порядку величины энергия осциллятора равна

$$E \geqslant \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\Delta x^2 \geqslant \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\left(\frac{\hbar}{\Delta p}\right)^2.$$

Рассматривая эту величину как функцию Δp, легко установить, что она минимальна при $\Delta p \sim (m\omega\hbar)^{1/2}$ и по порядку

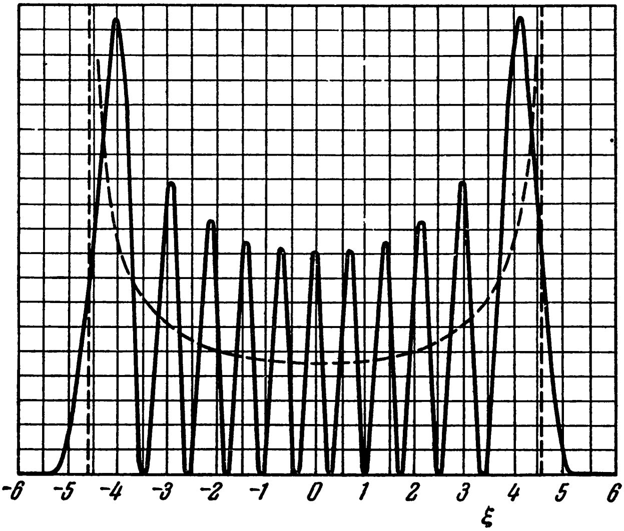

Рис. 5.

величины равна $\hbar\omega$. Экспериментально нулевая энергия E_0 наблюдается при рассеянии света кристаллом, находящимся при температуре, близкой к абсолютному нулю. При абсолютном нуле кристалл находится в основном (низшем) энергетическом состоянии. Тем не менее атомы совершают нулевые колебания, которые вызывают рассеяние света.

§ 11. Трехмерный осциллятор

Рассмотрим теперь движение пространственного трехмерного осциллятора. Для общности будем считать, что в трех взаимно перпендикулярных направлениях собственные частоты различны и равны соответственно ω_1, ω_2, ω_3. Тогда потенциальная