$+\beta_{22}(\mathcal{E})]=\cos(qa)$, получим $\lambda=\exp(\pm iqa)$, где величина q — квазиимпульс системы. Энергия частицы (как следует из приведённого равенства, если его разрешить относительно $\mathcal{E}$) должна быть чётной ф-цией q. Тот факт, что собств. значение оператора сдвига равно $\exp(iqa)$, позволяет заключить, что волновая ф-ция частицы в периодич. поле имеет вид: $\psi=\exp(iqx)\varphi(x)$, где $\varphi(x)$ — периодич. ф-ция, $\varphi(x+a)=\varphi(x)$ (см. *Блоха теорема*). Эти результаты лежат в основе совр. теории твёрдого тела.

Движение в центральном поле

Задача о квантовомеханич. движении двух частиц с массами m_1 и m_2 [энергия взаимодействия между к-рыми $V(|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|)$ зависит только от относит. расстояния между ними] сводится к рассмотрению свободного движения центра масс этих частиц и относит. движения в центр. поле $V(|\boldsymbol{r}|)$ частицы с приведённой массой $\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$. Т. к. центр. поле обладает симметрией вращения, при движении в нём сохраняется угл. момент частицы и в качестве полного набора измеряемых величин могут быть выбраны квадрат момента l^2, проекция m момента на выделенную ось (обычно ось z) и энергия $\mathcal{E}$ частицы. Соответственно волновая ф-ция частицы в сферич. системе координат (r, ϑ, φ) может быть записана в виде произведения радиальной ф-ции (к-рую удобно представлять в виде $u(r)/r$) и угл. ф-ции, в качестве к-рой выбирается *сферическая функция* $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$, являющаяся собств. ф-цией квадрата момента и его проекции на ось z,

$$\psi(r,\ \vartheta,\ \varphi)=\frac{u_{\mathcal{E},\,l}(r)}{r}\,Y_{lm}(\vartheta,\ \varphi). \qquad (75)$$

При этом ф-ция $u_{\mathcal{E},\,l}(r)$ удовлетворяет «одномерному» ур-нию Шрёдингера по переменной r:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]u=\mathcal{E}u \qquad (76)$$

с эфф. потенц. энергией $V_{\text{эфф}}=V(r)+\hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2$. Состояния с $l=0$, 1, 2, 3... наз. соответственно s-, p-, d-, f-, . . . (и далее по алфавиту) состояниями. Второй член в $V_{\text{эфф}}$ наз. центробежной энергией (аналогичная добавка к $V(|\boldsymbol{r}|)$ при рассмотрении радиального движения возникает в классич. механике из-за трансверсальной части кинетич. энергии частицы). Угл. зависимость (75) универсальна для любых центр. полей, что отражает универсальность выполнения закона сохранения момента в таких полях. В классич. механике этот закон приводит к тому, что движение в любом центр. поле происходит в фиксир. плоскости, перпендикулярной моменту и проходящей через центр. Поскольку при $m=l$ $Y_{ll}\sim(\sin\vartheta)^l$, выражение (75) в случае очень больших l отлично от нуля лишь вблизи плоскости $\vartheta=\pi/2$, т. е. в пределе больших l Y_{ll} описывает классич. плоское движение. Напротив, квантовое движение при малых l совершенно непохоже на классическое.

В ст. *Атом* на рис. 2 приведены распределения электронной плотности вокруг ядра в атоме водорода для состояний с низшими значениями l и m. Видно, что задание момента (т. е. l и m) полностью определяет угл. распределение, к-рое сильно отличается от плоского. Особенно отличается от классического движение в S-волне, имеющее сферически симметричное распределение. В классич. физике устойчивое движение частицы с нулевым моментом в поле притяжения было бы вообще невозможно: частица падала бы на притягивающий центр. В К. м. для полей притяжения, растущих (по модулю) при $r\to 0$ медленнее, чем const$/r^2$, падения на центр в S-волне не происходит. Этот факт естественно следует из соотношения неопределённостей. Центробежная энергия при $l\neq 0$ представляет собой потенц. барьер, «закрывающий» область малых r. Существуют два решения ур-ния Шрёдингера: одно из них затухает под центробежным барьером при $r\to 0$, а другое — растёт. Для $V(r)$, растущих при $r\to 0$ медленнее, чем const$/r^2$, центробежная энергия обусловливает универс. зависимость радиальной ф-ции при $r\to 0$:

$$u_{\mathcal{E},\,l}(r)\approx c_1 r^{l+1}+\frac{c_2}{r^l}. \qquad (77)$$

Оба члена в (77) при $r\to 0$ являются линейно независимыми решениями ур-ния Шрёдингера. Условие конечности нормы требует зануления сингулярного решения, т. е. выбора $c_2=0$. Т. о., при $r\to 0$

$$\psi\sim r^l. \qquad (78)$$

Если энергия системы больше, чем значение $V(r)$ при $r\to\infty$ ($\mathcal{E}>V_\infty$), то решение ур-ния Шрёдингера на больших расстояниях должно иметь вид:

$$u_{\mathcal{E},\,l}\sim c_3e^{ikr}+c_4e^{-ikr},\quad k^2=2\mu(\mathcal{E}-V_\infty)/\hbar^2.$$

При этом (как и в одномерном случае отражения от потенц. стенки) поток в расходящейся от центра сферич. волне (e^{ikr}) должен быть равен потоку в сходящейся волне (e^{-ikr}), т. е. $|c_3|=|c_4|$. Исходя из этого, решение при $r\to\infty$ записывают в виде:

$$u_{\mathcal{E},\,l}(r)\sim\sin\left(kr-\frac{\pi l}{2}+\delta_l\right), \qquad (79)$$

где δ_l — т. н. ф а з а р а с с е я н и я, равная нулю для свободного движения (она используется для нахождения *амплитуды рассеяния*). Решение (79) не накладывает к.-л. ограничений на энергию системы. Поэтому при $\mathcal{E}\geqslant V_\infty$ энергетич. спектр непрерывный, а решения описывают несвязанные состояния инфинитного движения. Если в $V_{\text{эфф}}$ существует потенц. яма, такая, что $V_{\min}<V_\infty$, то для энергий $\mathcal{E}$ в интервале $V_{\min}<\mathcal{E}<V_\infty$ решение ур-ния Шрёдингера при $r\to\infty$ имеет вид:

$$u_{\mathcal{E},\,l}\sim c_3e^{-\varkappa r}+c_4e^{\varkappa r},\quad \varkappa^2=2m(V_\infty-\mathcal{E})/\hbar^2. \qquad (80)$$

Коэф. c_3, c_4 при двух линейно независимых решениях в (80) должны линейно выражаться через c_1, c_2 из (77) по ф-лам (70). Если для произвольной энергии из рассматриваемого интервала потребовать ограниченности решения в нуле, т. е. положить $c_2=0$, то коэф. c_4 при растущем на бесконечности решении, равный $c_4=\alpha_{21}(\mathcal{E})c_1$, будет, вообще говоря, отличен от нуля. Это означает, что при произвольной энергии $\mathcal{E}<V_\infty$ может не существовать физически приемлемого решения. Возможные энергии физ. состояний определяются ур-нием $\alpha_{21}(\mathcal{E})=0$ и образуют дискретный спектр. Они отвечают связанным состояниям. Т. о., условия ограниченности решения на границах области изменения радиальной переменной ($r=0$ и $r=\infty$) играют роль краевых условий, приводящих (как и в одномерном случае) к дискретному спектру энергий. Дискретные уровни в радиальном ур-нии Шрёдингера (76) нумеруются радиальным квантовым числом n_r, начиная с основного ($n_r=0$). Поскольку $V_{\text{эфф}}$ зависит от l, энергия уровня определяется двумя квантовыми числами n_r и l. Число m наз. м а г н и т н ы м к в а н т о в ы м ч и с л о м и при данном l может принимать $(2l+1)$ значений: 0, ± 1, ± 2, . . ., $\pm l$; m не входит в ур-ние (76), и энергия от него не зависит (т. к. m зависит от выбора оси z, а поле сферически симметрично). Поэтому уровень с квантовым числом l имеет $(2l+1)$-кратное вырождение. Энергия уровня начинает зависеть от m лишь тогда, когда сферич. симметрия нарушается, напр. при помещении системы в магн. поле (*Зеемана эффект*). Для нек-рых видов $V(r)$ [напр., кулоновской: $V=-Ze^2/r$, или изотропного трёхмерного осциллятора: $V=(\mu\omega^2/2)(x^2+y^2+z^2)$] существует дополнит. (т. н. с л у ч а й н о е) вырождение уровней энергии, обусловленное скрытой симметрией этих $V(r)$. Так, энергия водородоподобных атомов зависит от величи-