Доклады Академии Наук СССР
1954. Том XCIV, № 4

МАТЕМАТИКА

В. П. МАСЛОВ

О ПРЕДЕЛЬНОМ ПОВЕДЕНИИ НЕКОТОРЫХ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

(Представлено академиком А. Н. Колмогоровым 7 XII 1953)

Во многих вопросах физики рассматриваются линейные дифференциальные уравнения с малым параметром при старшей производной и ставится задача о возможности предельного перехода в таком уравнении при малом параметре, стремящемся к нулю. При этом, однако, сама задача о таком предельном переходе может быть поставлена различным образом. В работах А. Н. Тихонова [1] и его учеников [2,3] рассматривалась задача с начальными условиями. Вместе с тем в ряде вопросов, например в квантовой механике, не менее интересна задача на собственные функции, а именно, изучение асимптотического поведения собственных функций и собственных значений уравнений с малым параметром при старшей производной.

Рассмотрим, например, уравнение Шредингера для частицы с одной степенью свободы и потенциальной энергией $u(x)$

$$\frac{h^2}{2m} y'' + \{\lambda - u(x)\} y = 0. \tag{1}$$

Каждая из его собственных функций характеризует некоторое стационарное состояние частицы, отвечающее данному уровню энергии λ.

Мы будем рассматривать тот случай, когда $u(x)$ представляет собой потенциальную яму общего вида, т. е. предположим, что $u(x)$ непрерывна и имеет конечное число максимумов и минимумов и

$$u(+\infty) = u(-\infty) = \infty. \tag{2}$$

Отсюда следует, что для всех λ, за исключением конечного числа значений, отвечающих экстремумам $u(x)$, выражение

$$\lambda - u(x) \tag{3}$$

имеет четное число простых нулей. Спектр дифференциального уравнения при указанных ограничениях на $u(x)$ является чисто точечным. Положив в уравнении (1) $h = 0$, мы получим вместо дифференциального оператора

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + u(x) \tag{4}$$

оператор умножения на функцию $u(x)$. Этот последний имеет непрерывный спектр, его собственные функции, соответствующие данному λ, суть δ-функции (и их линейные комбинации), сосредоточенные в тех точках, где (3) обращается в нуль. Число корней уравнения

$$u(x) - \lambda = 0 \tag{5}$$

есть кратность этого спектра в точке λ.

Вопрос о том, каким образом происходит при $h \to 0$ предельный переход от точечного спектра и „настоящих“ собственных функций оператора (4) к непрерывному спектру и обобщенным собственным функциям оператора умножения на $u(x)$, рассматриваетя в настоящей работе.

Квази-классическое приближение для случая, когда $u(x)$ имеет лишь единственный минимум (например, $u(x)=x^2$), было разобрано Крамерсом ([8]) и его учениками, правда, не вполне строго.

Теорема 1. *Пусть λ_n^i — собственное значение уравнения* (1) *такое, что функция* (3) *имеет* $2k$ *нулей*

$$x_1, \ldots, x_{2k}, \tag{6}$$

а собственные функции уравнения (1) *нормированы к единице*

$$\sqrt{\int\limits_{-\infty}^{\infty} |y_n|^2\,dx} = 1; \tag{7}$$

тогда λ_n^i будет удовлетворять одному из уравнений:*

$$\frac{1}{h}\int\limits_{x_{2j-1}}^{x_{2j}} \sqrt{\lambda_n^i - u(x)}\,dx = \pi(n+{}^1/_2) + O(h),$$

$$n = 1, 2, \ldots, \quad j = 1, 2, \ldots, 2k, \tag{8}$$

причем собственная функция, соответствующая λ_n^i, удовлетворяющему i-му уравнению (8) *и не удовлетворяющему ни одному другому уравнению* (8) *(с точностью до $O(h)$), будет экспоненциально стремиться к нулю при $h \to 0$ вне отрезка*

$$x_{2i-1} - \alpha \leqslant x \leqslant x_{2i} + \alpha, \tag{9}$$

где α — сколь угодно малая не зависящая от h величина.

Иными словами, в случае, когда уравнения (8), отвечающие различным j, не имеют общих решений, каждая из собственных функций уравнения (1) не будет стремиться к нулю при $h \to 0$ лишь в одной из впадин потенциальной ямы; вне этой впадины она будет экспоненциально убывать при $h \to 0$. Это соответствует тому, что в классическом случае частица может находиться лишь в одной из впадин потенциальной ямы и не может проникнуть через потенциальный барьер. Заметим, что предположение об отсутствии общих решений у уравнений вида (8), отвечающих различным j, существенно. Рассмотрим, например, случай симметричной ямы (с двумя одинаковыми минимумами, разделенными одним максимумом). В этом случае решение будет симметричным (четным) или антисимметричным (нечетным), и, следовательно, частица будет находиться с равной вероятностью как в правой, так и в левой половине ямы. Соответствующие уравнения (8) (их будет два) в этом случае просто совпадают.

Пусть x_{2i-1}, x_{2i} — два корня уравнения (5), между которыми лежит i-й минимум функции $u(x)$; тогда при указанном выше условии все собственные функции, соответствующие собственным значениям, удовлетворяющим уравнениям

$$\frac{1}{h}\int\limits_{x_{2i-1}}^{x_{2i}} \sqrt{\lambda_n^i - u(x)}\,dx = \pi(n+{}^1/_2) + O(h), \quad n = 1, 2, \ldots, \tag{10}$$

будут стремиться к нулю при $h \to 0$ вне i-й впадины. Обозначим последовательность таких собственных значений через $\{\lambda_n^i\}$, а последовательность соответствующих им собственных функций через $\{y_{in}\}$. Обозначим подпоследовательность собственных значений последовательности $\{\lambda_n^i\}$, сходящуюся при $h \to 0$ к некоторому фиксированному числу μ**, через $\{\lambda_{n_\mu}^i\}$, а соответствующую им последовательность

* Для простоты записи полагаем $2m = 1$.

** Т. е. удовлетворяющую соотношению

$$\lim_{h\to 0} \lambda_{n_\mu}^i = \mu. \tag{11}$$

собственных функций через y_{in_μ}. Нули функции

$$\mu - u(x), \tag{12}$$

между которыми лежит i-й минимум функции $u(x)$, обозначим через x'_{2i-1} и x'_{2i}.

Теорема 2. *Пусть*

$$p = \int\limits_{x'_{2i-1}}^{x'_{2i}} \sqrt{\mu - u(x)}\, dx, \tag{13}$$

а собственные функции нормированы к единице

$$\sqrt{\int\limits_{-\infty}^{\infty} |y_n|^2\, dx} = 1; \tag{14}$$

тогда

$$\lim_{\substack{h \to 0 \\ hn_\mu \to p}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} |y_{in_\mu}|^2 \varphi(x)\, dx = \int\limits_{x'_{2i-1}}^{x'_{2i}} \frac{\varphi(x)}{\sqrt{\mu - u(x)}}\, dx, \tag{15}$$

где $\varphi(x)$ — любая функция, суммируемая в квадрате на всей прямой.

В частности, взяв в качестве $\varphi(x)$ характеристическую функцию некоторого интервала (a, b),

$$x'_{2i-1} < a < b < x'_{2i}, \tag{16}$$

мы получим

$$\lim_{\substack{h \to 0 \\ hn_\mu \to p}} \int\limits_a^b |y_{in_\mu}|^2 dx = \int\limits_a^b \frac{1}{\sqrt{\mu - u(x)}}\, dx. \tag{17}$$

Поскольку в классической механике функция (12) соответствует кинетической энергии, то интеграл $\int\limits_a^b \frac{1}{\mu - u(x)}\, dx$ пропорционален относительному времени пребывания частицы на отрезке (a, b), т. е. вероятности нахождения рассматриваемой частицы на этом отрезке.

Интеграл

$$\int\limits_a^b |y_{in_\mu}|^2\, dx \tag{18}$$

при условии (14) представляет собой квантово-механическую вероятность того, что частица в состоянии, определяемом волновой функцией y_{in_μ}, находится на отрезке (a, b).

Таким образом, теорема 2 означает, что вероятность нахождения частицы на отрезке (a, b) в пределе при $h \to 0$ переходит в относительное время пребывания частицы на этом отрезке. Этот факт указывается обычно, правда без строгого математического обоснования, в руководствах по квантовой механике.

Перейдем теперь непосредственно к исследованию предельного поведения собственных функций оператора (4) при $h \to 0$.

Легко видеть, что собственные функции оператора (4) при $h \to 0$ в смысле обычной (сильной) сходимости ни к какому пределу не стремятся. Однако, если рассматривать эти собственные функции как линейные функционалы, т. е. иметь в виду не сильную, а слабую сходимость*, то положение существенно меняется, а именно, имеет место следующая теорема:

Теорема 3. *Пусть собственные функции уравнения* (1) *нормированы к* $1/\sqrt{h}$, *т. е выбраны так, что*

$$\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |y_n|^2 dx} = \frac{1}{\sqrt{h}}. \tag{19}$$

Тогда последовательность собственных функций в пределе для четных n_μ *удовлетворяет соотношению*

$$\lim_{\substack{h \to 0 \\ hn_\mu \to p}} \int_{-\infty}^{\infty} y_{in_\mu} \varphi(x)\, dx = \frac{\varphi(x'_{2i-1})}{\sqrt{u'_x(x'_{2i-1})}} + \frac{\varphi(x'_{2i})}{\sqrt{u'_x(x'_{2i})}}, \tag{20}$$

а для нечетных n_μ *удовлетворяет соотношению:*

$$\lim_{\substack{h \to 0 \\ hn_\mu \to p}} \int_{-\infty}^{\infty} y_{in_\mu} \varphi(x)\, dx = \frac{\varphi(x'_{2i-1})}{\sqrt{u'_x(x'_{2i-1})}} - \frac{\varphi(x'_{2i})}{\sqrt{u'_x(x'_{2i})}}, \tag{21}$$

где $\varphi(x)$ — *любая функция, интегрируемая на всей прямой, с непрерывной первой производной.*

Таким образом, теоремы 1 и 3 дают следующую картину поведения собственных функций и собственных значений оператора (4) при $h \to 0$. Все собственные функции и соответствующие им собственные значения могут быть классифицированы по отдельным минимумам („впадинам") потенциальной энергии $u(x)$ (так как каждая собственная функция стремится к нулю вне одной из этих впадин), а внутри каждой впадины собственные значения и собственные функции можно разбить на два класса: к одному отнести собственные функции и собственные значения с четным n, приводящие при $h \to 0$ к образованию суммы δ-функций, взятых в точках поворота; к другому — с нечетным n, приводящие к образованию разности δ-функций. Такое расщепление собственных функций на различные классы и объясняет то, каким образом простой спектр оператора (4) в пределе переходит в кратный спектр оператора умножения на $u(x)$.

Оператор (4) при малом h можно рассматривать как оператор умножения на $u(x)$, возмущенный оператором

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}, \tag{22}$$

однако результаты теории возмущений здесь удалось использовать лишь для некоторых наводящих соображений.

Для доказательства сформулированных выше теорем была использована асимптотика фундаментальной системы решений уравнений 2-го порядка с малым параметром ([4-7]).

В заключение автор приносит глубокую благодарность С. В. Фомину за руководство работой.

Поступило
16 XI 1953

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] А. Н. Тихонов, Матем. сборн., **22** (64), в. 2, 193 (1948); **27** (69), в. 1, 147 (1950); **31** (73), в. 3, 575 (1952). [2] А. Б. Васильева, там же, **28** (70), в. 1, 131 (1951); **31** (73), в. 3, 587 (1952). [3] В. М. Волосов, там же, **31** (73), в. 3, 675 (1952). [4] А. А. Соколов, Вестн. МГУ, № 4 (1947). [5] М. И. Петрашень, Уч. зап. ЛГУ, физ. сер., № 7 (1952). [6] А. А. Дородницын, Усп. матем. наук, **7**, в. 6 (1952). [7] R. E. Langer, Trans. Am. Math. Soc., **67**, 461 (1949). [8] H. A. Kramers, Zs. f. Phys., **39**, 828 (1926).

* С точки зрения квантово-механических приложений также наиболее естественно пользоваться здесь именно слабой сходимостью.