налагаться не на саму функцию ψ, а *на плотность вероятности* $\psi^*\psi$. Но во всех вопросах, рассматриваемых в квантовой механике, оно сводится к однозначности ψ. На этих вопросах мы не можем останавливаться.

§ 23. Гармонический осциллятор

1. *Гармоническим осциллятором* в классической физике называют частицу, на которую действует сила, пропорциональная отклонению частицы из положения равновесия и направленная к нему. Осциллятор называется *одномерным*, если частица может двигаться только вдоль одной прямой. Последнюю мы примем за ось X, а положение равновесия — за начало координат. Потенциальная функция частицы имеет вид

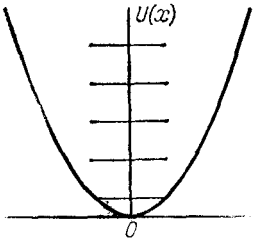

Рис. 43

$$U = {}^1/_2\, kx^2, \tag{23.1}$$

где k — постоянная (*коэффициент упругости*), а x — отклонение частицы от положения равновесия. Графиком функции $U(x)$ является парабола (рис. 43). Согласно классической механике осциллятор совершает гармонические колебания с циклической частотой $\omega = \sqrt{k/m}$, где m — масса частицы.

В квантовой механике понятие силы не используется. Поэтому квантовый гармонический осциллятор следует определить как частицу с потенциальной функцией $U(x)$. Найдем энергии стационарных состояний осциллятора, следуя идеям предыдущего параграфа. Но здесь возникает следующая трудность. Функцию $U(x)$ нельзя нормировать так, чтобы она обращалась в нуль в бесконечности, так как при $x = \pm\infty$ она сама бесконечно велика. Но эта трудность искусственная. В реальных системах при возрастании $|x|$ начинают проявляться отступления от параболической формулы (23.1), так что $U(\pm\infty)$ становится конечной. Рассмотрим случай, когда $U(x)$ симметрична, так что $U(+\infty) = U(-\infty)$. Тогда методы предыдущего параграфа становятся применимыми. Но здесь удобнее за нуль $U(x)$ принять ее значение при $x = 0$. Мы проведем решение, предполагая, что формула (23.1) справедлива при любых x. Однако для реального осциллятора полученные результаты будут справедливы для не слишком больших значений $|x|$.

2. Уравнение Шредингера для одномерного гармонического осциллятора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = \mathscr{E}\psi. \tag{23.2}$$

Если ввести безразмерные величины

$$\lambda = 2\mathscr{E}/\hbar\omega, \quad \xi = x\sqrt{k/\hbar\omega}, \tag{23.3}$$

то оно преобразуется в

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \xi^2\psi = \lambda\psi. \tag{23.4}$$

При определенном значении параметра λ это уравнение имеет решение $\psi = e^{\alpha\xi^2}$, где α — постоянная, которая сейчас будет определена вместе с λ. Действительно,

$$\frac{d\psi}{d\xi} = 2\alpha\xi e^{\alpha\xi^2} = 2\alpha\xi\psi,$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = 2\alpha\psi + 2\alpha\xi\,\frac{d\psi}{d\xi} = (4\alpha^2\xi^2 + 2\alpha)\,\psi.$$

Подставляя эти значения в (23.4), получим

$$(1 - 4\alpha^2)\,\xi^2 - 2\alpha = \lambda,$$

причем это соотношение должно выполняться тождественно по ξ. Это будет тогда и только тогда, когда $1 - 4\alpha^2 = 0$, $\lambda = -2\alpha$, т. е. $\alpha = \pm 1/2$. Знак плюс следует отбросить, так как в этом случае функция $\psi = e^{\alpha\xi^2}$ обращалась бы в бесконечность при $\xi = \pm\infty$. Таким образом, получается решение

$$\psi = e^{-\xi^2/2}, \tag{23.5}$$

если $\lambda = 1$. Это решение не имеет узлов, а потому оно описывает *основное состояние гармонического осциллятора*. Ему соответствует нулевая энергия

$$\mathscr{E}_0 = (\lambda/2)\,\hbar\omega = \hbar\omega/2. \tag{23.6}$$

3. В стационарном состоянии с энергией $\mathscr{E}_n$ функция ψ должна иметь n узлов. Такое число узлов имеет функция

$$\psi = P_n(\xi)\,e^{-\xi^2/2}, \tag{23.7}$$

где $P_n(\xi)$ — полином n-й степени с некратными вещественными корнями. При избранных значениях параметра λ такая функция действительно является решением уравнения (23.4) и обращается в нуль на бесконечности. При таких значениях λ она и будет волновой функцией осциллятора. Дважды дифференцируя ее и подставляя $d^2\psi/dx^2$ в уравнение (23.4), получим

$$-P_n''(\xi) + \underline{2\xi P_n'(\xi)} + \underline{P_n(\xi)} = \underline{\lambda P_n(\xi)}. \tag{23.8}$$

Это соотношение должно выполняться тождественно по ξ. В нем все подчеркнутые члены являются полиномами степени n. Степень полинома $P_n''(\xi)$ на два меньше, т. е. равна $n-2$ $(n \geqslant 2)$. Чтобы определить λ, достаточно сравнить коэффициенты при

старших членах подчеркнутых полиномов. Если коэффициент при ξ^n в полиноме $P_n(\xi)$ равен a_n, то в полиноме $2\xi P_n'(\xi)$ соответствующий коэффициент равен $2na_n$. Поэтому необходимо, чтобы выполнялось соотношение $2n+1=\lambda$. Тогда

$$-P_n''(\xi)+2\xi P_n'(\xi)=2nP_n(\xi). \tag{23.9}$$

Полиномы, являющиеся решениями этого уравнения, называются *полиномами Чебышева — Эрмита*. Можно доказать (на чем мы не останавливаемся), что все корни полиномов Чебышева — Эрмита некратные и вещественные. Это легко доказать для небольших n, фактически находя сами полиномы и вычисляя их корни (см. задачу к этому параграфу).

Подставляя $\lambda=2n+1$ в (23.3), находим энергетические уровни осциллятора:

$$\mathscr{E}_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad (n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots). \tag{23.10}$$

Эти уровни *эквидистантны*, т. е. находятся на равных расстояниях друг от друга. На рис. 43 они изображены горизонтальными прямыми.

Классический осциллятор излучает свет только с *одной* частотой ω. Казалось бы, что в соответствии с правилом частот Бора в квантовом случае возможно излучение со всевозможными кратными частотами $N\omega$ (N — целое число). На самом деле при излучении фотона этого не происходит. Из этого затруднения в старой квантовой теории Бор вышел, руководствуясь принципом соответствия. Чтобы исключить кратные частоты, на переходы между уровнями энергии осциллятора было наложено ограничение, называемое *правилом отбора*. Согласно этому правилу квантовое число n осциллятора при излучении и поглощении фотона может меняться только на ± 1, т. е.

$$\Delta n=\pm 1. \tag{23.11}$$

Это правило отбора выводится и в последовательной квантовой механике, не обращаясь ни к какому принципу соответствия. Квантовая механика позволяет вычислить вероятность перехода осциллятора с одного уровня на другой с излучением или поглощением фотона. Оказалось, что эта вероятность обращается в нуль, когда правило отбора (23.11) не соблюдается.

ЗАДАЧА

Найти полиномы Чебышева — Эрмита и волновые функции одномерного гармонического осциллятора для $n=1, 2, 3, 4, 5$.

Решение. Ради примера рассмотрим случай $n=4$. Задача сводится к решению уравнения (23.9) в виде полинома

$$P_4(\xi)=a_4\xi^4+a_3\xi^3+a_2\xi^2+a_1\xi+a_0.$$

Подставляя это выражение в уравнение (23.9) и сравнивая коэффициенты, найдем, что оно удовлетворяется при любом значении a_4, как это и должно быть согласно общей теории. Далее, находим $a_2 = -3a_4$, $a_0 = -{}^1/_4 a_2 = {}^3/_4 a_4$, $a_3 = a_1 = 0$. Итак,

$$P_4(\xi) = a_4(\xi^4 - 3\xi^2 + 3/4).$$

Корни этого полинома

$$\xi = \pm\sqrt{{}^1/_2(3 \pm \sqrt{6})}$$

вещественны и некратны.

Аналогично,

$$P_1(\xi) = a_1\xi,$$
$$P_2(\xi) = a_2(\xi^2 - 1/2),$$
$$P_3(\xi) = a_3(\xi^3 - {}^3/_2\xi),$$
$$P_5(\xi) = a_5(\xi^5 - 5\xi^3 + {}^{15}/_4\xi).$$

Волновые функции получаются умножением этих полиномов на $e^{-\xi^2/2}$. Их обычно нормируют к единице, т. е. подчиняют условию

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |P(\xi)\, e^{-\xi^2/2}|^2\, d\xi = 1.$$

§ 24. Одномерные прямоугольные потенциальные ямы

1. Квантование на основе уравнения Шредингера (22.1) полезно уяснить на примере одномерной симметричной «потенциальной ямы» прямоугольной формы. Так называется потенциальная функция $U(x)$, принимающая на интервале $-a < x < +a$ постоянное значение $-U_0$ и обращающаяся в нуль вне этого интервала (рис. 44). Для этого случая легко получить

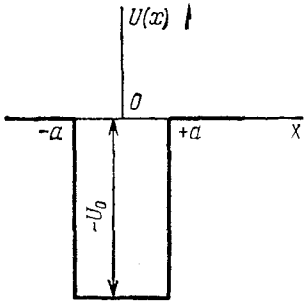

Рис. 44

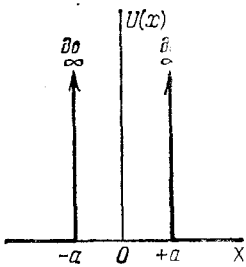

Рис. 45

точное решение уравнения Шредингера и на его основе рассмотреть задачу о квантовании энергии. Но этим значение прямоугольных потенциальных ям не исчерпывается. В ряде случаев (например, в ядерной физике) истинный ход потенциальной функции $U(x)$ неизвестен. Аппроксимируя $U(x)$ потенциальной ямой прямоугольной формы, получают в таких случаях