

Некоторые задачи (с решениями)
к экзамену по курсу ЕНС
«Геометрические структуры в квантовой механике»
(лектор А. И. Шафаревич, осень 2004 г.)

Операторы Лапласа–Бельтрами и Виттена

Вычисление оператора Лапласа–Бельтрами производится непосредственно по формуле $D = d^*d + dd^*$, где $d^* = (-1)^{nk+n+1} * d^*$ (k — степень формы, к которому он применяется). Вычисление оператора Виттена возможно как по формуле из определения $D_h = d_h d_h^* + d_h^* d_h$ ($d_h = e^{-f/h} de^{f/h}$), так и по формуле $h^2 D_h = h^2 D + (df, df) + hR$, где $R = k_f d^* + d^* k_f + k_f^* d + dk_f^*$ ($k_f(\omega) = df \wedge \omega$). Удобство этой формулы в том, что оператор R является недифференциальным (зависит лишь от значений формы в точке: $R(g(x)\omega) = g(x)R(\omega)$), поэтому достаточно вычислять его на базисных формах $(1, dx, dy, dx \wedge dy)$. Вычисление оператора k_f^* производится по формуле $k_f^* = \sum (\partial f / \partial x_j) k_j^*$, где

$$k_j^*(dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}) = \sum_s (-1)^{s+1} g^{j i_s} dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_{s-1}} \wedge dx_{i_{s+1}} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}.$$

Замечу также, что в вычислениях (особенно если G не ортогональна) будет постоянно появляться $\sqrt{\det G}$ — коэффициент в форме объёма. Его полезно обозначить одной буквой (но помнить, что это не константа, и его нужно дифференцировать).

Функции Морса

Напомню, что функция f называется *функцией Морса*, если она имеет конечное число *критических точек* (точек, где $df = 0$), причём все они *невыврождены*: матрица $Q = (\partial^2 f / \partial x_i \partial x_j)$ невырождена. Число отрицательных квадратов в Q называется индексом критической точки.

Задача. Рисуются какая-то замкнутая кривая без самопересечений $(\rho(t), z(t))$ в области $\rho > 0$. Вращая её вокруг оси Oz , получаем поверхность в $Oxyz$. Спрашивается, будут ли на этой поверхности функциями Морса $f = y$ и $f = z$.

Решение. Поверхность параметризуется параметрами t и φ :

$$\begin{aligned} x &= \rho(t) \cos \varphi, \\ y &= \rho(t) \sin \varphi, \\ z &= z(t). \end{aligned}$$

Функция $f = z$ не будет функцией Морса. Нужно взять t_0 , где $dz/dt = 0$ (например, точку максимума $z(t)$), тогда $df(t_0, \varphi) = 0$ при всех φ , т. е. точек $df = 0$ бесконечно много.

Функция $f = y$ будет функцией Морса при некоторых условиях на кривую, указанных ниже. Чтобы $dy = 0$, нужно, чтобы $\cos \varphi = 0$ и $\rho'(t) \sin \varphi = 0$. $\sin \varphi \neq 0$, поэтому $\rho'(t) = 0$. Итак, $dy = 0$ в точках, где $\cos \varphi = 0$ и $\rho'(t) = 0$. Выпишем матрицу вторых производных:

$$\begin{pmatrix} -\rho(t) \sin \varphi & \rho'(t) \cos \varphi \\ \rho'(t) \cos \varphi & \rho''(t) \sin \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mp \rho(t) & 0 \\ 0 & \pm \rho''(t) \end{pmatrix}.$$

Следовательно, это функция Морса если и только если (1) в конечном числе точек $\rho' = 0$ и (2) во всех этих точках $\rho'' \neq 0$ (обычно на рисунке это видно).

Гармонические формы. Числа Бетти

Форма ω называется *гармонической*, если $D\omega = 0$. Оказывается, что необходимое и достаточное условие гармоничности — это $d\omega = 0$ и $d^*\omega = 0$ (второе условие удобнее проверять в виде $d(*\omega) = 0$). Ясно, что гармоничность ω и $*\omega$ имеет место одновременно. Размерность пространства Γ_k гармонических k -форм равна $b_k = \dim H^k$ — k -му числу Бетти (размерности пространства k -мерных когомологий). Из последних двух утверждений мгновенно следует, что $b_k = b_{n-k}$.

Для функции Морса f обозначим через m_k число точек индекса k . Тогда верны следующие неравенства (неравенства Морса):

$$\begin{aligned} m_k &\geq b_k, \\ \sum_{j=0}^k (-1)^{k-j} m_j &\geq \sum_{j=0}^k (-1)^{k-j} b_j \end{aligned}$$

и равенство (теорема Морса об индексе)

$$\sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} m_j = \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} b_j.$$

Вычисление гармонических 0-форм $\omega = f(x)$ особенно просто: условие $d^*\omega = 0$ выполнено всегда, поскольку левая часть — это (-1) -форма. Условие $df = 0$ означает, что f является константой на компонентах связности. Итак, для связного многообразия $b_0 = 1$ и $\Gamma_0 = \langle 1 \rangle$.

Вычисление Γ_n тоже просто, поскольку $\Gamma_n = *\Gamma_0$. Легко проверить, что $*1 = \Omega$ (форма объёма). Тогда $\Gamma_n = \langle \Omega \rangle$ (в случае связного многообразия).

Задача. Найти гармонические формы на n -мерном эллипсоиде $\sum_{i=1}^{n+1} x_i^2/a_i^2 = 1$.

Решение. Γ_0 и Γ_n вычисляются как указано выше. Гармонических форм других размерностей нет: рассмотрим функцию $f = x_{n+1}$. Она имеет один минимум (индекс равен 0) и один максимум (индекс n), других критических точек не имеет. Поэтому если $1 \leq k \leq n-1$, то $b_k \leq m_k = 0$, т. е. $b_k = 0$.

Задача. Найти все гармонические формы на торе T^n с метрикой $ds^2 = dx_1^2 + \dots + dx_n^2$. (Имеется в виду, что $T^n = \mathbb{R}^n(x_1, x_2, \dots, x_n)/\mathbb{Z}^n$.)

Решение 1. Вспомним, что если метрика плоская, то $D(f dx_{i_1} \wedge dx_{i_2} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}) = (-\Delta f) dx_{i_1} \wedge dx_{i_2} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}$. Значит, все коэффициенты в мономах перед $dx_{i_1} \wedge dx_{i_2} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}$ являются гармоническими функциями. Но гармонические функции (если они не константы) достигают экстремума на границе компакта. Тор компактен, а границы не имеет. Значит, такие функции — константы. Чуть более подробно: соответствующее утверждение для компакта в \mathbb{R}^n доказано в курсе УрЧП, Если в некоторой точке $P \in T^n$ значение $f(x)$ максимально, то, применяя утверждение для локальной карты, получим, что в малой окрестности f равна этому же числу. Далее проводим стандартное рассуждение об открытости и замкнутости множества $\{x: f(x) = \max_{T^n} f(\xi)\}$: оно непусто, замкнуто из непрерывности f , и открыто по доказанному. Значит, это весь тор. Итак, гармоническими являются в точности формы с постоянными коэффициентами.

Решение 2. Ясно, что всякая форма ω с постоянными коэффициентами гармоническая: d от неё, очевидно, ноль, а d^* — ноль, поскольку $*\omega$ тоже имеет постоянные коэффициенты. Итак, найдено C_n^k линейно независимых гармонических форм степени k . Покажем, что больше их нет. Для этого рассмотрим функцию $f(x) = \cos(2\pi x_1) + \dots + \cos(2\pi x_n)$. Её особые точки — это все точки с координатами 0 и $1/2$, причём их индекс равен количеству координат, равных 0 (скажем, индекс $(0, 1/2, 1/2, 0, 1/2)$ будет 2). Значит, $\dim \Gamma_k = b_k \leq m_k(f) = C_n^k$.

Задача. Найти гармонические формы на торе вращения в \mathbb{R}^3 .

Решение. Итак, рассматривается погружённый в \mathbb{R}^3 тор:

$$\begin{aligned} x &= (R + r \cos \psi) \cos \varphi, \\ y &= (R + r \cos \psi) \sin \varphi, \\ z &= r \sin \psi \end{aligned}$$

с метрикой, индуцированной из евклидовой на \mathbb{R}^3 . Легко проверить, что матрица метрики в этих координатах такова:

$$G = \begin{pmatrix} (\partial_\varphi, \partial_\varphi) & (\partial_\varphi, \partial_\psi) \\ (\partial_\psi, \partial_\varphi) & (\partial_\psi, \partial_\psi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (R + r \cos \psi)^2 & 0 \\ 0 & r^2 \end{pmatrix}.$$

Переходим непосредственно к поиску гармонических форм. Как обычно, гармонические 0-формы — это константы, а 2-формы — это $c\Omega$, т. е. $cr(R + r \cos \psi)d\varphi \wedge d\psi$. Как известно, (см. предыдущую задачу) $\dim \Gamma_1 = 2$, поэтому нужно найти две линейно независимые гармонические 1-формы.

Проверим, что одной из них будет $d\varphi$. Действительно, $d(d\varphi) = ((\partial_1/\partial\varphi)d\varphi + (\partial_1/\partial\psi)d\psi) \wedge d\varphi = 0$. Заметим, что $*d\varphi = f(\psi)d\psi$. f не зависит от φ , поскольку коэффициенты метрики не зависят от φ . Поэтому $d*(d\varphi) = f'(\psi)d\psi \wedge d\psi = 0$. Значит, $d\varphi$ гармоническая.

Второй гармонической 1-формой будет $*d\varphi$. Найдём её. Пусть $*d\varphi = ad\varphi + bd\psi$. Тогда из равенства $\alpha \wedge *d\varphi = (\alpha, d\varphi)\Omega$ находим при $\alpha = d\varphi$: $bd\varphi \wedge d\psi = (R + r \cos \psi)^{-2} r(R + r \cos \psi)\varphi \wedge d\psi$, т. е. $b = r/(R + r \cos \psi)$, а при $\alpha = d\psi$: $-ad\varphi \wedge d\psi = 0$. Значит, $*d\varphi = [r/(R + r \cos \psi)]d\psi$.

Ясно, что эти формы линейно независимы. Значит, всё Γ_1 — это их линейные комбинации.

1. Осцилляторное приближение

Рассматривается оператор (оператор Шрёдингера, оператор Гамильтона)

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi.$$

(В многомерном случае вместо ψ'' ставится $\Delta\psi$.) Спрашивается, какие он имеет собственные значения: такие значения E , при которых решения уравнения $\hat{H}\psi = E\psi$ ограничены на бесконечности. Особенно интересно поведения спектра при $h \rightarrow 0$.

Имеет место следующая теорема: пусть $\min V(x) = 0$ и вне некоторого компакта $V(x) > \delta$. Пусть точек x_k глобального минимума $V(x)$ конечное число. В них есть матрицы $\Omega^2(x_k)$ вторых производных¹. Пусть они невырождены, а их собственные значения — $(\omega_j(x_k))^2$. Тогда рассмотрим набор $\mathcal{E} = \cup \mathcal{E}(x_k)$, где $\mathcal{E}(x_k) = \{\sum_j h\omega_j(x_k)(2m_j+1)/2, m_j \in \mathbb{Z}_+\}$ («набор» означает множество с повторениями: если при разных \vec{m} получается одно и то же, то такое число входит в \mathcal{E}_m дважды, трижды, и т. д.) Возьмём E_1, \dots, E_M — M самых меньших элементов из \mathcal{E} (с учётом кратностей). Пусть $\mathcal{E}(h)$ — спектр \hat{H} . Утверждается, что при $h < h_0(M)$ набор $\mathcal{E}(h)$ содержит по меньшей мере M собственных значений и M наименьших из них: $E_1(h), \dots, E_M(h)$ приближают E_j : $E_j(h) = E_j + o(h)$.

Ясно, что если $\min V(x) = V_0$, то нужно ко всем элементам \mathcal{E} прибавить V_0 .

(Замечу в скобках, что при доказательстве неравенств Морса эта теорема применялась (хотя это и не говорилось) в гораздо более общей ситуации линейного расслоения над многообразием, коим является пространство дифференциальных форм.)

Если $V(x) = 1/2(x, \Omega^2 x)$, то система с таким потенциалом называется (квантовым) осциллятором. Её спектр — $\{\sum_j h\omega_j(2m_j+1)/2, m_j \in \mathbb{Z}_+\}$, где ω_j^2 — собственные числа матрицы Ω^2 .

Задача. Найти спектр двумерного оператора Шрёдингера с $V(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + \dots + nx_n^2)$. Имеет ли он кратные собственные значения?

Решение. $\mathcal{E} = \{\frac{h}{2}[\sum_{j=1}^n \sqrt{j}(2m_j+1)], m_j \in \mathbb{Z}_+\}$. Кратные собственные значения имеются при $n \geq 4$: $\vec{m} = (2, 0, 0, 0, \dots, 0)$ и $\vec{m}' = (0, 0, 0, 1, 0, \dots, 0)$ дают равные собственные значения. Если бы при $n < 4$ были кратные собственные значения, то $1, \sqrt{2}$ и $\sqrt{3}$ были бы линейно зависимы над \mathbb{Q} , что неверно. (Доказательство: $a + b\sqrt{2} = c\sqrt{3}$, тогда $3c^2 - a^2 - 2b^2 = 2ab\sqrt{2}$, откуда $ab = 0$. При $b = 0$ получаем, что $\sqrt{3}$ рационален, а при $a = 0$ — $\sqrt{2/3}$ рационален.)

Задача. Используя осцилляторное приближение, найти квазиклассический предел первых 10 собственных чисел оператора Шрёдингера с потенциалом $V(x_1, x_2) = (x_1^2 - a^2)^2 + x_2^2$.

Решение. Минимум достигается при $x_1 = \pm a, x_2 = 0$. Значит, с точностью $o(h)$ (аккуратная формулировка — выше) спектр есть $\frac{h}{2}[\sqrt{2}(2l+1) + 2\sqrt{2}a(2m+1)]$, и все эти числа входят в него по два раза (поскольку точек две). В зависимости от a разные l, m будут соответствовать первым десяти из них.

Задача. Найти первые десять чисел спектра для $V(x) = \frac{1}{2}(x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_3^2)$ и их кратности.

Решение. Общая формула — $E_{\vec{m}} = ((2m_1+1) + \sqrt{2}(2m_2+1) + 2(2m_3+1))h/2$. Кратные собственные числа соответствуют одному и тому же m_2 и разным m_1 и m_3 . Выпишем сначала таблицу для $(2m_1+1) + 2(2m_3+1)$:

	m_1						
m_3	0	1	2	3	4	5	6
0	3	5	7	9	11	13	15
1	7	9	11	13	15		
2	11	13	15				
3	15						

Значит, значения этого выражения — 3, 5, 7, 7, 9, 9, 11, 11, 11, 13, 13, ...

Теперь выпишем таблицу для $2E_{\vec{m}}/h$:

	m_2			
	0	1	2	3
3	4,4	7,2	10,0	12,8
5	6,4	9,2	12,0	
7	8,4	11,2		
9	10,4			
11	12,4			

(Здесь выписаны приближения e' к величине e , для которых $e' < e < e' + 0,1$.) Все остальные собственные значения больше 13. Итак, первые 10 собственных значений $3 + \sqrt{2}$ (кратность 1), $5 + \sqrt{2}$ (1), $3 + 3\sqrt{2}$ (1), $7 + \sqrt{2}$ (2), $5 + 3\sqrt{2}$ (1), $3 + 5\sqrt{2}$ (1), $9 + \sqrt{2}$ (2), $7 + 3\sqrt{2}$ (2), $5 + 5\sqrt{2}$ (1), $11 + \sqrt{2}$ (3) (и всё это надо умножить на $h/2$).

Оператор монодромии. Потенциальные барьеры и ямы

Пусть $V(x)$ отличен от нуля лишь на конечном отрезке I (x одномерно). Тогда решения слева от него — это решение уравнения $-\frac{h^2}{2}\psi'' = E\psi$, что в зависимости от знака E есть две экспоненты или синус и косинус.

¹ Ω^2 — единое обозначение, а не $\Omega\Omega$.

Решения справа от отрезка I такое же. Имеем линейных оператор на двумерном пространстве решений этого уравнения, который переводит решение ψ_1 в решение ψ_2 , такое что существует решение ψ уравнения $-\frac{\hbar^2}{2}\psi'' + V(x)\psi = E\psi$, совпадающее с ψ_1 слева, а с ψ_2 справа от I . Он и называется оператором монодромии.

Оператор монодромии осмысленно рассматривать при $E > 0$. В этом случае в базисе из комплексных экспонент $e^{\pm ikx}$ ($k = \sqrt{2E/\hbar}$) он имеет вид $M = \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} \\ \beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix}$, где $|\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1$.

Если $V(x) = V_1(x) + V_2(x)$ и носитель V_1 левее носителя V_2 , то оператор монодромии M для $V(x)$ есть $M_2 M_1$, где $M_{1,2}$ — операторы монодромии $V_{1,2}$. Пусть оператор монодромии для функции $V(x)$ есть M . Найдём оператор монодромии для функции $V'(x) = V(x - a)$. Пусть $U: f(x) \mapsto f(x + a)$. Тогда $M' = U^{-1} M U$. В базисе e^{ikx}, e^{-ikx} имеем:

$$M' = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} \\ \beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & e^{-2ika}\bar{\beta} \\ e^{2ika}\beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix}.$$

Физический смысл имеют две характеристики — коэффициент прохождения $T = 1/|\alpha|^2$ и коэффициент отражения $R = |\beta/\alpha|^2$, $R + T = 1$.

Задача. Найти оператор монодромии для двойного прямоугольного барьера

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0, & x \in (0, a) \cup (b, b + a), \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

($0 < a < b$). Существуют ли энергии $E < V_0$, при которых коэффициент прохождения равен 1?

Решение. Найдём оператор монодромии при $0 < E < V_0$ для $V(x) = V_0 \chi_{(0,a)}(x)$. Решение слева от 0: e^{ikx} ($k = \sqrt{2E/\hbar}$), на $(0, a)$: $\lambda e^{\varkappa x} + \mu e^{-\varkappa x}$ ($\varkappa = \sqrt{2(V - E)/\hbar}$), справа от a : $\alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$. Коэффициенты $\lambda, \mu, \alpha, \beta$ находятся из условий 1-гладкости решения в точках склейки:

$$\begin{aligned} \lambda + \mu &= 1, & \alpha e^{ika} + \beta e^{-ika} &= \lambda e^{\varkappa a} + \mu e^{-\varkappa a}, \\ \lambda - \mu &= \frac{ik}{\varkappa}, & \alpha e^{ika} - \beta e^{-ika} &= \frac{\varkappa}{ik}(\lambda e^{\varkappa a} - \mu e^{-\varkappa a}). \end{aligned}$$

Отсюда $\lambda = (1 + (ik/\varkappa))/2$, $\mu = (1 - (ik/\varkappa))/2$ и

$$\alpha = \frac{e^{-ika}}{4} \left[e^{\varkappa a} \left(1 + \frac{ik}{\varkappa} \right) \left(1 + \frac{\varkappa}{ik} \right) + e^{-\varkappa a} \left(1 - \frac{ik}{\varkappa} \right) \left(1 - \frac{\varkappa}{ik} \right) \right] = \frac{e^{-ika}}{2} \left[2 \operatorname{ch} \varkappa a + \operatorname{sh} \varkappa a \left(\frac{ik}{\varkappa} + \frac{\varkappa}{ik} \right) \right].$$

Значение β для ответа на второй вопрос задачи не понадобится, поэтому здесь оно не приведено.

Оператор монодромии для потенциала из условия задачи есть

$$M = \begin{pmatrix} \alpha & e^{-2ikb}\bar{\beta} \\ e^{2ikb}\beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} \\ \beta & \bar{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \bar{\beta} \\ (e^{2ikb}\alpha + \bar{\alpha})\beta & \cdot \end{pmatrix}.$$

Интересующий нас случай $R = 0$ (резонансное прохождение) соответствует равенству нулю коэффициента $e^{2ikb}\alpha + \bar{\alpha}$, т. е. тому, что $e^{ikb}\alpha \in \mathbb{R}$. Последнее условие эквивалентно

$$e^{ik(b-a)} \left(\operatorname{cth} \varkappa a + \frac{1}{2i} \frac{\varkappa^2 k^2}{\varkappa k} \right) \in \mathbb{R}$$

Исследуем поведение аргумента от выражения в скобках при изменении $E \in (0, V_0)$. \varkappa монотонно убывает к нулю, поэтому $\operatorname{cth} \varkappa a$ монотонно возрастает к $+\infty$. $(\varkappa^2 - k^2)/(\varkappa k)$ монотонно убывает от $+\infty$ до $-\infty$ (монотонность проще всего заметить из формулы $(\varkappa^2 - k^2)/(\varkappa k) = (\varkappa/k) - (k/\varkappa)$). Значит, аргумент растёт от $-\pi/2$ до некоторого положительного значения, (проходя через 0 при $E = V_0/2$).

Аргумент $e^{ik(b-a)}$ растёт от нуля (т. к. $b > a$). Значит, аргумент $e^{ikb}\alpha$ растёт от $-\pi/2$ и положителен при $E = V_0/2$. Поэтому при некоторой E , $0 < E < V_0/2$, он равен нулю. Итак, при всех $V_0 > 0$, при всех a и b ($b > a$) существует такая энергия $E \in (0, V_0)$, что $R = 0$.

Задача. Найти собственные значения $E < 0$ оператора Шрёдингера с потенциалом в виде прямоугольной ямы:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 < 0, & x \in (0, a), \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Решение. Заметим, что потенциал симметричен относительно $x = a/2$, поэтому если $\psi(x)$ — собственная функция с собственным значением E , то $\psi(a - x)$ — собственная функция с собственным значением E . Тогда $\psi_+(x) = (\psi(x) + \psi(a - x))/2$ и $\psi_-(x) = (\psi(x) - \psi(a - x))/2$ — тоже собственные функции с собственным значением E . (Впрочем, как будет показано ниже, одна из них обязательно будет нулём,

так что собственных значений кратности 2 не будет.) Для удобства далее введём новую координату $y = x - a/2$ и обозначим $b = a/2$.

Будем искать собственные значения, для которых собственные функции чётны:

$$\psi(y) = \begin{cases} A \cos \left(\sqrt{\frac{2(|V_0| - |E|)}{h^2}} y \right), & |y| < b, \\ B \exp \left(-\sqrt{\frac{2|E|}{h^2}} |y| \right), & |y| > b. \end{cases}$$

(Вид решения при $|y| > b$ таков, поскольку решение должно быть ограничено на бесконечности.) Коэффициенты A и B ищутся из условия 1-гладкости решения в точках $y = \pm b$. Впрочем, условия в точке $y = -b$ ничем не отличаются от условий в точке b , поэтому выпишем условия в точке b .

$$\begin{aligned} A \cos \left(\sqrt{\frac{2(|V_0| - |E|)}{h^2}} b \right) &= B \exp \left(-\sqrt{\frac{2|E|}{h^2}} b \right), \\ -A \sqrt{\frac{2(|V_0| - |E|)}{h^2}} \sin \left(\sqrt{\frac{2(|V_0| - |E|)}{h^2}} b \right) &= -B \sqrt{\frac{2|E|}{h^2}} \exp \left(-\sqrt{\frac{2|E|}{h^2}} b \right). \end{aligned}$$

Чтобы система имела ненулевое решение, необходимо, чтобы

$$\sqrt{|V_0| - |E|} \operatorname{tg} \left(\sqrt{\frac{2(|V_0| - |E|)}{h^2}} b \right) = \sqrt{|E|}.$$

Для нечётных собственных функций, представляемых в виде

$$\psi(y) = \begin{cases} A \sin \left(\sqrt{\frac{2(|V_0| - |E|)}{h^2}} y \right), & |y| < b, \\ B \operatorname{sgn} y \exp \left(-\sqrt{\frac{2|E|}{h^2}} |y| \right), & |y| > b \end{cases}$$

аналогично находим условие

$$\sqrt{|V_0| - |E|} \operatorname{ctg} \left(\sqrt{\frac{2(|V_0| - |E|)}{h^2}} b \right) = -\sqrt{|E|}.$$

Исследуем корни этих уравнений. Примем $z = \sqrt{2(|V_0| - |E|)}/h$. Тогда уравнения перепишутся в виде

$$\begin{aligned} z \operatorname{tg}(bz) &= \sqrt{A^2 - z^2}, \\ -z \operatorname{ctg}(bz) &= \sqrt{A^2 - z^2}, \end{aligned}$$

где $A = \sqrt{2V_0}/h$. Левая их часть — возрастающая при $z > 0$ (на каждом интервале непрерывности) функция: $d(z \operatorname{tg}(bz))/dz = (\sin(2bz) + 2bz)/(2 \cos^2(bz))$, правая — убывающая. Поэтому у первого уравнения на каждом интервале непрерывности $((2k-1)\pi/2b, (2k+1)\pi/2b)$ имеется один корень, если $A > (2k+1)\pi/2b$, $k > 0$. Рассмотрение первого интервала $(0, \pi/2b)$ и последнего (где $(2k-1)\pi/2b < A < (2k+1)\pi/2b$) показывают, что на первом корень есть всегда, а на втором — при $A \geq k\pi/b$. Общее число корней, таким образом, равно n , если $\pi(n-1) < Ab \leq \pi n$.

Второе уравнение исследуется аналогично, у него n корней при $\pi(2n-1)/2 < Ab \leq \pi(2n+1)/2$. Общее число корней равно N при $(N-1)\pi/2 < Ab < N\pi/2$. Корни двух серий, как легко проверить, чередуются: на $[0, \pi b/2]$ — корень первого, на $[\pi b/2, \pi b]$ — корень второго, на $[\pi b, 3\pi b/2]$ — корень первого, и т. д. Поэтому кратных среди них нет, так что любая собственная функция либо чётна, либо нечётна.

Спектры оператора Гамильтона в других ситуациях

Не следует думать, что спектр оператора Шрёдингера всегда дискретен. Если потенциал не ограничен снизу, он вполне может быть непрерывен, как показывает следующая

Задача. Найти спектр оператора Шрёдингера с $V(x_1, x_2) = (x_1^2 - x_2^2)/2$.

Решение. Как обычно, переменные разделяются. Спектр одномерного оператора с $V(x_1) = x_1^2/2$ хорошо известен: $(2m+1)h/2$, $m \in \mathbb{Z}_+$.

Найдём спектр одномерного оператора с $V(x) = -x^2/2$. Итак, нужно найти, при каких $E \in \mathbb{R}$ существует решение уравнения

$$h^2 \psi''(x) + (x^2 + 2E) \psi = 0,$$

ограниченное на бесконечности. Оказывается, что все его решения при всех E ограничены. Для этого рассмотрим функцию $A(x) = h^2 \psi'^2(x) + (x^2 + 2E)\psi^2(x)$. (Её смысл — это «почти энергия»: если бы x «не менялось», то $A'(x) = 0$.) Тогда $A' = 2\psi'(h^2 \psi'' + (x^2 + 2E)\psi) + 2x\psi^2 = 2x\psi^2$. Значит, $dA \leq [2x/(x^2 + 2E)]Adx$, т. е. $d(\ln A) \leq d(\ln(x^2 + 2E))$ (если $x^2 + 2E > 0$, что обязательно так вне некоторой окрестности нуля). Интегрируя это неравенство, получим, что $\ln A \leq \ln(x^2 + 2E) + \ln C$ (при $x > x_0$), т. е. $A < C(x^2 + 2E)$. Значит, $\psi^2 < C$, т. е. решение ограничено на $+\infty$. Ограниченность на $-\infty$ проверяется либо дословным повторением всех рассуждений, либо заменой решения $\psi(x)$ на решение $\psi(-x)$.

Среди операторов Гамильтона встречаются операторы, не являющиеся оператором Шрёдингера:

Задача. Найти спектр оператора, соответствующего гамильтониану $p_1 x_2 - p_2 x_1$.

Решение. Соответствующее уравнение имеет вид $-ih(x_2 \psi'_{x_1} - x_1 \psi'_{x_2}) = E\psi$. Решение УрЧП первой степени начинается с поиска характеристик — поверхностей, где дифференциальный оператор равен 0: их уравнение $dx_1/x_2 = -dx_2/x_1$, т. е. $d(x_1^2 + x_2^2) = 0$. Одну переменную нужно взять так, чтобы она была постоянна вдоль характеристик, а за остальные — что угодно. Берём систему полярную систему координат (r, φ) : тогда

$$\begin{aligned} dx_1 &= \cos \varphi dr - x_2 d\varphi, \\ dx_2 &= \sin \varphi dr + x_1 d\varphi. \end{aligned}$$

Значит, $d\psi = (\psi'_{x_1} \cos \varphi + \psi'_{x_2} \sin \varphi)dr + (-x_2 \psi'_{x_1} + x_1 \psi'_{x_2})d\varphi$. Следовательно, уравнение переписывается в виде $ih\psi'_\varphi = E\psi$. Его решения — $\psi = f(r)e^{E\varphi/ih}$. Чтобы это была корректно заданная функция, необходимо и достаточно, чтобы E/h было целым числом (при $\varphi = 0$ и $\varphi = 2\pi$ должно получаться одно и то же). Гладкость в нуле и ограниченность на бесконечности можно получить, выбрав $f(r)$ ограниченной и быстро стремящейся к нулю при $r \rightarrow +0$. Итак, спектр — это $\{kh, k \in \mathbb{Z}\}$.