пустимые решения получаются поэтому только для таких выделенных, дискретных, значений энергии $\mathscr{E}_i$, для к-рых $\alpha_{22}(\mathscr{E}_i)=0$. Эти значения $\mathscr{E}_i$ являются, т. о., корнями ур-ния $\alpha_{22}(\mathscr{E})=0$. Получающиеся уровни энергии невырожденны и отвечают (как и в классич. механике) финитному движению частицы в потенц. яме, т. е. *связанным состояниям*.

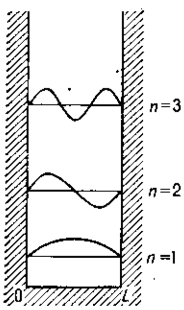

Рис. 7.

В отличие от классич. механики, где финитное движение в потенц. яме происходит между двумя точками остановки при любом значении энергии из области (III), квантовомеханич. движение возможно лишь при определ. дискретных значениях энергии. Возникновение дискретных уровней энергии («квантование энергии») — чисто волновое явление. Математически оно происходит благодаря тому, что условия ограниченности решения (73), (74) стационарного ур-ния Шрёдингера при $x \to \pm\infty$ играют роль краевых условий, удовлетворить к-рым можно лишь при дискретных энергиях (аналогично, напр., тому, как определ. граничные условия колебаний струны приводят к дискретному спектру её частот). Буквальная аналогия существует для движения частицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и колебаниями струны с закреплёнными концами (рис. 7). В обоих случаях граничные условия приводят к тому, что на длине L струны (или ширине потенц. ямы) должно укладываться целое число n полуволн: $^1/_2\lambda n=L$. Отсюда получается спектр энергий:

$$\mathscr{E}_n=\frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\cdot n^2,\quad k_n=\frac{2\pi}{\lambda},\quad n=1,\ 2,\ \ldots$$

Дискретный спектр может быть проиллюстрирован также на примере квантового *осциллятора* — частицы, движущейся в поле с $V(x)={}^1/_2 m\omega^2x^2$. Задача о квантовом осцилляторе является одной из важнейших и точно решаемых аналитически задач К. м. Важность её обусловлена тем, что для произвольного потенц. поля в положении равновесия x_0 должен быть минимум потенц. энергии: $(dV/dx)_{x=x_0}=0$, и $V(x)$ вблизи от положения равновесия приближённо представима в виде осцилляторной: $V(x)=V(x_0)+{}^1/_2(d^2V/dx^2)_{x=x_0}x^2+\ldots$, где x — отклонение от положения равновесия, а частота колебаний эквивалентного осциллятора $\omega=\sqrt{(d^2V/dx^2)_{x=x_0}/m}$.

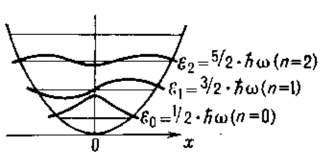

Рис. 8.

На рис. 8 по оси абсцисс отложено расстояние частицы от положения равновесия. Кривая (парабола) изображает потенц. энергию частицы. В этом случае частица с любой энергией (как и в случае ямы с бесконечными стенками) «заперта» внутри ямы, поэтому спектр её энергии дискретен. Горизонт. прямые изображают уровни энергии частицы. Энергия низшего уровня $\mathscr{E}_0={}^1/_2\hbar\omega$ — наименьшее значение энергии, совместимое с соотношением неопределённостей [положение частицы на дне ямы ($\mathscr{E}=0$) означало бы точное равновесие, при к-ром $x=0$ и $p=0$, что невозможно, согласно принципу неопределённости]. Следующие, более высокие уровни энергии осциллятора расположены на равных расстояниях с интервалом $\hbar\omega$; энергия n-го уровня:

$$\mathscr{E}_n=\hbar\omega\,(n+{}^1/_2).$$

Над каждой горизонт. прямой приведена волновая ф-ция данного состояния. За пределами ямы (в неклассич. области) волновая ф-ция быстро затухает. В классич. области движения волновая ф-ция осциллирует. Характерно, что число узлов волновой ф-ции равно квантовому числу n уровня энергии. Этот результат справедлив и для др. одномерных потенц. полей (т. н. осцилляционная теорема). В высоковозбуждённых состояниях с большими n длина де-бройлевской волны частицы становится малой по сравнению с характерными размерами области движения. Движение приобретает классич. характер: волновой пакет, построенный из состояний с близкими (и большими) n будет двигаться с большой точностью по классич. законам.

Дискретный характер уровней энергии, отвечающих связанным состояниям, позволяет понять, почему в определ. условиях заведомо сложные, составные системы (напр., атомы) ведут себя как элементарные частицы. Причина этого в том, что осн. состояние связанной системы отделено от первого возбуждённого состояния энергетич. интервалом, наз. энергетической щелью. Такая ситуация характерна для атомов, молекул, ядер и др. квантовых систем. Благодаря энергетич. щели внутр. структура системы не проявляется до тех пор, пока обмен энергией при её взаимодействиях с др. системами не превысит значения, равного ширине щели. Поэтому при достаточно малом обмене энергией сложная система (напр., ядро или атом) ведёт себя как бесструктурная частица (матер. точка). Так, при энергиях теплового движения, меньших энергии возбуждения атома, атомные электроны не могут участвовать в обмене энергией и не дают вклада в теплоёмкость. Справедливо и обратное заключение: наличие в системе возбуждённых состояний (как это, напр., имеет место для адронов) является свидетельством в пользу её составной структуры.

Движение в периодическом поле

Движение в периодич. поле $V(x+a)=V(x)$ (где a — период) может служить моделью движения электрона в кристалле и иллюстрирует возникновение разрешённых и запрещённых зон (полос) энергии. Пусть $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$ — два к.-л. линейно независимых решений ур-ния Шрёдингера, отвечающих определ. энергии $\mathscr{E}$. Поскольку оператор сдвига на период поля коммутирует с гамильтонианом, ф-ции $\varphi_1(x+a)$ и $\varphi_2(x+a)$ также будут решениями ур-ния Шрёдингера, принадлежащими тому же значению энергии. Поэтому они должны выражаться линейно через $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$:

$$\varphi_1(x+a)=\beta_{11}\varphi_1(x)+\beta_{21}\varphi_2(x),$$
$$\varphi_2(x+a)=\beta_{12}\varphi_1(x)+\beta_{22}\varphi_2(x).$$

Матричные элементы β_{ik} в этом преобразовании зависят от вида $V(x)$ и выбранного значения энергии, а определитель матрицы β_{ik} $\Delta=\beta_{11}\beta_{22}-\beta_{12}\beta_{21}$ должен быть равен 1 (в силу условия постоянства определителя Вронского $\varphi_1'\varphi_2-\varphi_1\varphi_2'=\mathrm{const}$, к-рому удовлетворяют два линейно независимых решения). Из решений $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$ можно составить линейную комбинацию $\psi=c_1\varphi_1+c_2\varphi_2$, к-рая, будучи решением ур-ния Шрёдингера с энергией $\mathscr{E}$, одновременно является собств. состоянием оператора сдвига $\hat{T}\psi(x)=\psi(x+a)=\lambda\psi(x)$. Собств. значение λ при этом определяется ур-нием

$$\begin{vmatrix}\beta_{11}-\lambda & \beta_{21}\\ \beta_{12} & \beta_{22}-\lambda\end{vmatrix}=\lambda^2-\lambda(\beta_{11}+\beta_{22})+1=0.$$

Для физически приемлемого решения должно выполняться условие $|\lambda|=1$ (т. к. при $|\lambda|\neq 1$ неогранич. сдвиг решения в одну или др. сторону должен был бы приводить к бесконечно большому его значению). Для этого необходимо выполнение неравенства:

$$-1\leqslant {}^1/_2\,[\beta_{11}(\mathscr{E})+\beta_{22}(\mathscr{E})]\leqslant 1,$$

к-рое и определяет допустимые при движении в периодич. поле не дискретные уровни, а полосы энергии. [Ф-ция $\beta_{11}(\mathscr{E})+\beta_{22}(\mathscr{E})$ не зависит от конкретного выбора решений $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$.] Полагая ${}^1/_2[\beta_{11}(\mathscr{E})+$