

Рассмотренные методы в принципе позволяют создавать резонансы с нулевой шириной (связанные состояния в непрерывном спектре с нулевой вероятностью распада), а также строить безотражательные потенц. ямы с любым числом связанных состояний, абсолютно прозрачные при любой энергии непрерывного спектра (в т. ч. потенциалы солитонного типа для случая одного связанного состояния).

Для преобразования спектра систем с периодич. потенц. полем (напр., кристаллов) можно использовать алгоритмы изменения нормировочного множителя выбранного состояния бесконечной прямоуг. ямы. Если периодически продолжить потенциал, изображённый на рис. 4, нарушающий симметрию производных волновой ф-ции $\psi_1(x)$ осн. состояния на краях ямы, то в спектре возникает лакуна (запрещённая зона) в окрестности ε_1 . Действительно, для гладкого сшивания волновой ф-ции осн. состояния бесконечной ямы при продолжении $\psi_1(x)$ на всю ось x на каждом новом периоде потребуется умножить $\psi_1(x)$ на фактор нарушения симметрии $|\psi_1(a)|/|\psi_1(0)|$, что приводит к экспоненц. росту амплитуды ψ_1 при энергии ε_1 . Такая ситуация характерна для запрещённой энергетич. зоны системы. Т. к. этот рост тем сильнее, чем больше фактор нарушения симметрии, степенью запрета можно управлять. Волновые ф-ции всех остальных состояний гладко продолжаются на всю ось без изменения величины их модуля, что характерно для разрешённых зон.

Можно порождать связанные состояния при любой энергии в запрещённых и разрешённых зонах, создавать безотражат. потенц. возмущения.

Теория спектральных преобразований многоканальных ОШ, отвечающих системе неск. ур-ний Шрёдингера, связанных матрицей взаимодействия $\|u_{ij}(x)\|$, предсказывает, как нужно трансформировать элементы матрицы, чтобы сдвинуть избранные уровни энергии, изменить нормировочные векторы связанных состояний и ширины резонансов, породить или устранил отдельные связанные состояния. Напр., связанные состояния в непрерывном спектре возможны с короткодействующей потенц. матрицей, в отличие от одноканального случая, когда для этого требуется слабо спадающее осциллирующее поведение $v(r)$ при больших r .

Особенностью многоканальных систем является и то, что матрицы взаимодействия, относящиеся к абс. прозрачным (безотражательным при всех энергиях) системам, могут иметь в отд. каналах труднопроходимые барьеры, к-рые обходятся волнами по др. каналам. В многомерном случае возникают связи между параметрами Ш. о. с., нахождение их независимых аналогов — открытая, пока не решённая задача.

Для ОШ, отвечающего движению волн по решёткам (в кристаллич. структурах, дискретных пространствах квантовых чисел, нумерующих каналы и смешиваемые конфигурации, и т. п.), имеется конечная энергетич. полоса проводимости. Возможно создание систем со связанными состояниями в области непрерывного спектра, туннелирование через потенц. барьеры, «свисающие» из верх. запрещённой энергетич. зоны. Для сдвига уровня и изменения нормировочных факторов избранного состояния необходимо вводить минимально нелокальные потенциалы. Последние позволяют управлять шириной запрещённой зоны и даже приводить к инверсии спектра связанных состояний.

Понимание принципов управления Ш. о. с. квантовых систем расширяет возможности приложений теории для создания новых приборов в микроэлектронике, квантовой оптике и т. д. Создание полей необходимой конфигурации возможно осуществлять с помощью технологии тончайших квантовых проводников, суперрешёток (см. Сверхрешётка), создания структур на поверхности с помощью туннельного микроскопа (см. Сканирующий туннельный микроскоп).

Лит.: Левитан Б. М., Обратные задачи Штурма — Лиувилля, М., 1984; Марченко В. А., Операторы Штурма — Лиувилля и их приложения, К., 1977; Захарьев Б. Н., Костюк Н. А., Плеханов Е. Б., Точно решаемые одно- и многоканальные модели (уроки квантовой интуиции), «ЭЧАЯ», 1990, т. 21, с. 914;

Захарьев Б. Н., Дискретная и непрерывная квантовая механика, точно решаемые модели (уроки квантовой интуиции II), «ЭЧАЯ», 1992, т. 23, с. 1387; Захарьев Б. Н., Чабанов В. М., Качественная теория управления спектрами, рассеянием, распадами (уроки квантовой интуиции), «ЭЧАЯ», 1994, т. 25, с. 1561; Захарьев Б. Н., Уроки квантовой интуиции, Дубна, 1996; Захарьев Б. Н., Сузъко А. А., Потенциалы и квантовое рассеяние. Прямая и обратная задачи, М., 1985.

Б. Н. Захарьев.

ШРЁДИНГЕРА ПРЕДСТАВЛЕНИЕ — один из способов описания квантовомеханич. явлений, в к-ром рассматривается изменение вектора состояния во времени (эволюция вектора состояния), а операторы $A = \hat{A}_S$, отвечающие физ. величинам, не зависят от времени. Эта схема предложена Э. Шрёдингером (E. Schrödinger) в 1926.

В случае стационарного гамильтониана H из ур-ния Шрёдингера

$$i\hbar \partial_t |\Psi_S\rangle = \hat{H} |\Psi_S\rangle$$

выводится закон эволюции вектора состояния $|\Psi\rangle = |\Psi_S\rangle$ в Ш. п.:

$$|\Psi_S(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) |\Psi_S(0)\rangle.$$

Тогда из выражения для ср. значения

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi_S(t) | \hat{A}_S | \Psi_S(t) \rangle = \\ = \langle \Psi_S(0) | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{A}_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) | \Psi_S(0) \rangle$$

следует, что если ввести новый вектор состояния $|\Psi_H\rangle = |\Psi_S(0)\rangle$, не зависящий от времени и отвечающий выбору Гейзенberга представления, то соответствующие операторы наблюдаемых A_H уже зависят от времени:

$$\hat{A}_H = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \hat{A}_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right)$$

и подчиняются ур-нию эволюции Гейзенberга

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H].$$

Переход к любому др. представлению осуществляется применением подходящего унитарного оператора $\hat{U}(t)$:

$$|\Psi_V\rangle = |\hat{U}(t)\rangle |\Psi_S\rangle, \hat{A}_V = \hat{U}(t) \hat{A}_S \hat{U}^{-1}(t).$$

Напр., полагая $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где \hat{H}_0 — гамильтониан свободной системы, и выбирая $\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right)$, приходим к представлению взаимодействия, или представлению Дирака (P. A. M. Dirac, 1927).

Лит.: Блохицев Д. И., Основы квантовой механики, 6 изд., М., 1983; Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика. Нерелятивистская теория, 4 изд., М., 1989. Ю. П. Рыбаков.

ШРЁДИНГЕРА УРАВНЕНИЕ — основное динамич. ур-ние нерелятивистской квантовой механики; предложено Э. Шрёдингером (E. Schrödinger) в 1926. В квантовой механике Ш. у. играет такую же фундам. роль, как ур-ния движения Ньютона в классич. механике и Максвелла уравнения в классич. теории электромагнетизма. Ш. у. описывает изменение во времени состояния квантовых объектов, характеризуемого волновой функцией. Если известна волновая ф-ция ψ в нач. момент времени, то, решая Ш. у., можно найти ψ в любой последующий момент времени t .

Для частицы массой m , движущейся под действием силы, порождаемой потенциалом $V(x, y, z; t)$, Ш. у. имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(x, y, z; t) \psi, \quad (1)$$

где $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ — оператор Лапласа, x, y, z — координаты. Это ур-ние наз. временным Ш. у.

Если V не зависит от времени, то решения Ш. у. можно представить в виде

$$\psi(x, y, z; t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon t\right) \psi(x, y, z), \quad (2)$$