Раздел II. ОБЩИЕ СВОЙСТВА ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

§ 8. Свойства вронскиана

Вернемся к уравнению

$$y'' + [\varepsilon - U(x)]\, y = 0. \tag{25}$$

Выведем несколько общих свойств этого уравнения на собственные значения. В дальнейшем будем требовать ограниченности вещественной функции $U(x)$, допуская только конечное число разрывов первого рода на всем интервале $(-\infty, +\infty)$.

Большое число интересующих нас свойств этого уравнения непосредственно вытекает из важной теоремы, касающейся определителя Вронского, составленного из двух решений уравнения; эту теорему мы будем в дальнейшем называть *теоремой вронскиана.*

Определителем Вронского, или вронскианом двух функций y_1 и y_2 называется выражение

$$W(y_1, y_2) \equiv y_1 y_2' - y_2 y_1'.$$

Это выражение антисимметрично по отношению к перестановке функций y_1 и y_2. Если вронскиан равен нулю в некоторой точке на оси x, функции y_1 и y_2 имеют в этой точке равные логарифмические производные; если вронскиан равен нулю на всем интервале $(-\infty, +\infty)$, функции пропорциональны друг другу.

Теорема вронскиана. *Если z_1 и z_2 являются соответственно решениями уравнений*

$$z_1'' + F_1(x)\, z_1 = 0, \tag{25'}$$

$$z_2'' + F_2(x)\, z_2 = 0 \tag{25''}$$

в интервале (a, b), где функции $F_1(x)$ и $F_2(x)$ непрерывны или имеют разрывы только первого рода, то изменение вронскиана на этом интервале дается выражением

$$W(z_1, z_2)\,\Big|_a^b = \int_a^b [F_1(x) - F_2(x)]\, z_1 z_2\, dx. \tag{26}$$

Чтобы доказать эту теорему, умножим уравнение (25′) на z_2, а уравнение (25″) — на z_1 и вычтем полученные выражения одно из другого. Получаем

$$(z_2 z_1'' - z_1 z_2'') + (F_1 - F_2)\, z_1 z_2 = 0.$$

Первый член в круглых скобках есть (с точностью до знака) производная вронскиана по x. Интегрируя равенство по x в интервале (a, b), получаем соотношение (26).

Эта теорема оказывается особенно полезной, когда уравнения (25′) или (25″) являются уравнениями типа (5) с одним и тем же потенциалом $U(x)$ и с заданными значениями энергии ε. В этом случае получаем три важных следствия:

Следствие 1. Если y_1 и y_2 являются решениями уравнения (5), соответствующими значениям ε_1 и ε_2 постоянной ε, то для всяких двух значений a и b переменной x из области определения решений имеем

$$W(y_1,\ y_2)\big|_a^b = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\int_a^b y_1 y_2\, dx. \tag{27}$$

Следствие 2. Если y и z являются двумя решениями уравнения (5), соответствующими одному значению ε, их вронскиан не зависит от x

$$W(y,\ z) = \text{const}.$$

Следствие 3. Пусть $Y(x;\varepsilon)$ есть решение уравнения (5), логарифмическая производная которого (по переменной x) имеет определенное значение f_a в точке $x = a$, и пусть $f(x;\varepsilon)$ есть логарифмическая производная этого решения в произвольной точке x. Рассматриваемая как функция ε, величина $f(x;\varepsilon)$ является монотонной функцией этой переменной, растущей при $x < a$ и убывающей при $x > a$, причем производная равна

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{Y^2(x;\ \varepsilon)}\int_a^x Y^2(\xi;\ \varepsilon)\, d\xi \tag{28}$$

(как функция ε, величина $f(x;\varepsilon)$ ведет себя подобно тангенсу или котангенсу при наличии вертикальной асимптоты в каждой точке, где $Y(x)$ обращается в нуль).

Следствия 1 и 2 непосредственно вытекают из теоремы вронскиана. Доказательство следствия 3 таково. Если ε фиксировано, то решение уравнения (5) полностью определяется при задании значения решения и его производной в некоторой точке $x = a$ на оси x. Пусть $Y(x;\varepsilon)$ есть это частное решение:

$$Y(a;\ \varepsilon) = y_a, \qquad Y'(a;\ \varepsilon) = y'_a.$$

Если теперь изменять ε, сохраняя неизменными указанные условия, то $Y(x;\varepsilon)$ будет некоторой непрерывной функцией ε (и x). Двум бесконечно близким значениям ε, $\varepsilon + \delta\varepsilon$ соответствуют два бесконечно близких выражения Y, $Y + \delta Y$. Применим к ним следствие 1 на интервале (a, b):

$$W(Y,\ Y + \delta Y)\big|_a^b = -\delta\varepsilon\int_a^b Y^2\, dx.$$

При $x = a$ согласно предположению $W(Y, Y + \delta Y) = 0$. Для всякого другого значения x

$$W(Y, Y + \delta Y) = Y\delta Y' - Y'\delta Y = Y^2\delta\left(\frac{Y'}{Y}\right) = Y^2\delta f.$$

Здесь мы положили $f = Y'/Y$. Логарифмическая производная f, подобно Y, является непрерывной функцией ε и x. Поэтому

$$-Y^2\delta f\,|_{x=b} = \delta\varepsilon\int\limits_a^b Y^2\,dx$$

или

$$\left.\frac{\partial f}{\partial\varepsilon}\right|_{x=b} = -\frac{1}{Y^2(b)}\int\limits_a^b Y^2(x)\,dx,$$

что и требовалось доказать.

Свойства решений уравнения Шредингера, вытекающие из указанных трех следствий теоремы вронскиана, имеют большое значение, так как эти свойства не зависят от конкретной формы потенциала $U(x)$.

§ 9. Асимптотическое поведение решений

Асимптотическая форма общего решения уравнения (5) на краях интервала $(-\infty, +\infty)$ существенно зависит от знака разности $\varepsilon - U$ при x, стремящемся к одному из пределов $\pm\infty$. Рассмотрим асимптотическую форму решения при $x \to +\infty$. Аналогичные результаты получаются и при $x \to -\infty$. Допустим, что $\varepsilon - U(x)$ не меняет знака, когда x превосходит некоторое значение x_0. При этом возможны два случая.

1) $\varepsilon > U(x)$, *когда* $x > x_0$. Предположим (так обычно бывает на практике), что при $x \to \infty$ функция $U(x)$ монотонно стремится к конечному пределу U_+. Положим $k = \sqrt{\varepsilon - U_+}$.

Мы покажем, что при $x \to \infty$:

— вещественные решения уравнения (5) остаются ограниченными и бесконечно осциллируют между двумя противоположными значениями;

— если, кроме того, $U(x)$ стремится к U_+ быстрее, чем $1/x$, то

$$y \underset{x\to\infty}{\sim} A_+ \sin(kx + \varphi_+), \tag{29}$$

где A_+ и φ_+ суть две вещественные постоянные.

Для доказательства заметим, что уравнение (5) «асимптотически стремится» к уравнению $z'' + k^2 z = 0$, общее решение которого есть $A\sin(kx+\varphi)$, т. е. зависит от двух произвольных постоянных A и φ. Чтобы найти асимптотическую форму y, введем (метод вариации постоянных) функции $A(x)$ и $\varphi(x)$, определенные равенствами

$$y = A\sin(kx+\varphi), \qquad y' = Ak\cos(kx+\varphi). \tag{30}$$

Уравнение (5) эквивалентно двум дифференциальным уравнениям первого порядка:

$$\frac{A'}{A} = \frac{U-U_+}{2k}\sin 2(kx+\varphi), \qquad \varphi' = -\frac{U-U_+}{k}\sin^2(kx+\varphi).$$

Отсюда интегрированием получаем

$$A(x) = A(x_0)\exp\left\{\int\limits_{x_0}^{x}\frac{U(\xi)-U_+}{2k}\sin 2[k\xi+\varphi(\xi)]\,d\xi\right\}, \tag{31}$$

$$\varphi(x) = \varphi(x_0) - \int\limits_{x_0}^{x}\frac{U(\xi)-U_+}{k}\sin^2[k\xi+\varphi(\xi)]\,d\xi. \tag{32}$$

Интеграл в правой части (31) сходится, поэтому при $x\to\infty$ функция $A(x)$ стремится к конечному пределу A_+. Далее, поскольку $\varphi'\to 0$, функция $\sin(kx+\varphi)$ в выражении (30) осциллирует с периодом, который асимптотически стремится к $2\pi/k$. Это доказывает первый из формулированных выше результатов. Если, кроме того, $U(x)$ стремится к U_+ быстрее, чем $1/x$, то сходится и интеграл в правой части уравнения (32); в этом случае обе функции A и φ стремятся к конечным пределам A_+ и φ_+, соответственно, что доказывает справедливость асимптотической формы (29).

2) $\varepsilon < U(x)$, *когда* $x > x_0$. Результаты, которые мы получим, не зависят от поведения $U(x)$ на бесконечности. Предположим только, что

$$U(x) - \varepsilon \geqslant M^2 > 0 \quad \text{при} \quad x > x_0.$$

Этот случай соответствует экспоненциальным решениям в задачах с прямоугольным потенциалом.

Мы покажем, что при $x\to\infty$:

— существует одно частное решение (определенное с точностью до постоянного множителя) уравнения (5), стремящееся к 0 не медленнее, чем e^{-Mx};

— все другие решения стремятся к ∞ не медленнее, чем e^{Mx}.

Поскольку решения определены с точностью до постоянной, фиксируем эту постоянную условием $y(x_0) = 1$ и рассмотрим поведение решений, удовлетворяющих этому условию нормировки. Некоторые из таких решений представлены на рис. 15.

Обозначим через $Y(x)$ и $Z(x)$ частные решения, определенные условиями

$$Y(x_0) = 1, \quad Y'(x_0) = 0 \quad \text{и} \quad Z(x_0) = 0, \quad Z'(x_0) = 1;$$

тогда искомые решения можно записать в виде

$$y(x) = Y(x) + fZ(x). \tag{33}$$

Параметр $f = y'(x_0)$ может принимать все значения между $-\infty$ и $+\infty$.

Решения $Y(x)$ и $Z(x)$ остаются положительными во всем интервале (x_0, ∞) и стремятся к бесконечности не медленнее, чем e^{Mx}. Действительно, как всякое решение уравнения (5), эти функции всюду имеют тот же знак, что и их вторые производные. Отсюда следует, если учесть начальные условия, что они могут только бесконечно расти, причем график все время остается выпуклым вниз. Чтобы оценить скорость возрастания, заметим, что $Y'' \geqslant M^2 Y$ и $Z'' \geqslant M^2 Z$ и сравним эти функции с решениями дифференциального уравнения $u'' - M^2 u = 0$, удовлетворяющими тем же начальным условиям в точке x_0, а именно $\operatorname{ch} M(x - x_0)$ и $\operatorname{sh} M(x - x_0)$, соответственно; Y и Z всюду больше этих решений (или равны им).

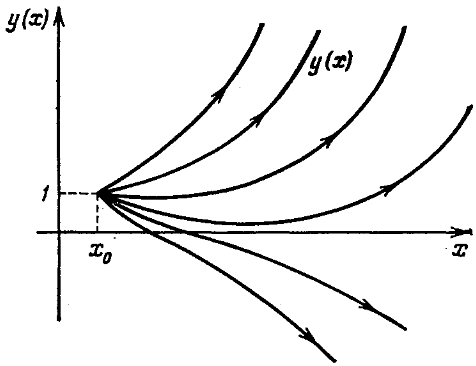

Рис. 15. Диаграмма, представляющая некоторые решения уравнения (5), удовлетворяющие условию $y(x_0) = 1$ в случае, когда $U(x) - \varepsilon \geqslant M^2 > 0$ для $x > x_0$.

Применяя теорему вронскиана, имеем

$$W(Y, \operatorname{ch} M(x - x_0)) \leqslant 0,$$

поэтому

$$\frac{Y'}{Y} \geqslant M \operatorname{th} M(x - x_0).$$

Интегрируя, получаем

$$Y \geqslant \operatorname{ch} M(x - x_0).$$

Аналогично доказываем, что $Z \geqslant \operatorname{sh} M(x - x_0)$. Заметим попутно, что

$$Y' \geqslant MY \operatorname{th} M(x - x_0),$$

поэтому на бесконечности $Y' \geqslant MY$; аналогично на бесконечности $Z' \geqslant MZ$.

С другой стороны (следствие 2)

$$Z'Y - Y'Z = 1 \quad \text{при любом} \quad x. \tag{34}$$

Введем функции

$$u(x) \equiv \frac{Y}{Z}, \qquad v(x) \equiv \frac{Y'}{Z'}.$$

Из равенства (34) и того факта, что Y и Z являются решениями уравнения (5), следует:

$$\left.\begin{aligned} u - v &\equiv \frac{Y}{Z} - \frac{Y'}{Z'} = \frac{1}{ZZ'}, \\ u' &= \frac{Y'Z - YZ'}{Z^2} = -\frac{1}{Z^2}, \\ v' &= \frac{Y''Z' - Y'Z''}{Z'^2} = \frac{U - \varepsilon}{Z'^2}. \end{aligned}\right\} \tag{35}$$

В интервале (x_0, ∞) u есть убывающая функция, а v — функция возрастающая, причем их разность на бесконечности обращается в нуль. Поэтому они имеют общий (положительный) предел C при $x \to \infty$ и

$$v(x) < C < u(x).$$

Учитывая (35), это неравенство можно переписать в виде

$$-\frac{1}{ZZ'} < v - C < 0 < u - C < \frac{1}{ZZ'}. \tag{36}$$

Частное решение

$$\mathring{y}(x) \equiv Y - CZ = [u(x) - C]\,Z(x)$$

и его производная

$$\mathring{y}'(x) \equiv Y' - CZ' = [v(x) - C]\,Z'(x)$$

удовлетворяют всюду неравенствам

$$-\frac{1}{Z} < \mathring{y}' < 0 < \mathring{y} < \frac{1}{Z'}.$$

Всюду положительная функция $\mathring{y}$ стремится к нулю не медлениее, чем $1/Z'$ и, следовательно, не медленнее, чем e^{-Mx}. Всюду отрицательная функция $\mathring{y}'$ стремится к нулю не медленнее, чем e^{-Mx}. Решение $\mathring{y}$ есть решение, обращающееся в нуль на бесконечности, которое мы ищем.

Не существует других решений, обладающих этим свойством, так как если $f \neq -C$, то решение $y(x)$ может быть записано в виде

$$y = \mathring{y} + (f + C)\,Z,$$

и его асимптотическое поведение совпадает с поведением функции Z с точностью до отличного от нуля множителя $f + C$.

§ 10. Структура спектра собственных значений

Пусть U_+ и U_- являются предельными значениями $U(x)$ при $x \to +\infty$ и $x \to -\infty$ соответственно. Дальнейшие выводы остаются справедливыми, если одно и (или) другое предельные значения оказываются равными $+\infty$. Величины U_+ и U_- делят область изменения ε на три области, в которых спектр собственных значений имеет различную природу. Положим, для определенности, что $U_+ < U_-$.

В области $\varepsilon > U_-$ разность $\varepsilon - U(x)$ остается положительной на обоих концах интервала $(-\infty, +\infty)$. Всякое решение уравнения (5), ограниченное при $x \to \pm\infty$, допустимо в качестве собственной функции, поэтому ε есть двукратно вырожденное собственное значение. Спектр собственных значений *непрерывный* и *вырожденный*. С другой стороны, в обеих асимптотических областях собственные функции бесконечно осциллируют между двумя противоположными конечными предельными значениями: они представляют *несвязанные состояния.*

В области $U_- > \varepsilon > U_+$, где разность $\varepsilon - U(x)$ в пределе $x \to -\infty$ отрицательна, существует только одно ограниченное (экспоненциально убывающее) решение, в отрицательной асимптотической области. Это решение остается ограниченным и бесконечно осциллирует в другой асимптотической области, так как разность $\varepsilon - U(x)$ в этой области положительна. Следовательно, это решение допустимо в качестве собственной функции и представляет несвязанное состояние. Спектр собственных значений *непрерывный невырожденный.*

Когда $U_+ > \varepsilon$, разность $\varepsilon - U(x)$ отрицательна в обеих асимптотических областях. Ограниченное решение, если оно существует, обращается в нуль (эспоненциально) на обоих концах интервала $(-\infty, +\infty)$ и представляет *связанное состояние.* Но оно существует только при некоторых определенных дискретных значениях ε. Действительно, пусть $\hat{y}_-$ есть решение, обращающееся в нуль при $x \to -\infty$, а $\hat{y}_+$ — решение, обращающееся в нуль при $x \to +\infty$, f_- и f_+ соответственно их логарифмические производные в некоторой точке на оси x. Величина ε есть собственное значение в том и только в том случае, если $\hat{y}_-$ и $\hat{y}_+$ равны (с точностью до постоянного фактора), т. е. если $f_- = f_+$. Но, рассматриваемые как функции энергии ε, f_- есть монотонно убывающая функция, а f_+ — монотонно возрастающая функция (следствие 3)[4]). Они могут быть равны друг другу только при некоторых изолированных значениях ε. Спектр *дискретный* и *невырожденный.*

Число собственных значений дискретного спектра существенно зависит от формы функции $U(x)$. Оно может изменяться от 0 до бесконечности. Число дискретных собственных значений очевидно равно нулю, если функция $U(x)$ всюду превосходит наименьшее (U_+) из двух асимптотических значений. Вообще же можно показать (здесь мы это примем без доказательства), что число дискретных собственных значений оказывается порядка величины

$$\frac{1}{\pi}\int \sqrt{U_+ - U(x)}\, dx = \frac{1}{\pi}\int \frac{\sqrt{2m\,(V_+ - V(x))}}{\hbar}\, dx,$$

где интегрирование распространено на ту область оси x, где $U(x) < U_+$. В частности, если этот интеграл расходится, число собственных значений дискретного спектра бесконечно.

§ 11. Состояния непрерывного спектра: отражение и прохождение волн

Собственные функции непрерывной и двукратно вырожденной части спектра позволяют представить движение частично проходящих и частично отраженных волновых пакетов в поле потенциала $U(x)$. Чтобы избежать трудностей, предположим, что $U(x)$ стремится к своим асимптотическим значениям

[4]) Дело идет о распространении следствия 3 на случай, когда $a = +\infty$ или $a = -\infty$. Нетрудно видеть, что следствие по-прежнему справедливо, если только несколько изменить определение функции $Y(x, \varepsilon)$. Эта функция должна быть решением уравнения (5), обращающемся в нуль (вместе со своей производной) в точке $a (= \pm\infty)$. Заметим, что f_- и f_+ при некоторых значениях ε могут обладать вертикальными асимптотами.

U_+ и U_- быстрее, чем $1/x$, так чтобы можно было использовать асимптотическую форму (29) вещественных собственных функций.

Интересующие нас волновые пакеты могут быть построены с помощью собственных функций двух типов. Функции первого типа $u(x)$ суть функции, поведение которых в двух асимптотических областях выражается соотношениями

$$u \underset{x\to-\infty}{\sim} e^{ik_-x} + R_u e^{-ik_-x},$$
$$u \underset{x\to+\infty}{\sim} S_u e^{ik_+x} \quad \left(k_\pm = \sqrt{\varepsilon - U_\pm}\right).$$

Волновой пакет вида (9) представляет падающую волну e^{ik_-x}, движущуюся из $-\infty$ в положительном направлении, которая затем попадает в зону действия потенциала $U(x)$ и разделяется на отраженную волну $R_u e^{-ik_-x}$, движущуюся в противоположном направлении и прошедшую волну $S_u e^{ik_+x}$, распространяющуюся в направлении $+\infty$ (рис. 16, *а*).

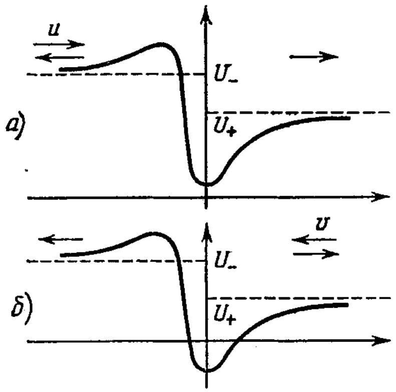

Рис. 16. Отражение и прохождение волны через потенциал: *а*) решение типа *u*: волна, приходящая со стороны отрицательных *x*; *б*) решение типа *v*; волна, приходящая со стороны положительных *x*.

Функции второго типа $v(x)$ асимптотически представляются формулами

$$v \underset{x\to-\infty}{\sim} S_v e^{-ik_-x},$$
$$v \underset{x\to+\infty}{\sim} e^{-ik_+x} + R_v e^{ik_+x},$$

что позволяет описать аналогичный волновой пакет, распространяющийся в противоположном направлении (рис. 16, *б*).

Функции u, v и комплексно сопряженные функции u^*, v^* являются решениями одного уравнения Шредингера. Рассмотрим вронскиан, образованный двумя из этих решений, он не зависит от x (следствие 2). Записывая условие его тождественности в двух асимптотических областях, можно получить соотношение между коэффициентами R_u, S_u, R_v, S_v или комплексно сопряженными величинами. Существует столько соотношений этого вида, сколько можно построить различных пар из функций u, v, u^*, v^*, т. е. всего шесть соотношений, не зависящих от конкретной формы потенциала $U(x)$.

Получаем [5]):

$$\frac{i}{2} W(u, u^*) = k_-(1 - |R_u|^2) = k_+ |S_u|^2, \tag{37}$$

$$\frac{i}{2} W(v, v^*) = -k_- |S_v|^2 = -k_+(1 - |R_v|^2), \tag{38}$$

$$\frac{i}{2} W(u, v) = k_- S_v = k_+ S_u, \tag{39}$$

$$\frac{i}{2} W(u, v^*) = -k_- R_u S_v^* = k_+ S_u R_v^*, \tag{40}$$

а также еще два соотношения, получаемые из двух последних переходом к комплексно сопряженным величинам.

Уравнения (37) и (38) называются соотношениями *сохранения потока*; мы их уже проверили ранее в конкретных случаях (уравнения (13) и (24)). Происхождение названия следует из следующего истолкования волновой функции ψ несвязанного состояния в асимптотической области (обоснованность этого истолкования мы подробно рассмотрим в гл. X при изучении проблем рассеяния). Пусть $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ есть форма волновой функции ψ в одной из асимптотических областей, скажем при $x \to -\infty$. Если с помощью этой волновой функции образовать волновой пакет вида (9), то он будет состоять из двух членов: один, образованный из Ae^{ikx}, имеет относительную интенсивность $|A|^2$ и распространяется в направлении возрастающих x со скоростью $\hbar k/m$, другой, образованный из Be^{-ikx}, имеет интенсивность $|B|^2$ и распространяется с той же скоростью в противоположном направлении. Полный поток частиц в некоторой точке в направлении возрастающих x есть разность между потоком $(\hbar k/m)|A|^2$ частиц, движущихся в положительном направлении, и потоком $(\hbar k/m)|B|^2$ частиц, движущихся в отрицательном направлении. С точностью до постоянного множителя он равен вронскиану $W(\psi, \psi^*)$:

$$\frac{\hbar k}{m}(|A|^2 - |B|^2) = \frac{i}{2}\frac{\hbar k}{m} W(\psi, \psi^*).$$

Тот факт, что на концах интервала $(-\infty, +\infty)$ вронскиан имеет одинаковые значения, означает, что число частиц, входящих в зону действия потенциала в единицу времени, равно числу частиц, выходящих из этой зоны в тот же промежуток времени.

Согласно этой интерпретации каждое из уравнений (37) и (38) может быть записано в виде:

падающий поток — отраженный поток = проходящему потоку.

---

[5]) Вычисление особенно упрощается, если учесть свойство антисимметричности вронскиана и равенства

$$W(e^{ikx}, e^{ikx}) = W(e^{-ikx}, e^{-ikx}) = 0, \quad W(e^{-ikx}, e^{ikx}) = 2ik.$$

Следуя той же интерпретации, можно определить *коэффициент прохождения* T отношением

$$T \equiv \frac{\text{проходящий поток}}{\text{падающий поток}}.$$

В частности, имеем

$$T_u = \frac{k_+}{k_-} |S_u|^2, \quad T_v = \frac{k_-}{k_+} |S_v|^2.$$

Учитывая равенство модулей обеих частей уравнения (39), получаем равенство

$$T_u = T_v. \qquad (41)$$

При заданной энергии коэффициент прохождения волны не зависит от направления распространения. Это — *свойство взаимности* коэффициента прохождения, отмеченное уже на стр. 92 и 100. Можно сказать, что проницаемость барьера в обоих направлениях одинакова.

Равенство модулей обеих частей уравнения (40) вместе с соотношениями сохранения (37) и (38) вновь дает соотношение взаимности (41).

Из уравнений (39) и (40) можно получить также соотношения между фазами комплексных амплитуд отражения и прохождения:

$$\text{фаза } (S_u) = \text{фазе } (S_v),$$

$$\text{фаза } \left(\frac{R_u}{S_u}\right) = \pi - \text{фаза } \left(\frac{R_v}{S_v}\right).$$

Эти соотношения могут представить интерес, если связывать фазы с некоторым «запаздыванием» в распространении волновых пакетов. Мы несколько раз отмечали, что величина $\hbar\partial$ (фаза)$/\partial E$, т. е. умноженная на $\hbar$ производная фазы комплексных амплитуд отражения или прохождения по энергии (величина с размерностью времени), может быть интерпретирована как «запаздывание» волны в явлениях отражения и прохождения. Это истолкование распространяется и на общий случай.

§ 12. Число узлов связанных состояний

Рассмотрим теперь собственные функции (если они существуют) дискретного спектра. В этом случае нет вырождения; следовательно, эти функции наверняка действительны с точностью до постоянного фазового множителя.

Вернемся к обозначениям на стр. 103. Предположим, что функции y_1 и y_2 действительны, $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ и применим соотношение (27), взяв в качестве пределов интегрирования два последовательных нуля функции y_1. Получаем

$$y_2 y_1' \Big|_a^b = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_a^b y_1 y_2 \, dx.$$

В интервале (a, b) функция y_1 сохраняет свой знак. Предположим, например, что $y_1 > 0$. В этом случае $y_1'(a) > 0$, $y_1'(b) < 0$. Следовательно, функция y_2 в интервале (a, b) наверняка меняет знак. Если бы это было не так, то правая часть уравнения имела бы знак y_2, а левая часть — противоположный знак. Поэтому y_2 обязательно имеет по крайней мере один нуль внутри интервала (a, b). Между двумя узлами y_1 всегда имеется по крайней мере один узел y_2.

Предположим, что y_1 и y_2 являются собственными функциями дискретного спектра. Обе они обращаются в нуль («экспоненциально») на границах интервала $(-\infty, +\infty)$. Узлы y_1 (пусть число их равно n_1) делят весь интервал на $n_1 + 1$ частичных интервалов. К каждому из них можно применить только что доказанное свойство: функция y_2 имеет по крайней мере $n_1 + 1$ узел. Таким образом, собственная функция имеет тем больше узлов, чем выше собственное значение, которому она соответствует.

Повторяя рассуждения на стр. 109, касающиеся построения собственных функций, и учитывая увеличение числа узлов функций $\hat{y}_-$ и $\hat{y}_+$ по мере увеличения энергии ε, можно получить следующее более точное утверждение (задачи 4 и 5).

Если расположить собственные состояния по порядку возрастания энергии $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n, \ldots$, *то собственные функции оказываются расположенными по возрастающему числу узлов. При этом n-ая собственная функция имеет $n-1$ узел и между каждыми двумя узлами n-ой функции имеется по крайней мере один узел следующих по номеру собственных функций.*

§ 13. Соотношения ортогональности

Другое важнейшее следствие теоремы вронскиана можно получить, если в уравнении (27) устремить пределы интегрирования a и b к $-\infty$ и $+\infty$ соответственно.

Пусть y_1 и y_2 суть две собственные функции, принадлежащие двум собственным значениям *дискретного спектра*. Обе они обращаются в нуль на бесконечности, вронскиан, составленный из них, — тоже и поскольку $\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \neq 0$, имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y_1 y_2 \, dx = 0. \tag{42}$$

Если интеграл от произведения $y_1 y_2$ двух действительных функций, распространенный на все пространство, равен нулю, говорят, что эти две функции ортогональны. В более общем случае две комплексные функции действительного переменного y_1 и y_2

ортогональны, если

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y_1^* y_2 \, dx = 0.$$

Таким образом, собственные функции дискретного спектра ортогональны. Ясно, что этот результат справедлив и в том случае, когда только одна из двух функций принадлежит дискретному спектру.

Переход к пределу в уравнении (27) оказывается более деликатным, когда обе функции y_1 и y_2 принадлежат непрерывному спектру. В этом случае вронскиан $W(y_1, y_2)$ бесконечно осциллирует по крайней мере на одном из пределов интегрирования, интеграл $\int y_1 y_2 \, dx$, следовательно, обладает тем же свойством. Однако если заменить в интеграле хотя бы одну собственную функцию, например y_2, волновым пакетом, образованным из собственных функций, соответствующих малой области энергий $\delta\varepsilon$ в окрестности энергии ε_2, то соотношение ортогональности оказывается справедливым при условии $\delta\varepsilon \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$. Действительно, запишем y_2 в форме $y(x;\ \varepsilon)$, чтобы подчеркнуть, что это функция с энергией ε [6]). Образуем волновой пакет

$$Y_2(x;\ \delta\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{\delta\varepsilon}} \int_{\varepsilon_2}^{\varepsilon_2+\delta\varepsilon} y(x;\ \varepsilon) \, d\varepsilon. \tag{43}$$

Поскольку вронскиан $W(y_1, y_2)$ линейно зависит от функции y_2, получаем, интегрируя обе части уравнения (27);

$$W(Y_2,\ y_1)\big|_a^b = \\ = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_a^b y_1 Y_2 \, dx + \int_a^b y_1 \left[\frac{1}{\sqrt{\delta\varepsilon}} \int_{\varepsilon_2}^{\varepsilon_2+\delta\varepsilon} (\varepsilon - \varepsilon_2) \, y(x;\ \varepsilon) \, d\varepsilon \right] dx.$$

Смысл этого преобразования состоит в том, что Y_2 стремится к нулю (как $1/x$) в тех асимптотических областях, где y_2 обнаруживает поведение осцилляторного типа. Поэтому, когда a и b стремятся, соответственно, к $-\infty$ и $+\infty$, левая часть уравнения стремится к нулю, так что сумма двух сходящихся интегралов в правой части равна нулю. Но в предельном случае

---

[6]) Задания ε не достаточно для определения решения $y(x;\ \varepsilon)$, оно зависит от одной или двух произвольных постоянных, в зависимости от кратности вырождения собственного значения. Произвол устраняется заданием асимптотической формы $y(x;\ \varepsilon)$ на одном из пределов ($-\infty$ или $+\infty$) интервала интегрирования.

$\delta\varepsilon \ll |\varepsilon_2 - \varepsilon_1|$ второй из этих интегралов пренебрежимо мал. Можно поэтому написать

$$\lim_{\delta\varepsilon\to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} y_1(x) Y_2(x;\ \delta\varepsilon)\, dx = 0. \qquad (42')$$

Волновой пакет $Y_2(x;\ \delta\varepsilon)$, определенный уравнением (43), в котором $\delta\varepsilon$ есть очень малая величина, называется «собственным дифференциалом» функции $y_2(x)$. Подразумевается, что в конце вычислений осуществляется переход к пределу $\delta\varepsilon \to 0$.

В заключение делаем вывод, что *две собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны* при условии, что когда обе собственные функции принадлежат непрерывному спектру, по крайней мере одна из них в соотношении ортогональности (уравнение (42′)) должна быть заменена ее собственным дифференциалом.

Наше определение собственного дифференциала очень схематично. На практике это понятие никогда не используется. Мы увидим в дальнейшем, что существуют элегантные математические методы, позволяющие придать свойству ортогональности самый общий характер, не прибегая к понятию собственного дифференциала.

§ 14. Замечание по поводу четности

Возвратимся к понятию четности, которое нам встретилось первый раз при рассмотрении примера с бесконечно глубокой потенциальной ямой. Это свойство имеет самый общий характер.

Если потенциал $U(x)$ четный, т. е. если

$$U(x) = U(-x),$$

то гамильтониан уравнения Шредингера также инвариантен относительно замены x на $-x$: он *симметричен относительно начала координат*. Поэтому если $\psi(x)$ есть собственная функция, принадлежащая собственному значению E,

$$H\psi(x) = E\psi(x),$$

то уравнение не меняется при замене x на $-x$, т. е.

$$H\psi(-x) = E\psi(-x).$$

Следовательно, $\psi(x)$ и $\psi(-x)$, а также четная функция $\psi(x) + \psi(-x)$ и нечетная функция $\psi(x) - \psi(-x)$ — все являются собственными функциями одного собственного значения E. По крайней мере одна из двух последних функций не равна тождественно нулю. Возможны два случая:

1. *Собственное значение E не вырождено.* Четыре упомянутые функции равны друг другу с точностью до постоянных множителей. Функция $\psi(x)$ пропорциональна той из функций $\psi(x)+\psi(-x)$ и $\psi(x)-\psi(-x)$, которая не равна тождественно нулю (другая необходимо есть тождественный нуль). Таким образом, собственные функции невырожденной части спектра имеют определенную четность: одни четные, другие нечетные. Кроме того, четная функция обязательно имеет четное число узлов, а нечетная функция — нечетное число узлов. Следовательно, если располагать собственные функции по порядку возрастающих собственных энергий, то четные и нечетные функции чередуются, причем функция основного состояния всегда четная. Результаты § 5 подтверждают эти выводы.

2. *Собственное значение E вырождено.* В этом случае все функции могут быть представлены в виде $\lambda\psi+\mu\varphi$, где ψ и φ — две линейно независимые собственные функции. Предположим, что хотя бы одна из этих функций, например ψ, не имеет определенной четности; в этих условиях ни одна из функций $\psi_+ = \psi(x)+\psi(-x)$ и $\psi_- = \psi(x)-\psi(-x)$ не обращается тождественно в нуль. Эти две функции противоположной четности обязательно линейно независимы и, как мы видели, являются собственными функциями одного собственного значения E. Поэтому можно выразить ψ, φ и, следовательно, $\lambda\psi+\mu\varphi$ в виде линейной комбинации ψ_+ и ψ_-. Таким образом, всегда можно выразить собственные функции вырожденного собственного значения в виде линейной комбинации двух функций, имеющих определенную четность.

Можно, впрочем, убедиться в результате простого исследования, что собственные значения непрерывного спектра все двукратно вырождены и каждому из них соответствует одна собственная функция четная (производная функции равна нулю в начале координат) и одна функция нечетная (функция равна нулю в начале координат).

В квантовой механике часто случается, что гамильтониан исследуемой системы оказывается инвариантным относительно некоторых преобразований; из этого свойства инвариантности следуют некоторые свойства симметрии, характеризующие собственные функции уравнения Шредингера. Четность дает нам простой пример такой ситуации.

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. В задаче о потенциальной яме, определенной в § 6, вычислить постоянные P, Q, R, S, фигурирующие в выражении (22) для решения χ, как функции параметров ямы, проверить выражение (23) для коэффициента прохождения и соотношение сохранения (24). Предполагая, что $KL \gg \pi$ и $\varphi <$

$< \eta \ll 1$, вычислить «время прохождения» проходящей волны и «время отражения» отраженной волны, обнаружить наличие резонансов и сравнить движение проходящей волны с движением соответствующей классической частицы.

2. Вычислить коэффициент прохождения для прямоугольного барьера, определенного в § 7. Вычислить «время прохождения» проходящей волны и сравнить движенне этой части волны с движением классической частицы.

3. Изучить движение частицы в прямоугольном потенциале, включающем бесконечно высокий барьер при $x < 0$, а при положительных x имеющем форму

$$\begin{aligned} V(x) &= V_{\mathrm{I}} && 0 < x < a, \\ V(x) &= V_{\mathrm{II}} && a < x < b, \\ V(x) &= 0 && x > b \end{aligned}$$

Предполагается, что $V_{\mathrm{I}} < 0 < V_{\mathrm{II}}$. Сравнить движение волнового пакета, испытывающего отражение в точке $x = 0$, с движением соответствующей классической частицы. Исследовать, в частности, «запаздывание отражения», когда начальная энергия частицы E меньше V_{II}.

Обнаружить резонансы и выяснить связь между шнриной этих резонансов и запаздыванием отражения в пределе, когда $E \ll V_{II}$ и когда $(b-a)\sqrt{2mV_{II}} \gg \hbar$

4. Спектр энергии частицы, движущейся в одном измерении в некотором потенциале, содержит, вообще говоря, дискретную часть. Показать, что при расположении собственных состояний дискретного спектра по возрастающим значениям энергии собственные функции располагаются по возрастающему числу узлов, причем n-ая собственная функция имеет $n-1$ узел; между каждыми двумя узлами располагается по крайней мере один узел собственных функций с более высокими номерами.

5. Частица в одном измерении подвергается в интервале $(0, \infty)$ действию потенциала $V(x)$, асимптотически стремящегося к нулю, причем в точке $x = 0$ имеется бесконечно высокий отталкивающий барьер. Показать, что число связанных состояний равно числу узлов решения уравнения Шредингера, обращающегося в нуль в начале координат и соответствующего бесконечно малой отрицательной энергии.