но-колебательных спектров в кристаллах. I. Теория эффекта Шпольского. II. Сравнение эффекта Шпольского с эффектом Мёссбауэра, «Оптика и спектроскопия», 1963, т. 14, с. 362, 491; Теплицкая Т. А., Квазилинейчатые спектры люминесценции как метод исследования сложных природных органических смесей, М., 1971; Осадько И. С., Персонов Р. И., Шпольский Э. В., Линейчатые спектры примесных молекул в н-парафиновых матрицах и теория примесного центра, «Изв. АН СССР. Сер. физич.», 1973, т. 37, № 3, с. 540. *Л. Ф. Уткина.*

ШРЁДИНГЕРА ОПЕРА́ТОРА СПЕКТР — множество собств. значений *оператора* Шрёдингера (ОШ): $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$, где $\hat{H}$ — *гамильтониан* — оператор полной энергии системы (в том случае, когда потенциал не зависит от времени), $\hat{T}$ и $\hat{V}$ — операторы кинетич. и потенц. энергий. В случае локальных сил оператор $\hat{V}$ является ф-цией координат $V(\mathbf{r})$. Ш. о. с. определяет все свойства квантовых систем и может быть дискретным (энергии связанных состояний — ядер, молекул, атомов и т. д.) и (или) непрерывным (энергии состояний рассеяния, к к-рым относятся и квазистационарные — распадные, резонансные состояния).

Установление связей Ш. о. с. с силами, действующими в квантовых системах, — одна из фундам. задач физики. Наиб. изучено одномерное движение частицы (волны) во внеш. поле. Принципиально разработаны методы воздействия на квантовую систему, к-рые позволяют, изменяя форму потенциала v, трансформировать Ш. о. с.: поднять или опустить определ. уровень энергии, уничтожить его или породить новый, передвинуть любое состояние в пространстве, преобразовать зонную структуру периодич. поля, т. е. направленно изменить свойства системы. Этим методам отвечают точные решения обратной задачи рассеяния (см. *Обратной задачи рассеяния метод*), но в то же время возможно наглядное (качественное) рассмотрение, к-рое позволяет без вычислений установить, какова в общих чертах должна быть конфигурация внеш. поля, воздействующего на систему, для достижения желаемого изменения её Ш. о. с.

Чисто дискретный спектр возникает в случае потенц. ям с бесконечно высокими стенками $v(x)$. Для симметрич. ям $[v(x)=v(-x)]$ их форма полностью определяется собств. значениями ОШ — уровнями энергии $\mathscr{E}_n$. Для бесконечно глубокой прямоуг. ямы в системе единиц $\hbar=1$, масса частицы $m={}^1/_2$ ОШ имеет вид: $-d/dx^2+v(x)$ (см. рис. 7 к ст. *Квантовая механика*). Рассмотрим, как нужно изменить форму плоского дна прямоуг. потенц. ямы, чтобы сдвинуть осн. уровень энергии $\mathscr{E}_1$ вверх, ближе к $\mathscr{E}_2$, и как при этом меняется волновая ф-ция $\psi_1(x)$ осн. состояния (рис. 1). Осн. состояние наиб. чувствительно к изменению

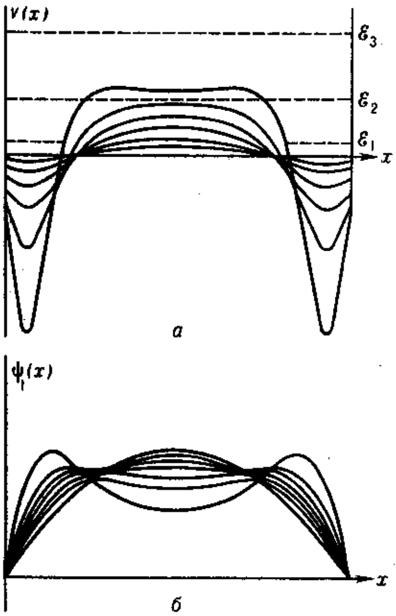

Рис. 1. Деформация дна бесконечной прямоугольной потенциальной ямы, необходимая для подъёма основного уровня энергии $\mathscr{E}_1$ к $\mathscr{E}_2$ (*а*) (штриховые линии — невозмущённые уровни энергии), и соответствующая деформация волновой функции ψ_1, приближающая её по модулю к ψ_2 (*б*). На рис. *а* виден намечающийся прогиб в центральной области потенциального барьера.

v в центр. области потенц. ямы, где вероятность обнаружить частицу максимальна, поэтому для сдвига уровня $\mathscr{E}_1$ к $\mathscr{E}_2$ нужно увеличить v в этой области (рис. 1, *а*). Для того чтобы все остальные уровни сохранили своё положение, необходимо подобрать компенсирующее понижение потенциала (ямки) вблизи краёв потенц. ямы, где мала ф-ция $\psi_1(x)$. Воздействие этих ямок на осн. состояние будет незначительным. Для поднятия первого возбуждённого уровня $\mathscr{E}_2$ нужно повысить потенциал в областях обеих пучностей ф-ции $\psi_2(x)$ (рис. 2), а для сохранения положения остальных уровней энергии — создать 3 компенсирующие ямки в области узлов ф-ции $\psi_2(x)$. Аналогично можно определить форму возмущений потенциала для подъёма (снижения) (рис. 3) любого уровня энергии.

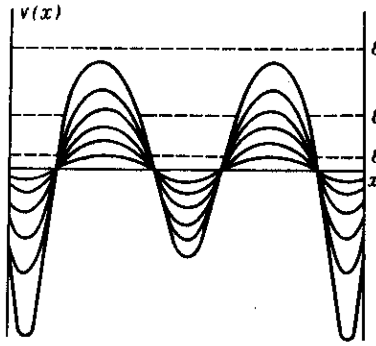

Рис. 2. Возмущения потенциала, вызывающие подъём уровня $\mathscr{E}_2$ к $\mathscr{E}_3$. Увеличение v в области максимумов $|\psi_2|$ сдвигает $\mathscr{E}_2$ вверх, пересиливая влияние ямок притяжения вблизи узлов ψ_2. Влияние барьеров и ямок на остальные уровни взаимно компенсируются — они остаются на прежних местах.

Качественно так же подбираются возмущения потенциала для сдвига уровней в случае потенц. ям др. вида.

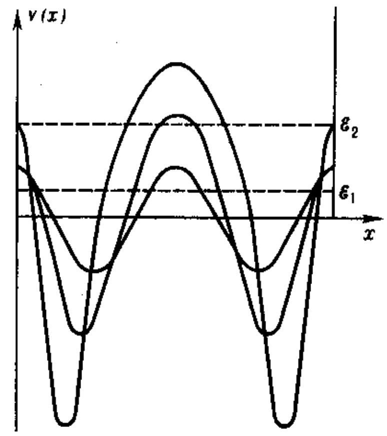

Рис. 3. Возмущение дна бесконечной прямоугольной потенциальной ямы, вызывающее опускание лишь уровня $\mathscr{E}_2$.

В общем случае несимметричных одномерных бесконечных потенц. ям в полный набор спектральных параметров, определяющих систему, помимо уровней энергии $\mathscr{E}_n$, входят т. н. нормировочные константы (весовые факторы), характеризующие краевое (асимптотич.) поведение нормированных волновых ф-ций. В качестве таких параметров могут служить производные собств. ф-ций $\psi'_n(a)=\gamma_n$ у бесконечной стенки ($x=a$) прямоуг. ямы или множители M_n при затухающей экспоненте в асимптотич. ($x\to\infty$) поведении волновых ф-ций связанных состояний (напр., в осцилляторе): $M_n x_n \exp(-x^2/2)$. При увеличении (уменьшении) $|\gamma_1|$ и неизменных остальных спектральных параметрах из полного набора $\{\mathscr{E}_n, \gamma_n\}$ волновая ф-ция $\psi_1(x)$