

Измеряемых констант для одной молекулы обычно значительно меньше, чем коэф. ряда (\*). Поэтому для определения всех коэф. используются спектроскопич. константы изотопич. разновидностей данной молекулы. Для этого в (\*) переходят к внутр. нелинейным координатам, не зависящим от масс атомов, в к-рых коэф. ряда (\*) также не зависит от масс атомов.

Для координат, по к-рым осуществляется тунелирование между разл. равновесными конфигурациями, ряд (\*) неприменим; он неприменим также для колебаний с большой амплитудой вблизи равновесной конфигурации. В этих случаях используются модельные П. п. При изучении хим. реакций и задач рассеяния применяются П. п. основного и возбуждённых состояний.

Лит. см. при ст. Молекула, Молекулярные спектры.

М. Р. Алиев.

**ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ** — часть энергии механич. системы, находящейся в нек-ром силовом поле, зависящая от положения точек (частиц) системы в этом поле, т. е. от их координат  $x_k, y_k, z_k$  или от обобщённых координат системы  $q_i$ . Численно П. э. системы в данном её положении равна той работе, к-рую произведут действующие на систему силы поля при перемещении системы из этого положения в то, где П. э. условно принимается равной нулю (нулевое положение). Из определения следует, что понятие П. э. имеет место только для системы, находящейся в потенциальном силовом поле, в к-ром работа действующих на систему сил поля зависит только от начального и конечного положений системы и не зависит от закона движения точек системы, в частности от вида их траекторий. Напр., для механич. системы, находящейся в однородном поле тяжести, если ось  $z$  направлена вертикально вверх, П. э.  $\Pi = mgz_c$ , где  $m$  — масса системы,  $g$  — ускорение силы тяжести,  $z_c$  — координата центра масс (нулевое положение  $z_c = 0$ ); для двух частиц с массами  $m_1$  и  $m_2$ , притягивающихся друг к другу по всемирного тяготения закону,  $\Pi = -Gm_1m_2/r$ , где  $G$  — гравитационная постоянная,  $r = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$  — расстояние между частицами (нулевое положение  $r = \infty$ ). Аналогично определяется П. э. двух точечных зарядов  $e_1$  и  $e_2$ .

С силовой ф-цией  $U(\dots, x_k, y_k, z_k, \dots)$  П. э. связана соотношением

$$\Pi(\dots, x_k, y_k, z_k, \dots) = -U(\dots, x_k, y_k, z_k, \dots).$$

Следовательно, П. э. и определяет данное потенциальное силовое поле. Значение силы в любой точке поля равно градиенту П. э., взятому со знаком минус; поверхности  $\Pi = \text{const}$  являются поверхностями уровня. Работа сил поля при перемещении системы из положения, где П. э. равна  $\Pi_1$ , в положение, где П. э. равна  $\Pi_2$ , будет  $A_{12} = \Pi_1 - \Pi_2$ .

Для системы материальных точек полная энергия (Гамильтона функция) есть сумма кинетической и П. э. Вообще говоря, это разбиение неоднозначно, но обычно полагают, что П. э. — это часть суммы, зависящая только от координат. Для систем, не имеющих непосредств. механич. аналога, П. э. — это слагаемое в выражении для полной энергии системы, зависящее только от обобщённых координат. Напр., для плотности энергии эл.-магн. поля в вакууме  $(E^2 + H^2)/8\pi$  член  $H^2/8\pi$ , не зависящий от обобщённых импульсов  $E$ , играет роль П. э.

В квантовой теории ф-ция Гамильтона становится оператором Гамильтона (гамильтонианом). Его часть  $U(\hat{q})$ , зависящая только от координат (операторов)  $\hat{q}$ , интерпретируется как оператор П. э. Реализация оператора П. э. зависит от выбора представления; в координатном представлении — это просто оператор умножения на числовую ф-цию  $U(q)$ . В др. представлениях вид оператора П. э. может быть более сложным: напр., в импульсном представлении — это дифференц. оператор  $U(\partial/\partial p)$ .

В. П. Павлов.

**ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА** — короткодействующий потенциал взаимодействия частиц, отвечающий их притяжению. Термин «П. я.» происходит от вида графика, изображающего зависимость потенц. энергии  $U$  частицы в силовом поле от её положения в пространстве (в случае одномерного движения — от координаты  $x$ ). Характеристики П. я. являются её ширина  $a$  (расстояние, на к-ром проявляется действие сил притяжения) и глубина  $U_0$ , равная разности между значением потенц. энергии на бесконечно большом расстоянии (обычно принимаемым за нуль) и её мин. значением внутри ямы (рис. 1). Примером П. я. может служить

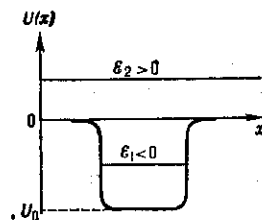
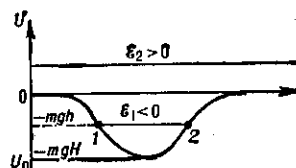


Рис. 1. Схематическое изображение потенциальной ямы  $U(x)$  ( $E$  — полная энергия частицы).

потенциал притяжения между протоном и нейтроном, экспоненциально убывающий с увеличением расстояния между ними.

В классич. механике частица с энергией  $E < 0$  не сможет вылететь из П. я. и будет всё время двигаться в огранич. области пространства внутри ямы (между двумя классич. точками остановки  $U_0 = E$ ). Положение частицы на «дне» ямы отвечает устойчивому равновесию и соответствует нулевой кинетич. энергии частицы. Если  $E > 0$ , то частица преодолевает действие сил притяжения и свободно покидает яму. Пример — движение упругого шарика, находящегося в поле сил земного притяжения, в обычной яме с жёсткими пологими стенками (рис. 2).

Рис. 2. Шарик массы  $m$  с энергией  $E_1 < 0$  не может покинуть яму глубиной  $U_0 = -mgH$  ( $g$  — ускорение свободного падения,  $H$  — высота обычной ямы, в которую попал шарик) и будет совершать колебания между точками 1 и 2 (если пренебречь трением), поднимаясь лишь до высоты  $h = H - |E_1|/mg$  над дном потенциальной ямы. Если энергия шарика  $E_2 > 0$ , то он покинет яму и уйдёт на бесконечность с постоянной скоростью  $v$ , определяемой из соотношения  $mv^2/2 = E_2$ .



В квантовой механике, в отличие от классической, энергия частицы, находящейся в связанном состоянии в П. я., может принимать лишь определённые дискретные значения, т. е. существуют дискретные уровни энергии. Однако дискретность уровней становится заметной лишь для систем, имеющих микроскопич. размеры и массы. По порядку величины расстояние  $\Delta E$  между уровнями для частицы массы  $m$  в «глубокой» яме шириной  $a$  определяется величиной  $\Delta E \sim \hbar^2/ma^2$ . Наивысший (основной) уровень энергии лежит выше «дна» П. я. (см. Нулевая энергия). В П. я. малой глубины ( $U_0 \lesssim \hbar^2/ma^2$ ), имеющей вид, изображённый на рис. 3, связанное состояние может вообще отсутствовать. Так, протон и нейтрон с антипараллельными спинами не образуют связанной системы, несмотря на существование сил притяжения между ними. Аналогичным образом не существует связанного состояния двух нейтронов — бинейтрона. В то же время при взаимодействии нейтрона и протона с параллельными спинами параметры П. я. допускают существование одного слабо связанного состояния — дейтрона.

Для случая одномерной П. я. (в отсутствие сил отталкивания) всегда существует по крайней мере одно связанное состояние. Аналогичная ситуация имеет