ЛЕКЦИЯ №21

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА И ЕГО РЕШЕНИЯ

ВРЕМЕННÓЕ И СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

В квантовой механике возникает важнейшая проблема об отыскании такого уравнения, которое явилось бы тем же, чем являются уравнения движения Ньютона для классической механики. Как известно, уравнения Ньютона позволяют для макроскопических тел решать основную задачу механики — по заданным силам, действующим на тело (или систему тел), и определенным начальным условиям (начальным значениям координат и скорости тела) найти для любого момента времени координаты тела и его скорость, т. е. описать движение тела в пространстве и во времени. При постановке аналогичной задачи в квантовой механике нужно сразу же учесть, что для частиц микромира характерна двойственная природа, которая ограничивает возможность применения к таким частицам классических понятий о координате и скорости (или импульсе). Вероятностное (статистическое) истолкование волн де Бройля и соотношения неопределенностей указывают, что уравнение движения в квантовой механике должно быть таким, чтобы оно позволяло объяснить наблюдаемые на опыте волновые свойства частиц. Поскольку положение частицы в пространстве в данный момент времени определяется в квантовой механике заданием волновой функции Ψ *(x, y, z, t),* точнее величиной $|\Psi|^2$, определяющей лишь вероятность нахождения частицы в точке *x, y, z* в момент *t*, основное уравнение квантовой механики должно быть уравнением относительно функции Ψ *(x, y, z, t)*. Далее, это уравнение должно быть **волновым уравнением,** ибо из него должны получить свое объяснение эксперименты по дифракции микрочастиц, указывающие на их волновую природу.

Основное уравнение нерелятивистской квантовой механики было найдено в 1926 г. Эрвином Шредингером. Как и уравнения движения Ньютона, лежащие в основе классической механики и поэтому не выводимые, уравнение Шредингера постулируется. Справедливость уравнения Шредингера доказывается тем, что выводы квантовой механики, полученные с помощью этого уравнения в атомной и ядерной физике, находятся в хорошем согласии с опытом. Уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi+U(x,y,z,t)\cdot\Psi\,. \qquad (21.1)$$

Здесь $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}$ *Дж· сек* - постоянная Планка; *m* - масса частицы; *U (x, y, z, t)* - потенциальная энергия частицы в силовом поле, где частица движется; $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ оператор Лапласа, $\Psi = \Psi$ *(x, y, x, t)* — искомая волновая функция частицы; $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица.

Уравнение (21.1) справедливо для любой частицы, движущейся со скоростью v<<c (c — скорость света в вакууме). В релятивистской области при v ≈ c уравнение Шредингера заменяется более сложным релятивистским уравнением Дирака, рассмотрение которого выходит за рамки нашего курса. Уравнение Шредингера дополняется важными условиями, которые накладываются на функцию Ψ *(x, y, z, t)*. Этих условий три:

$$\left.\begin{array}{l} \text{1) функция } \Psi \text{ должна быть конечной, непрерывной и однозначной;} \\ \text{2) производные } \dfrac{\partial\Psi}{\partial x}, \dfrac{\partial\Psi}{\partial y}, \dfrac{\partial\Psi}{\partial z}, \dfrac{\partial\Psi}{\partial t} \text{ должны быть непрерывны;} \\ \text{3) функция } |\Psi|^2 \text{ должна быть интегрируема, т. е.} \\ \text{интеграл } \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dx\, dy\, dz \text{ должен быть конечным.} \end{array}\right\} \qquad (21.2)$$

В простейших случаях третье условие сводится к условию нормировки вероятностей. Первые два из указанных условий не представляют собой чего-либо особенного. Это обычные требования, накладываемые на искомое решение дифференциального уравнения. Третье условие относительно интегрируемости $|\Psi|^2$ связано с тем, что физический смысл имеет, как уже подчеркивалось, не сама функция Ψ, а квадрат ее модуля $|\Psi|^2$. Важность условий (21.2) заключается в том, что, как мы увидим дальше, с их помощью, не решая уравнения Шредингера, а лишь исследуя возможные его решения, можно высказать ряд очень существенных заключений об энергии исследуемой частицы и других физических величинах, ее характеризующих.

Шредингер предложил вид функций, удовлетворяющих уравнению (21.1):

$$\Psi_\omega(r,t) = \Psi_o e^{i(\omega t - (\vec{k}\cdot\vec{r}))},$$

$$\Psi_E(r,t) = \Psi_o e^{\frac{i}{\hbar}(Et - (\vec{p}\cdot\vec{r}))},$$

ω - круговая частота, k - волновое число, E – энергия частицы, p – её импульс.

Уравнение (21.1) часто называют **временным уравнением Шредингера,** ибо оно содержит производную от функции Ψ по времени. Однако для большого числа физических явлений, происходящих в микромире, например для описания поведения электрона в атоме, в ряде случаев важно уметь находить **стационарные решения** уравнения Шредингера, не содержащие времени. Для решения этой задачи нужно получить так называемое стационарное уравнение Шредингера, в котором исключена зависимость Ψ от времени. Оно имеет смысл для тех задач, в которых потенциальная энергия *U* не зависит от времени: *U = U (x, y, z)*. Будем искать решение уравнения (21.1) в виде произведения двух функций:

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z)\cdot\varphi(t), \qquad (21.3)$$

в котором разделены переменные: ψ является функцией только координат, φ - функцией только времени. Подставляя (21.3) в (21.1) и производя дифференцирование, получаем

$$-\frac{\hbar}{i}\psi\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi\Delta\psi+U(x,y,z)\cdot\psi\varphi..$$

Разделим правую и левую части уравнения на произведение ψ·φ:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\psi}\Delta\psi-U(x,y,z)=\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{1}{\varphi}\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial t}. \qquad (21.4)$$

Поскольку левая часть уравнения есть функция только координат, а правая - функция только времени, уравнение (21.4) удовлетворяется при единственном условии - обе части равны постоянной величине. Обозначим ее через *(-W):*

$$\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{1}{\varphi}\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-W, \qquad (21.5)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\psi}\Delta\psi-U(x,y,z)=-W. \qquad (21.6)$$

Уравнение (21.6) обычно записывают в форме

$$\Delta\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(W-U\right)\cdot\psi=0 \qquad (21.7)$$

и называют **стационарным уравнением Шредингера.** Разность *(W – U)* имеет смысл кинетической энергии частицы, а *W* – её полной энергии.

Уравнение (21.7) является важнейшим соотношением нерелятивистской квантовой механики, играющим основную роль в атомной физике. Функции ψ, удовлетворяющие уравнению Шредингера при данном значении *U,* называются **собственными функциями.** Значения *W,* при которых существуют решения уравнения Шредингера (21.7), называются **собственными значениями.** Примеры отыскания собственных функций и собственных значений будут рассмотрены в следующих параграфах.

Частица в одномерной прямоугольной «потенциальной яма» с бесконечно высокими «стенками»

Проведем качественный анализ решений уравнения Шредингера применительно к частице в одномерной прямоугольной «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками». Такая «яма» описывается потенциальной энергией вида (для простоты принимаем, что частица движется вдоль оси x)

$$U(x) = \begin{cases} \infty, \ x < 0, \\ 0, \ 0 \le x \le \ell, \\ \infty, \ x > \ell, \end{cases}$$

где $\ell -$ ширина «ямы», а энергия отсчитывается от ее дна (рис. 21.1).

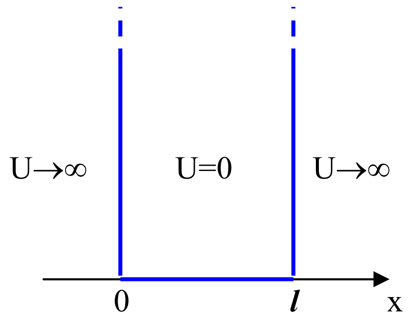

Рис.21.1. Потенциальная яма.

Уравнение Шредингера (21.7) для стационарных состояний в случае одномерной задачи запишется в виде

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(W - U)\cdot\psi = 0\,. \qquad (21.8)$$

По условию задачи (бесконечно высокие «стенки»), частица не проникает за пределы «ямы», поэтому вероятность ее обнаружения, а, следовательно, и волновая функция за пределами «ямы» равна нулю. На границах «ямы» (при x = 0 и x = ***l***) непрерывная волновая функция также должна обращаться в нуль. Следовательно, граничные условия в данном случае имеют вид

$$\psi(0) = \psi(\ell) = 0. \qquad (21.9)$$

В пределах «ямы» ($0 \le x \le \boldsymbol{l}$) уравнение Шредингера (21.8) сведется к уравнению

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} W\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad W \equiv E_{\text{кин}} \equiv E$$

или

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0, \qquad (21.10)$$

где $$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}. \qquad (21.11)$$

Общее решение дифференциального уравнения (21.10):

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx.$$

Так как по (21.9) $\psi(0)=0$, то $B = 0$. Тогда

$$\psi(x) = A \cdot \sin kx. \qquad (21.12)$$

Условие (21.9) $\psi(\boldsymbol{l}) = A \sin kl = 0$ выполняется только при $k\boldsymbol{l} = n\pi$, где n - целые числа, т. е. необходимо, чтобы

$$k = \frac{n\pi}{\ell}. \qquad (21.13)$$

Из выражений (21.11) и (21.13) следует, что

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2} \qquad (n = 1,2,3, \ldots), \qquad (21.14)$$

т. е. стационарное уравнение Шредингера, описывающее движение частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками», удовлетворяется только при собственных значениях E_n, зависящих от целого числа n. Следовательно, энергия E_n частицы в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» принимает лишь **определение дискретные значения**, т. е. **квантуется.** Квантованные значения энергии E_n называются **уровнями энергии** а число n, определяющее энергетические уровни частицы, называется **главным квантовым числом**. Таким образом, микрочастица в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» может находиться только на определенном энергетическом уровне E_n, или, как говорят, частица находится в квантовом состоянии n.

Подставив в (21.12) значение k из (21.13), найдем собственные функции:

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{\ell}x.$$

Постоянную интегрирования *A* найдем из условия нормировки, которое для данного случая запишется в виде

$$A^2\int_0^{\ell}\sin^2\frac{n\pi}{\ell}\cdot x\cdot dx = 1.$$

В результате интегрирования получим $A = \sqrt{\dfrac{2}{\ell}}$, а собственные функции будут иметь вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\ell}}\cdot\sin\frac{n\pi}{\ell}\cdot x \qquad (n = 1,2,3,\ \ldots). \qquad (21.15)$$

Графики собственных функций (21.15), соответствующие уровням энергии (21.14) при n = 1, 2, 3, приведены на рис. 21.2,а. На рис. 21.2,б изображена плотность вероятности обнаружения частицы на различных расстояниях от «стенок» ямы, равная $|\psi_n(x)|^2 = \psi_n(x)\cdot\psi^*{}_n(x)$ для n = 1,2 и 3. Из рисунка следует, что, например, в квантовом состоянии с n = 2 частица не может находиться в середине «ямы», в то время как одинаково часто может пребывать в ее левой и правой частях. Такое поведение частицы указывает на то, что представления о траекториях частицы в квантовой механике несостоятельны.

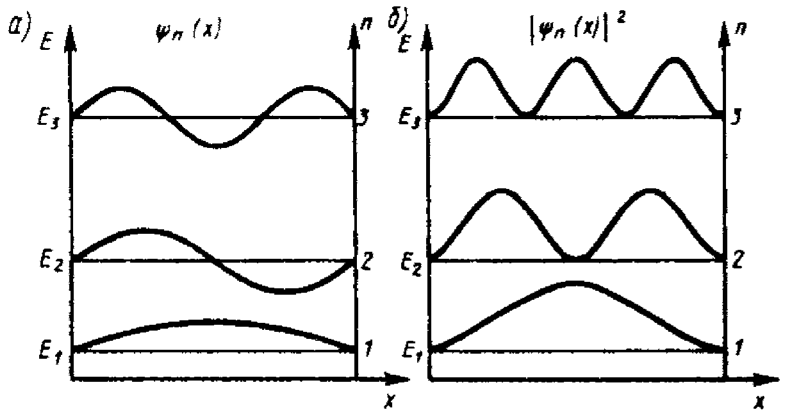

Рис.21.2. Некоторые решения уравнения Шредингера.

Из выражения (21.14) вытекает, что энергетический интервал между двумя соседними уровнями равен

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}(2n+1) \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}\cdot n. \qquad (21.16)$$

Например, для электрона при размерах ямы ***l*** =10 $^{-1}$ м (свободные электроны в металле) $\Delta E_n = 10^{-35}n$ Дж $\approx 10^{-16}$ эВ, т. е. энергетические уровни расположены столь тесно, что спектр практически можно считать непрерывным. Если же размеры ямы соизмеримы с атомными (***l*** $\approx 10^{-10}$ м), то для электрона $\Delta E_n = 10^{-17}n$ Дж $\approx 10^2 n$ эВ, т. е. получаются явно дискретные значения энергии (линейчатый спектр). Таким образом, применение уравнения Шредингера к частице в «потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» приводит к квантованным значениям энергии, в то время как классическая механика на энергию этой частицы никаких ограничений не накладывает.

Кроме того, квантово-механическое рассмотрение данной задачи приводит к выводу, что частица «в потенциальной яме» с бесконечно высокими «стенками» не может иметь энергию меньшую, чем минимальная энергия, равная $\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\ell^2}$. Наличие отличной от нуля минимальной энергии не случайно и вытекает из соотношения неопределенностей. Неопределенность координаты Δx частицы в «яме» шириной ***l*** равна Δx = ***l***. Тогда, согласно соотношению неопределенностей, импульс не может иметь точное, в данном случае нулевое, значение. Неопределенность импульса $\Delta p \approx \frac{h}{\ell}$. Такому разбросу значений импульса соответствует кинетическая энергия $E_{min} \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\ell^2}$. Все остальные уровни (n>1) имеют энергию, превышающую это минимальное значение.

Кроме того, если вспомнить, что $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ - волновое число, причем λ - длина волны де Бройля, то мы получим условия устойчивого существования частицы в данном потенциальном ящике без обмена энергией

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{L} \Rightarrow L = n \cdot \frac{\lambda}{2}.$$

Таким образом, частица устойчиво существует, если образует стоячую волну де Бройля, т.е., если на дне потенциального ящика укладывается целое число полуволн де Бройля.

Из формул (21.16) и (21.14) следует, что при больших квантовых числах (n>>1) $\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n} << 1$, т. е. соседние уровни расположены тесно: тем теснее, чем больше *n*. Если *n* очень велико, то можно говорить о практически непрерывной последовательности уровней и характерная особенность квантовых процессов - дискретность -

сглаживается. Этот результат является частным случаем **принципа соответствия Бора** (1923), согласно которому законы квантовой механики должны при больших значениях квантовых чисел переходить в законы классической физики.

Более **общая трактовка принципа соответствия,** имеющего огромную роль в современной физике, заключается в следующем: всякая новая, более общая теория, являющаяся развитием классической, не отвергает ее полностью, а включает в себя классическую теорию, указывая границы ее применения, причем в определенных предельных случаях новая теория переходят в старую. Так, формулы кинематики и динамики специальной теории относительности переходят при v<<c в формулы механики Ньютона. Например, хотя гипотеза де Бройля приписывает волновые свойства всем телам, но в тех случаях, когда мы имеем дело с макроскопическими телами, их волновыми свойствами можно пренебречь, т. е. применять классическую механику Ньютона.

Прохождение частицы сквозь потенциальный барьер. Туннельный эффект

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы высотой U_o (рис. 21.3) для одномерного (по оси x) движения частицы. Для потенциального барьера прямоугольной формы высоты *U* и записать

$$U(x) = \begin{cases} 0,\ x < 0 \quad (\text{для области 1}), \\ U_o,\ 0 \le x \le \ell \quad (\text{для области 2}), \\ 0,\ x > 1 \quad (\text{для области 3}). \end{cases}$$

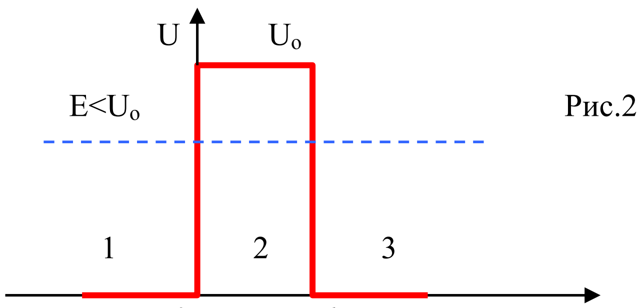

Рис.21.3. Потенциальный барьер.

При данных условиях задачи классическая частица, обладая энергией *E,* либо беспрепятственно пройдет над барьером (при $E> U_o$), либо отразится от него (при $E< U_o$) и будет двигаться в обратную сторону, т. е. она не может проникнуть сквозь барьер. Для микрочастицы же, даже при $E>U_o$, имеется отличная от нуля вероятность, что частица отразится от барьера и будет двигаться в обратную сторону. При $E<U_o$ имеется также отличная от нуля вероятность, что частица окажется в области $x>l$. т. е. проникает сквозь барьер. Подобные, казалось бы, парадоксальные выводы следуют непосредственно из решения уравнения Шредингера, описывающего движение микрочастицы при условиях данной задачи.

Оценим вероятность обнаружения частицы *за потенциальным барьером, в свободном состоянии.* Для описания частицы в свободном состоянии применяется ψ - функция вида

$$\psi(x) = e^{ikx}. \qquad (21.17)$$

Функция (21.17) получается из одномерной функции Шредингера

$$\Psi(x,t) = A \cdot e^{-i(\omega t - kx)},$$

в котором для простоты принято A = 1 и t = 0, т.е. отсчет времени начинается от момента, когда частица проникнет за барьер, конкретный момент времени, когда это произойдет, не важен. (Вообще $\psi(x) = e^{ikx}$ - периодическая функция, уравнение гармонических колебаний $\zeta = \cos x - i \cdot \sin x$).

Тогда

$\Psi \cdot \Psi^* = w(x)$ – плотность вероятности события – нахождения частицы в данном интервале координат $x > l$.

В качестве конкретного примера рассмотрим движение частицы массой m в отсутствие внешних электрических полей.

Тогда в формуле (21.17)

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \text{ где } \lambda = \frac{h}{mv} = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{2\pi\hbar}{p}.$$

В нерелятивистском случае $p = \sqrt{2mE_K}$ и $E_K = W - U(x)$, где E_K – кинетическая энергия частицы, $U(x)$ – её потенциальная энергия в точке с координатой *x*, W – полная энергия частицы.

Тогда

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m(W - U(x))}}; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(W - U(x))}. \qquad (21.18)$$

Введем теперь в выражение (21.18) вместо U(x) конкретное значение U_o – высоту барьера. Поскольку $U_o > E$, то разность $(E - U_o)$ отрицательна, чтобы можно было оперировать с радикалом, преобразуем выражение для k, вынося из-под радикала величину $\sqrt{-1} = i$,

$$k = \frac{i}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - W)}.$$

Тогда Ψ - функция (21.17) приобретает вид

$$\Psi(x) = e^{i\cdot\frac{i}{\hbar}x\cdot\sqrt{2m(U_o - W)}} = \exp\left(-\frac{x}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - W)}\right). \qquad (21.19)$$

Поскольку мнимая единица i исчезла, то *Ψ - не периодическая функция*.

Чтобы определить плотность вероятности w(x>l) обнаружения частицы в области (x>l) необходимо найти w(x) = $\Psi\cdot\Psi^*$, где Ψ^* - сопряженная функция без мнимой части, т.к. Ψ - без неё. Должно было бы быть $\Psi^* = e^{-ikx}$, отбрасывая i, получаем

$$\Psi^* = e^{-kx} = e^{-\frac{x}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - W)}}.$$

Тогда плотность вероятности обнаружения частицы за барьером, при $x > l$, называемая ещё «коэффициентом прозрачности барьера D» оказывается равным

$$D = w(x) = \Psi\cdot\Psi^* = e^{-\frac{2x}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - W)}} = \exp\left(-\frac{2x}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - W)}\right) = \frac{1}{e^{\frac{2x}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - W)}}}. \qquad (21.20)$$

Таким образом, обнаружение частицы, у которой ни в один момент времени полная энергия не превышает высоту барьера, оказывается ненулевой.

Например, для электрона проводимости в металлах $U_o - W \approx 10^{-3}$ эВ = $1{,}6\cdot10^{-22}$ Дж. Глубина возможного проникновения за пределы металла x_o, на которой плотность вероятности обнаружения частицы убывает в e раз, составит

$$x_o = \frac{\hbar}{\sqrt{8m_e(U_o - W)}} = \frac{1{,}054\cdot10^{-34}\,\text{Дж}\cdot\text{с}}{\sqrt{8\cdot10^{-30}\,\text{кг}\cdot1{,}6\cdot10^{-22}\,\text{Дж}}} \approx 10^{-9}\,\text{м} = 10\,\text{Å}$$ ~ 3 параметра решетки.

Численное исследование зависимости (21.20) показывает, что увеличение ширины барьера (0 – l) в 2 раза уменьшает величину D в 100 раз. D уменьшается с ростом массы m частицы и разности ($U_o - W$).

Не имеет смысла в квантовой области из полной энергии W выделять E_K – кинетическую составляющую и $E_{пот}$ – потенциальную составляющую, так как точное знание о E_K означает точное знание импульса p, а точное знание $E_{пот}$ – точное значение координаты x (в одномерном случае). Последнее запрещено соотношением неопределенностей.

Туннельный эффект является специфическим квантовым эффектом. С классической точки зрения прохождение частицы сквозь потенциальный барьер при $W<U_o$ невозможно, так как частица, находясь внутри барьера, должна была бы обладать *отрицательной кинетической энергией.*

Туннельный эффект лежит в основе многих явлений в области физики твердого тела и полупроводниковой техники (например, явления в контактном слое на границе раздела двух полупроводников, на границе полупроводник-металл и т.п.). Есть даже так называемые быстродействующие туннельные диоды. В атомной и ядерной физике туннельный эффект служит для объяснения α - распада, протекание некоторых термоядерных реакций.

Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике

Линейный гармонический осциллятор - система, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы, - является моделью, используемой во многих задачах классической и квантовой теории. Пружинный, физический и математический маятники - примеры классических гармонических осцилляторов. Потенциальная энергия гармонического осциллятора равна

$$U = \frac{m\omega_o^2 x^2}{2}, \qquad (21.21)$$

где ω_o - собственная частота колебаний осциллятора, m — масса частицы. Зависимость (21.21) имеет вид параболы (рис. 21.5), т. е. «потенциальная яма» в данном случае является параболической.

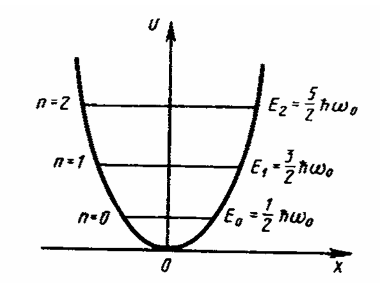

Рис. 21.5. Решение уравнения Шредингера для одномерного гармонического осциллятора.

Амплитуда малых колебаний классического осциллятора определяется его полной энергией *E*. В точках с координатами $\pm x_{max}$ полная энергия *E* равна потенциальной энергии. Поэтому с классической точки зрения частица не может выйти за пределы области ($-x_{max}$, $+x_{max}$). Такой выход означал бы, что ее потенциальная энергия больше полной, что абсурдно, так как приводит к выводу, что кинетическая энергия отрицательна. Таким образом, классический осциллятор в стационарном состоянии находится в «потенциальной яме» с координатами $-x_{max} \leq x \leq x_{max}$ «без права выхода» из нее.

Гармонический осциллятор в квантовой механике — **квантовый осциллятор** — описывается уравнением Шредингера (21.7), учитывающим выражение (21.21) для потенциальной энергии. Тогда стационарные состояния квантового осциллятора определяются уравнением Шредингера вида

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega_o^2 x^2}{2}\right) \cdot \psi = 0, \qquad (21.22)$$

где E — полная энергия осциллятора. В теории дифференциальных уравнений доказывается, что уравнение (21.22) решается только при собственных значениях энергии

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \qquad (21.23)$$

Формула (21.23) показывает, что энергия квантового осциллятора может иметь лишь **дискретные значения,** т. е. **квантуется.** Энергия ограничена снизу отличным от нуля, как и для прямоугольной «ямы» с бесконечно высокими «стенками», минимальным значением энергии $E_o = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Существование минимальной энергии, — она называется **энергией нулевых колебаний** — является типичной для квантовых систем и представляет собой прямое следствие соотношения неопределенностей.

Наличие нулевых колебаний означает, что частица не может находиться на дне «потенциальной ямы», причем этот вывод не зависит от ее формы. В самом деле, «падение на дно ямы» связано с обращением в нуль импульса частицы, а вместе с тем и его неопределенности. Тогда неопределенность координаты становится сколь угодно большой, что противоречит, в свою очередь, пребыванию частицы в «потенциальной яме».

Вывод о наличии энергии нулевых колебаний квантового осциллятора противоречит выводам классической теории, согласно которой наименьшая энергия, которую может иметь осциллятор, равна нулю (соответствует покоящейся в положении равновесия частице). Например, классическая физика приводит к выводу, что при T= 0К энергия колебательного движения атомов кристалла должна обращаться в нуль.