Доклады Академии наук СССР
1972. Том 204, № 1

УДК 530.145.61

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

В. Д. КРИВЧЕНКОВ, В. Д. КУКИН

ОБ ЭКВИДИСТАНТНОСТИ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 5 X 1971)

Уровни энергии одномерного гармонического осциллятора являются, как известно, эквидистантными. Представляет интерес определение класса потенциалов $V(x)$, кроме потенциала гармонического осциллятора, для которых одномерное уравнение Шредингера обладает эквидистантным спектром энергий.

Рассмотрим унитарное преобразование канонически сопряженных операторов $\hat{p}$ и $\hat{q}$

$$\hat{p}(\xi) = e^{i\hat{L}\xi}\hat{p}e^{-i\hat{L}\xi}, \quad \hat{q}(\xi) = e^{i\hat{L}\xi}\hat{q}e^{-i\hat{L}\xi}, \tag{1}$$

где ξ — действительный параметр. Предположим теперь, что эрмитов оператор $\hat{L}(\hat{p}, \hat{q})$ удовлетворяет условию периодичности

$$\hat{p}(\xi = T) = e^{i\hat{L}T}\hat{p}\,e^{-i\hat{L}T} = \hat{p}, \qquad \hat{q}(\xi = T) = e^{i\hat{L}T}\hat{q}e^{-i\hat{L}T} = \hat{q}. \tag{2}$$

Вследствие наложенного условия периодичности, p и q при $\xi = T$ принимают первоначальный вид и применение унитарного преобразования (1) к произвольной волновой функции должно давать

$$\psi(q, \xi = T) = e^{i\hat{L}T}\psi(q) = e^{i\alpha}\psi(q), \tag{3}$$

где α — некоторая действительная постоянная фаза.

Разлагая (3) по собственным функциям оператора $\hat{L}$, легко убедиться в том, что оператор $\hat{L}$, удовлетворяющий условию периодичности (2), должен иметь дискретный спектр эквидистантных собственных значений

$$L_n = \frac{2\pi}{T}n + \frac{\alpha}{T}, \quad n = 0; \pm 1; \pm 2; \ldots \tag{4}$$

Обратимся к случаю классической механики и рассмотрим периодические движения частицы в одномерном потенциальном поле $V(x)$, удовлетворяющие условию, что период движения T не зависит от полной энергии E частицы. Если $V(x)$ является непрерывной функцией и обладает непрерывными первой и второй производными, то решения канонических уравнений Гамильтона

$$p = p(t, c_1, c_2), \quad x = x(t, c_1, c_2) \tag{5}$$

должны быть однозначными функциями констант интегрирования c_1 и c_2, определяемых начальными условиями. Так как период движения T и полная энергия E не зависят друг от друга, то при любых значениях констант c_1 и c_2 должны выполняться условия

$$p(t + T) = p(t), \quad x(t + T) = x(t). \tag{6}$$

От классических уравнений Гамильтона можно перейти к гейзенберговскому представлению в квантовой механике, считая p и x операторами и подбирая константы c_1 и c_2 таким образом, чтобы при $t = 0$ операторы $\hat{p}$ и $\hat{x}$

принимали заданный вид, например, в координатном представлении $\hat{x}(0) = x$, $\hat{p}(0) = -i\hbar\,\partial/\partial x$. Тогда переход к гейзенберговскому представлению осуществляется посредством унитарного преобразования

$$\hat{p}(t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\,\hat{p}(0)\,e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}, \qquad \hat{x}(t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\,\hat{x}(0)\,e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}, \tag{7}$$

где $\hat{H}$ — оператор Гамильтона. Но преобразование (7) совпадает с рассмотренным преобразованием (1), и поэтому классические условия периодичности (6) перейдут в квантовом случае в условия периодичности (2). Отсюда следует, что собственные значения оператора Гамильтона должны быть дискретными и эквидистантными:

$$E_n = \hbar\frac{2\pi}{T}n + \hbar\frac{\alpha}{T}, \qquad \alpha = \mathrm{const}, \tag{8}$$

где n — целое число, T — период классического движения между точками поворота. Полученный результат можно сформулировать в виде следующей теоремы:

Теорема. *В случае одномерного движения в потенциальном поле $V(x)$, которое является непрерывной функцией, обладающей непрерывными первой и второй производными, если период классического движения T не зависит от полной энергии, то уровни энергии соответствующего одномерного уравнения Шредингера с потенциалом $V(x)$ должны быть эквидистантными.*

Легко также убедиться в справедливости и обратной теоремы.

Используем установленную теорему для определения вида потенциалов $V(x)$, приводящих к эквидистантным уровням энергии. Время классического движения между точками x_1 и x_2 определяется как

$$t = \int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\frac{m}{2}}\frac{dx}{\sqrt{E - V(x)}}. \tag{9}$$

Положим

$$V(x) = E + \frac{m\omega^2}{2}\frac{f^2(x) - 1}{(f'(x))^2}, \qquad \omega = \mathrm{const}, \tag{10}$$

тогда

$$t = \frac{1}{\omega}\arcsin f(x)\Big|_{x=x_1}^{x=x_2}. \tag{11}$$

Если x_1 и x_2 — точки поворота, определяемые как корни уравнения $V(x) = E$, то из (11) получаем период классического движения $T = 2\pi/\omega$, т. е. T не зависит от E. Из соотношения (10) следует, что $f(x)$ должна зависеть от E таким образом, чтобы потенциал $V(x)$, определяемый через правую часть (10), не зависел от E. Легко убедиться в том, что последнему требованию можно удовлетворить только в двух случаях:

$$f(x) = \sqrt{\frac{k}{2E}}x, \quad k = m\omega^2, \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2; \tag{12}$$

$$f(x) = \frac{kx^2 - 4E}{\sqrt{16E^2 - ak^2}}, \quad V(x) = \frac{kx^2}{8} + a\frac{k}{8x^2}. \tag{13}$$

Требование непрерывности $V(x)$ означает, что должно быть $a > 0$ и в случае (13) имеются две области независимого движения $x > 0$ и $x < 0$.

Таким образом, для одномерного уравнения Шредингера уровни энергии оказываются эквидистантными только в случае потенциала гармонического осциллятора (12) и класса потенциалов (13), представляющих собой сумму потенциала гармонического осциллятора и некоторого потенциала «центробежного» типа с произвольной константой $a > 0$. Явное вычисление дает для уровней энергии уравнения Шредингера с потенциалом (13)

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\sqrt{1 + a\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2}\right). \tag{14}$$

Необходимо заметить, что требование непрерывности $V(x)$ и его первой и второй производных играет существенную роль в доказательстве установленной выше теоремы. В качестве контрпримера рассмотрим уравнение Шредингера для несимметричного гармонического осциллятора с потенциалом

$$V(x) = \begin{cases} {}^1/_2\, m\omega_1^2 x^2, & x < 0 \\ {}^1/_2\, m\omega_2^2 x^2, & x > 0, \end{cases} \tag{15}$$

который имеет разрыв второй производной в точке $x = 0$.

Классическое движение, очевидно, будет периодическим с периодом

$$T = \frac{T_1}{2} + \frac{T_2}{2} = \pi\,\frac{\omega_1 + \omega_2}{\omega_1\omega_2} = \frac{2\pi}{\omega_{\text{эфф}}}, \tag{16}$$

который не зависит от полной энергии. Однако уровни энергии уравнения Шредингера не будут эквидистантными. Действительно, находя убывающие на бесконечности решения уравнения Шредингера для областей $x > 0$ и $x < 0$ и «сшивая» их в точке $x = 0$ с помощью условий непрерывности при $x = 0$ самих волновых функций и их первых производных получим следующее уравнение для определения уровней энергии E:

$$\sqrt{\omega_1}\,\Gamma\left(\frac{1-\nu_1}{2}\right)\Gamma\left(-\frac{\nu_2}{2}\right) + \sqrt{\omega_2}\,\Gamma\left(\frac{1-\nu_2}{2}\right)\Gamma\left(-\frac{\nu_1}{2}\right) = 0, \tag{17}$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция, и

$$2E = \hbar\omega_1(2\nu_1 + 1) = \hbar\omega_2(2\nu_2 + 1).$$

Легко видеть, что уравнение (17) не имеет эквидистантных решений, зависящих линейно от целого n. Эквидистантность уровней энергии в этом случае будет осуществляться лишь приближенно при больших значениях n, что следует также из вычислений в квазиклассическом приближении. Выпишем здесь асимптотическое выражение для уровней энергии несимметричного гармонического осциллятора с потенциалом (15) в случае $n \gg 1$:

$$E_n = \hbar\omega_{\text{эфф}}\left\{n + \frac{1}{2} + (-1)^{n+1}\frac{1}{64\pi n^2}\,C + \ldots\right\},$$

где

$$C = \left(\frac{\gamma+1}{\gamma}\right)^2 \sin A\cos B + (\gamma+1)^2\cos A\sin B, \qquad \gamma = \omega_2/\omega_1,$$

$$A = \frac{\pi}{2}\left[2n\,\frac{\gamma}{\gamma+1} + \frac{\gamma-1}{2(\gamma+1)}\right], \qquad B = \frac{\pi}{2}\left[2n\,\frac{1}{\gamma+1} - \frac{\gamma-1}{2(\gamma+1)}\right].$$

Легко понять причину появления неэквидистантности уровней энергии в данном случае. Вследствие неаналитичности потенциала $V(x)$ оператор Гамильтона различен для областей $x < 0$ и $x > 0$. Поэтому унитарное преобразование (7) не может удовлетворять условию периодичности (2) и, более того, вообще не может быть даже определено с помощью одного эрмитового оператора $\hat{H}$ для всех моментов времени t.

Авторы выражают благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за внимание к работе.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
24 IV 1971