Мәселелер ҳәм олардың шешимлери

1-мәселе. Итималлықтың сақланыў нызамы

$\psi^*\psi d^3x$ аңлатпасы d^3x көлеминдеги бөлекшени табыўдың итималлығына тең етип алынатуғын

$$\int \psi^*\psi d^3x = 1 \tag{1.1}$$

нормировка шәртиниң итималлық бойынша интерпретациясы сақланыў нызамына сөзсиз алып келеди. Бул нызамды ҳәм классикалық көз-қарасларда турып алынған нәтийжелердиң мүмкин болған интерпретациясын табыңыз.

Шешими. Биз излеп атырған сақланыў нызамы

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\boldsymbol{s} = 0 \tag{1.2}$$

үзликсизлик теңлемеси түрине ийе болыўы керек. Бул аңлатпада

$$\rho = \psi^*\psi \tag{1.3}$$

арқалы итималлық тығызлығы, ал s арқалы итималлық тоғының тығызлығы белгиленген. ρ шамасы ψ ҳәм ψ* шамаларына қарата бисызықлы форма (билинейная форма) болғанлықтан (1.2)-теңлемени еки жағдайда да бир

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}) \tag{1.4}$$

гамильтонианға ийе еки Шредингер теңлемесиниң комбинациясының нәтийжесинде алыў мүмкин:

$$H\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}, \qquad H\psi^* = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}. \tag{1.5}$$

Солай етип

$$\psi^* H\psi - \psi H\psi^* = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\rho}{\partial t}$$

теңлемесин аламыз. (1.2)-аңлатпаға сәйкес бул қатнастың шеп тәрепи дивергенция түринде жазылыўы керек. Ҳақыйқатында да

$$\psi^* H\psi - \psi H\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m}\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*).$$

Сонлықтан s векторы ушын

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \tag{1.6}$$

аңлатпасын жаза аламыз.

Алынған нәтийжеге классикалық интерпретация бериў ушын төмендегидей таллаўларды өткеремиз.

Егер ρ шамасын да, s шамасын да m массаға көбейтсек, онда нәтийжеде биз массаның тығызлығы ρ_m ди ҳәм импульс тығызлығы $\boldsymbol{g}$ ны аламыз:

$$\rho_m = m\rho, \qquad \boldsymbol{g} = m\boldsymbol{s}. \tag{1.7}$$

Бундай жағдайда үзликсизлик теңлемесин массаның сақланыў нызамы сыпатында интерпретациялаў (түсиндириў) мүмкин. Тап усындай жоллар менен бөлекшениң заряды e ге көбейтип зарядтың тығызлығы ρ_e ге ҳәм электр тоғының тығызлығы j ге келемиз:

$$\rho_e = e\rho, \qquad \boldsymbol{j} = e\boldsymbol{s}. \tag{1.8}$$

Ал (1.2)-теңлеме зарядтың сақланыў нызамына айланады.

Массаның сақланыў нызамының ҳәм зарядтың сақланыў нызамына уқсас екенлиги дыққатқа ылайық. Себеби олардың екеўи де бир бөлекшениң конвекциялық тоғы менен байланыслы.

(1.6)-ҳәм (1.7)-аңлатпалардан алынған Шредингер майданының толық импульси ушын жазылған

$$\boldsymbol{p} = \int \boldsymbol{g}\, d^3x = \frac{\hbar}{2i}\int (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\, d^3x$$

аңлатпасын екинши қосылыўшыны бөлеклеп интеграллаўдың жәрдеминде

$$\boldsymbol{p} = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \psi\, d^3x \tag{1.9}$$

түрине алып келиўге болады. Бул ψ квантлық ҳалдағы $(\hbar/i)\nabla$ импульс операторының орташа мәнисине берилген анықлама менен сәйкес келеди (3-мәселеге қараңыз).

2-мәселе. Шредингердиң вариациялық принципи

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi = E\psi \tag{2.1}$$

Шредингер теңлемесин энергия ушын вариациялық принцип пенен алмастырыңыз.

Шешими. (2.1)-дифференциаллық теңлемениң қәлеген ψ шешими байланыс теңлемесин қанаатландырады (бул дискрет спектр ҳаллары ушын дурыс):

$$\int \psi^*\psi\, d^3x = 1. \tag{2.2}$$

Сонлықтан энергия ушын аңлатпа (2.1)-теңлемени ψ^* функциясына көбейтиў ҳәм буннан кейин барлық кеңислик бойынша интеграллаў жолы менен алынады:

$$E = \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi \right] d^3x. \tag{2.3}$$

Грин формуласын есапқа алып биринши ағзаны бөлеклерге бөлип интеграллаў

$$\int \psi^* \nabla^2 \psi d^3x = \oint \psi^* \nabla \psi df - \int (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi)\, d^3x \tag{2.4}$$

аңлатпасын береди. Егер ψ шешими үлкен *r* қашықлықларында

$$\psi \sim r^{-3/2-\varepsilon}, \qquad \varepsilon > 0$$

аңлатпасына салыстырғанда әстерек киширейетуғын болса ғана (2.2)-нормировкалаўшы интеграл бар болады. Бирақ бул шәрт орынланғанда шексиз қашықлатылған сфераның бети бойынша алынған (2.4) теги интеграл жоғалады. Сонлықтан (2.3)-аңлатпаны былайынша жаза аламыз

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) + \psi^* V(\boldsymbol{r}) \psi \right] d^3x. \tag{2.5}$$

Бул теңлик ψ ҳәм ψ* функцияларына қарата да, (2.2)-нормировка шәртине қарата да симметриялы. Сонлықтан биз оны тап сондай табыс пенен (2.1)-теңлемеге комплексли түйинлес болған

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V(\boldsymbol{r}) \psi^* = E \psi^* \tag{2.1a}$$

теңлемесинен де алған болар едик.

(2.1)- ҳәм (2.1а) теңлемелердиң (2.2) байланысы бар болған жағдайлар ушын (2.5)-интегралдың экстремумы ҳаққындағы вариациялық мәселе ушын Эйлер теңлемеси екенлигин көрсетиў қыйын емес. Бирақ биз вариациялық есаплаў аппаратынан пайдаланбаймыз, ал туўрыдан-туўры дәлиллеўди қолланамыз.

Мейли ψ_λ арқалы E_λ меншикли мәнисине тийисли (2.1)-диффtренциаллық теңлемениң шешими болсын. Бул теңлеме (2.5)-интегралға E_λ ниң мәнисин береди. Енди ψ_λ функциясын оған жақын болған $\psi_\lambda + \delta\psi$ функциясы менен алмастырамыз. Бул жерде $\delta\psi$ арқалы киши, бирақ ықтыярлы вариация белгиленген. Егер (2.2)-шәртти $\psi_\lambda + \delta\psi$ функциясы да ψ_λ функциясы қанаатландыратуғындай дәрежеде қанаатландырады деп есапламасақ, онда

$$\int (\psi_\lambda^* + \delta\psi^*)(\psi_\lambda + \delta\psi)\, d^3x = 1$$

ҳәм усыған сәйкес

$$\int (\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi)\, d^3x + \int (\delta\psi^* \delta\psi)\, d^3x = 0. \tag{2.6}$$

$\psi_\lambda + \delta\psi$ функциясын (2.5)-интегралға қойғаннан кейин энергия ушын $E_\lambda + \delta E_\lambda$ аңлатпасын аламыз. Бул жерде

$$\delta E_\lambda = \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\nabla \psi_\lambda^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + (\nabla \psi_\lambda) \cdot (\nabla \delta\psi^*) \right] + V (\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi) \right\} d^3x + \\ + \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \delta\psi^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + V \delta\psi^* \delta\psi \right] d^3x. \tag{2.7}$$

Бул аңлатпада биринши қатарда кишилиги бойынша биринши, ал екинши қатарда екинши тәртипли ағзалар жыйналған. Бурын бөлекке бөлип интеграллаўларды орынлаған едик. Енди де бөлеклерге бөлип, бирақ қарама-қарсы бағытта интегралласақ биз биринши қатарда $\delta\psi\nabla^2\psi_\lambda^*$ ҳәм $\delta\psi^*\nabla^2\psi_\lambda$ аңлатпаларына, ал буннан кейин туўындылардан қутылыў ушын (2.1)- ҳәм (2.1а)-теңлемелерден пайдаланыўымыз мүмкин. Усының нәтийжесинде

$$\int\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\psi_\lambda^*)\cdot(\nabla\delta\psi)+V\psi_\lambda^*\delta\psi\right]d^3x=E_\lambda\int\delta\psi\psi_\lambda^*d^3x$$

аңлатпасына ийе боламыз. Сонлықтан, егер (2.7)-теңликти есапқа алатуғын болсақ, онда (2.7)-қатнастың биринши қатары кишилиги бойынша екинши тәртипли үлес береди:

$$\delta E_\lambda=\int\left[\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\delta\psi|^2+(V-E_\lambda)|\delta\psi|^2\right]d^3x. \tag{2.8}$$

Бизде δψ ямаса δψ* бойынша сызықлы ағзалар қалмағанлықтан E_λ энергиясы Шредингер теңлемесиниң щешимлери болған ψ_λ лер ушын δψ = 0 болған жағдайда минимумға ямаса максимумға ийе болады. Экстремумның неден ибарат екенлиги – максимум бе ямаса минимум ба екенлиги (2.8)-аңлатпаның белгисинен ғәрезли болады.

Бул мәселени тереңирек түсиниў ушын (2.1)-теңлемениң шешимлериниң жыйнағы болған $\{\psi_\lambda\}$ функцияларынан пайдаланамыз ҳәм олардан функциялардың ортогоналлық системасын дүземиз:

$$\int\psi_\mu^*\psi_\nu d^3x=\delta_{\mu\nu}. \tag{2.9}$$

Енди функциялардың бул системасы бойынша δψ диң вариациясын жаямыз:

$$\delta\psi=\sum_\nu c_\nu\psi_\nu. \tag{2.10}$$

Бундай жағдайда (2.8)-теңлик

$$\delta E_\lambda=\sum_\mu\sum_\nu c_\mu^*c_\nu\int\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\psi_\mu^*)\cdot(\nabla\psi_\nu)+(V-E_\lambda)\psi_\mu^*\psi_\nu\right]d^3x=$$
$$=\sum_\mu\sum_\nu c_\mu^*c_\nu\int\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_\nu+(V-E_\lambda)\psi_\nu\right]\psi_\mu^*\,d^3x$$

түрине ямаса (2.9) бенен (2.1) ди есапқа алсақ

$$\delta E_\lambda=\sum_\mu|c_\mu|^2(E_\mu-E_\lambda) \tag{2.11}$$

түрине ийе болады. Егер E_λ энергиясы тийкарғы ҳалға тийисли болса, онда барлық ψ_μ ҳаллары ушын $E_\mu \geq E_\lambda$ ҳәм вариациялық принцип E_λ ушын минимумды береди. Себеби (2.11)-сумма оң мәниске ийе. Қозған ҳаллар ушын бундай улыўмалық қағыйданы келтирип шығарыўға болмайды. Себеби бундай жағдайда (2.11)-суммада оң мәнисли де, терис мәнисли де қосылыўшылар бар болады.

3-мәселе. Кеңисликлик орташалар ушын классикалық механика

Кеңисликлик орташалар (математикалық күтиўлер) ушын классикалық ньютонлық механиканың тийкарғы теңлемеси болған

$$\frac{dp}{dt} = \boldsymbol{F} \tag{3.1}$$

теңлемесиниң квантлық механиканда да орын алатуғынлығын көрсетиңиз. Бул формулаларда $\boldsymbol{p}$ импульсти, ал $\boldsymbol{F}$ күшти аңғартады.

Шешими: Мейли $\boldsymbol{F}$ күши потенциал $\boldsymbol{F} = -\nabla V$ потенциал арқалы аңлатылатуғын, ал $\boldsymbol{p}$ импульс $(\hbar/i)\,\nabla$ операторы менен алмастырылған болсын. Бизди қызықтыратуғын орташалар

$$\boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{i}\int \psi^*\nabla\psi d^3x, \tag{3.2}$$

$$\boldsymbol{F} = -\int \psi^*(\nabla V)\,\psi d^3x \tag{3.3}$$

теңликлериниң жәрдеминде анықланады. Бизиң алдымызда турған мәселе егер ψ ҳәм ψ* функциялары

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi, \tag{3.4}$$

$$+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*$$

Шредингер теңлемесин қанаатландыратуғын болса (3.2)- ҳәм (3.3)-интеграллардың (3.1)-теңлемени қанаатландыратуғынлығын анықлаўдан ибарат.

Дәлиллеўди биз (3.2)-аңлатпаны ўақыт бойынша дифференциаллаўдан баслаймыз:

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\int(\dot\psi^*\nabla\psi + \psi^*\nabla\dot\psi)\,d^3x = \frac{\hbar}{i}\int(\dot\psi^*\nabla\psi - \dot\psi\nabla\psi^*)\,d^3x. \tag{3.5}$$

Биз жоқарыда екинши қосылыўшыны бөлеклерге бөлип интегаллағанда пайда болатуғын бетлик интегралдың үлесиниң нолге тең екенлигин ҳәм сонлықтан оны қалдырып кетиўге болатуғынлығын есапқа алдық. Бул жерде (3.4)-теңлемелердиң жәрдеминде ψ ҳәм ψ* функцияларынан қутылып

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int[(\nabla^2\psi^*)(\nabla\psi) + (\nabla^2\psi)(\nabla\psi^*)]\,d^3x + \int(\psi^*V\nabla\psi + V\psi\nabla\psi^*)\,d^3x \tag{3.6}$$

аңлатпасын аламыз. Бөлеклерге бөлип интеграллаў

$$\int(\nabla^2\psi^*)(\nabla\psi)\,d^3x = -\int(\nabla\psi^*)(\nabla^2\psi)\,d^3x$$

(3.5)-интегралдағы еки қосылыўшының бир бири менен жыйысатуғынлығын көрсетеди. (3.5)-аңлатпадан ең кейинде қалған қосындыны бөлеклерге бөлип интеграллаўды қоллансақ

$$\boldsymbol{p} = \int \psi^* \left[V \nabla \psi - \nabla (V\psi) \right] d^3x$$

аңлатпасын аламыз. Ең ақырында

$$\nabla (V\psi) = V \nabla \psi + \psi \nabla V$$

формуласынан пайдаланып

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\int \psi^* (\nabla V) \psi \, d^3x = \boldsymbol{F}$$

теңлемесине келемиз. Биз буның дурыслығын дәлиллеўимиз керек еди.

4-мәселе. Қозғалыс муғдарының моменти ушын классикалық нызамлар

Кеңисликлик орташа мәнислер ушын қозғалыс муғдарының моменти $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ менен күш моменти $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F}$ арасындағы классикалық

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \boldsymbol{T} \tag{4.1}$$

байланысының квантлық механиканда да орын алатуғынлығын көрсетиңиз. Бул формулаларда $\boldsymbol{p}$ импульсти, ал $\boldsymbol{F}$ күшти аңғартады.

Шешими: Жоқарыдағы мәселедегидей кеңисликлик орташаларды анықлаўдан баслаймыз:

$$\boldsymbol{L} = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* (\boldsymbol{r} \times \nabla) \psi d^3x, \tag{4.2}$$

$$\boldsymbol{T} = -\int \psi^* (\boldsymbol{r} \times \nabla V) \psi d^3x. \tag{4.3}$$

Бул жағдайда да егер ψ ҳәм ψ* функциялары (3.4)-Шредингер теңлемесин қанаатландырады деп есаплаймыз.

Биз дәлиллеўди (4.2)-аңлатпаны ўақыт бойынша дифференциаллаўдан баслаймыз:

$$\dot{\boldsymbol{L}} = \frac{\hbar}{i} \int \left[\dot{\psi}^* (\boldsymbol{r} \times \nabla \psi) + \psi^* (\boldsymbol{r} \times \nabla \dot{\psi}) \right] d^3x.$$

Екинши қосылыўшыны

$$\psi^* \nabla \dot{\psi} = \nabla (\psi^* \dot{\psi}) - \dot{\psi} \nabla \psi^*$$

теңлигиниң жәрдеминде түрлендиремиз ҳәм бул теңликтиң оң тәрепиндеги биринши ағзаға буннан былай векторлық анализдиң төмендегидей улыўмалық формуласын пайдаланыўға болатуғынлығын есапқа аламыз:

$$\int \boldsymbol{r} \times \nabla f \, d^3x = 0. \tag{4.4}$$

Бул аңлатпада $f = \psi^* \psi$. Бул

$$\dot{\boldsymbol{L}}=\frac{\hbar}{i}\int \boldsymbol{r}\times(\dot{\psi}^{*}\nabla\psi-\dot{\psi}\nabla\psi^{*})\,d^{3}x$$

аңлатпасын береди. Енди (3.4)-теңлемелердиң жәрдеминде ψ ҳәм ψ^{*} функцияларынан қутылсақ мынаған ийе боламыз:

$$\dot{\boldsymbol{L}}=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\int \boldsymbol{r}\times[(\nabla^{2}\psi^{*})(\nabla\psi)+(\nabla^{2}\psi)(\nabla\psi^{*})]\,d^{3}x+ \\ +\int V\boldsymbol{r}\times(\psi^{*}\nabla\psi+\psi\nabla\psi^{*})\,d^{3}x. \qquad (4.5)$$

$(\nabla^{2}\psi^{*})(\nabla\psi)+(\nabla^{2}\psi)(\nabla\psi^{*})=\nabla[(\nabla\psi^{*})(\nabla\psi)]$ теңлиги орынлы болғанлықтан биринши интегралдың белгиси астындағы қаўсырманың ишиндеги аңлатпа $f=(\nabla\psi^{*})\cdot(\nabla\psi)$ скаляр функцияның градиенти болып табылады. Сонлықтан (4.4) ке сәйкес бул интеграл жоғалады. Екинши интеграл белгиси астындағы қаўсырма ишиндеги аңлатпа $\nabla(\psi^{*}\psi)$ ға тең Буннан кейин

$$V\nabla(\psi^{*}\psi)=\nabla(V\psi^{*}\psi)-\psi^{*}\psi\nabla V$$

теңлигин пайдаланып ҳәм (4.4)-формуланың жәрдеминен және пайдаланып екинши интегралды

$$\int \boldsymbol{r}\times[V\nabla(\psi^{*}\psi)]\,d^{3}x=-\int \boldsymbol{r}\times(\psi^{*}\psi\nabla V)\,d^{3}x$$

түрине алып келемиз Бул аңлатпа күш моментиниң орташа мәниси ушын жазылған (4.3)-аңлатпаға сәйкес келеди.

5-мәселе. Энергияның сақланыў нызамы

Мейли Шредингер толқын майданының энергиясы 2-мәселедеги (2.5)-интегралының жәрдеминде тәрийипленетуғын болсын. Бундай жағдайда энергияның сақланыў нызамы

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\operatorname{div}\boldsymbol{S}=0 \qquad (5.1)$$

түрине ийе болыўы керек. Бул аңлатпада W арқалы энергияның тығызлығы, ал S арқалы энергия ағысының тығызлығы белгиленген. Қолайлы болған S Умов-Пойнтинг векторын конструкциялап энергияның сақланыў нызамын келтирип шығарыңыз.

Шешими: (2.5)-теңлемеге сәйкес

$$E=\int W\,d^{3}x. \qquad (5.2)$$

Бул жерде

$$W=\frac{\hbar^{2}}{2m}(\nabla\psi^{*})(\nabla\psi)+\psi^{*}V\psi. \qquad (5.3)$$

Бул аңлатпадағы биринши ағза кинетикалық энергияның, ал екинши ағза потенциал энергияның тығызлығы. (5.1)-теңлемеге сәйкес бизге

$$\dot{W} = \frac{\hbar^2}{2m}\left[(\nabla\dot{\psi}^*)(\nabla\psi) + (\nabla\psi^*)(\nabla\dot{\psi})\right] + V(\dot{\psi}^*\psi + \psi^*\dot{\psi}) \qquad (5.4)$$

туўындысы керек.

$$(\nabla\dot{\psi}^*)(\nabla\psi) = \nabla(\dot{\psi}^*\nabla\psi) - \dot{\psi}^*\nabla^2\psi$$

ҳәм

$$(\nabla\psi^*)(\nabla\dot{\psi}) = \nabla(\dot{\psi}\nabla\psi^*) - \dot{\psi}\nabla^2\psi^*$$

болғанлықтан (5.4)-аңлатпаның кинетикалық энергия менен байланыслы болған бөлимин түрлендириўимиз ҳәм төмендегидей түрде жазыўымыз мүмкин

$$\dot{W} = \nabla\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\dot{\psi}^*\nabla\psi + \dot{\psi}\nabla\psi^*)\right] - \frac{\hbar^2}{2m}\dot{\psi}^*\nabla^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\dot{\psi}\nabla^2\psi^* + \dot{\psi}^*V\psi + \dot{\psi}V\psi^*. \qquad (5.5)$$

(3.4)-Шредингер теңлемеси бизге соңғы қосылыўшыдағы кеңисликлик туўындыларды ҳәм потенциалды ўақыт бойынша туўындылар менен алмастырыўға мүмкиншилик береди. Нәтийжеде алынған ағзалар бир бири менен жыйысады:

$$\dot{\psi}^*\left(-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}\right) + \dot{\psi}\left(\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}^*\right) = 0.$$

Сонлықтан (5.5)-теңлеме өзиниң формасы бойынша (5.1)-теңлеме менен бирдей, ал биз излеп атырған Умов-Пойнтинг векторы

$$S = -\frac{\hbar^2}{2m}(\dot{\psi}^*\nabla\psi + \dot{\psi}\nabla\psi^*) \qquad (5.6)$$

аңлатпасының жәрдеминде аңлатылады.

6-мәселе. Эрмитлик түйинлеслик

Ω операторы менен эрмитлик түйинлес Ω† операторы

$$\int(\Omega\psi)^*\varphi\,d\tau = \int\psi^*\Omega^\dagger\varphi\,d\tau \qquad (6.1)$$

теңлигиниң жәрдеминде анықланады. Бул теңликти функционаллық анализдиң белгилеўлери (символикасы) жәрдеминде былайынша жазыў мүмкин:

$$\langle\Omega\psi \mid \varphi\rangle = \langle\psi \mid \Omega^\dagger\varphi\rangle. \qquad (6.1б)$$

Бул аңлатпада ψ менен φ лер

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1, \ \langle\varphi|\varphi\rangle = 1 \qquad (6.2)$$

нормировка шәртлерине бағынатуғын ықтыярлы функциялар.

Бул анықламаны матрицалық көрсетиў тилинде келтирип шығарыңыз. $\Omega = \Omega^\dagger$ теңлиги менен анықланатуғын эрмитлик оператордың меншикли мәнислери ҳаққында не айта аласыз?

Шешими. Оператордың матрицалық көриниси $\{u_\nu\}$ ортонормировкаланған функциялардың толық жыйнағын сайлап алыў менен анықланады:

$$\langle u_\nu \mid u_\mu \rangle = \delta_{\mu\nu}. \tag{6.3}$$

Ықтыярлы нормировкаланған ψ ҳәм φ функциялары ушын

$$\psi = \sum_\nu a_\nu u_\nu, \qquad \varphi = \sum_\mu b_\mu u_\mu \tag{6.4}$$

түриндеги жайыўлар (қатарларға жайыўлар) орын алады. (6.4)-аңлатпаны (6.1)-анықламаға қойсақ

$$\sum_\mu \sum_\nu a_\nu^* b_\mu \langle \Omega u_\nu \mid u_\mu \rangle = \sum \sum a_\nu^* b_\mu \langle u_\nu \mid \Omega^\dagger \mid u_\mu \rangle$$

аңлатпасын аламыз. Теңлик ψ ҳәм φ функцияларының қәлеген жубы ушын орынлы деп болжаймыз. Соның ушын ҳәр бир қосылыўшы ушын өз алдына

$$\langle \Omega u_\nu \mid u_\mu \rangle = \langle u_\nu \mid \Omega^\dagger \mid u_\mu \rangle \tag{6.5}$$

теңлигиниң орынланыўы керек. Енди $\{u_\nu\}$ толық жыйнағын $\Omega^\dagger$ операторының матрицасын анықлаў ушын пайдаланамыз. буның ушын (6.5)-теңликтиң оң тәрепин былайынша түрлендиремиз:

$$\langle u_\nu \mid \Omega^\dagger \mid u_\mu \rangle = (\Omega^\dagger)_{\nu\mu}.$$

Шеп тәрепин болса, оны былайынша түрлендириў мүмкин:

$$\langle \Omega u_\nu \mid u_\mu \rangle = \int (\Omega u_\nu)^* u_\mu \, d\tau = \left[\int u_\mu^* (\Omega u_\nu) \, d\tau \right]^* = \langle u_\mu \mid \Omega \mid u_\nu \rangle^* = \Omega_{\mu\nu}^*.$$

Демек Ω ҳәм $\Omega^\dagger$ матрицаларының матрицалық элементлери (6.5)-аңлатпаға сәйкес

$$(\Omega^\dagger)_{\mu\nu} = \Omega_{\nu\mu}^* \tag{6.6}$$

қатнасы арқалы байланысқан болыўы керек. Басқаша айтқанда эрмитлик түйинлес $\Omega^\dagger$ матрицасының элементлери Ω матрицасының элементлеринен транспонирлеў $(\mu \rightleftarrows \nu)$ ҳәм комплексли түйинлеслеў операцияларының жәрдеминде алынады екен.

(6.6)-қатнастың жәрдеминде биз $\Omega^{\dagger\dagger} = \Omega$ теңлигин бирден алатуғынымызды атап өтемиз.

Ω эрмитлик (өзине өзи түйинлес) матрицасы ушын (анықлама бойынша $\Omega = \Omega^\dagger$) биз (6.6)-аңлатпаға сәйкес

$$\Omega_{\mu\nu} = \Omega_{\nu\mu}^* \tag{6.7}$$

екенлигине ийе боламыз. Диагоналлық $\mu = \nu$ матрицалық элементлери ҳақыйқый. Бундай тастыйықлаў функциялардың қәлеген ортонормировкаланған жыйнағы ушын дурыс (яғный гильберт кеңислигиндеги координаталар системасының қәлеген түрде сайлап алыныўы ушын орынлы). Мысалы $\{u_\nu\}$ жыйнағының жәрдеминде $\Omega_{\mu\nu}$ матрицасы диагоналлық түрге алып келинеди:

$$\Omega_{\mu\nu}=\omega_{\mu}\delta_{\mu\nu}. \tag{6.8}$$

ω_{μ} шамаларының мәниси Ω матрицаларының меншикли мәнислери еди, сонлықтан эрмитлик матрицаның меншикли мәнислери ҳақыйқый болып табылады.

Ескертиў: Ең кейинги нәтийжеге байланыслы барлық физикалық шамалардың операторлары (бақланатуғын шамалар) эрмитлик болып табылады.

7-мәселе. Эрмитлик операторды қурыў

Классикалық xp_x көбеймесине сәйкес келетуғын квантлық механикалық операторды қурыңыз (дүзиңиз).

Шешими.

а) x ҳәм p_x операторлары коммутацияланбайды ҳәм

$$p_x x - x p_x = \frac{\hbar}{i} \tag{7.1}$$

орын алмастырыў қатнасын қанаатландырады. Бул теңликтиң дурыслығын координаталық көринисте жеңил тексерип көриў мүмкин. Бул аңлатпада

$$p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}. \tag{7.2}$$

Сонлықтан xp_x классикалық көбеймесине

$$\Omega = (1-\alpha)\, x p_x + \alpha p_x x \tag{7.3}$$

түриндеги ҳәр бир оператор сәйкес келеди. Дәслеп α турақлысын ҳақыйқый деп есаплаймыз. Бул турақлыны қәлеген ψ квантлық ҳал ушын Ω шамасының орташа мәниси

$$\langle\Omega\rangle = \int \psi^{*}\Omega\psi\, d^{3}x = \text{ ҳақыйқый шама} \tag{7.4}$$

болатуғындай етип сайлап аламыз. p_x операторы ушын жазылған (7.2)-аңлатпаны пайдаланып (7.4)-теңликти жайылған түрде былайынша жазамыз:

$$\langle\Omega\rangle=\frac{\hbar}{i}\int\psi^{*}\left[(1-\alpha)\,x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\alpha\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right]d^{3}x=\frac{\hbar}{i}\int\psi^{*}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\alpha\psi\right)d^{3}x.$$

Енди ψ диң

$$\psi=f+ig$$

ҳақыйқый бөлимин жормал бөлегинен айырсақ төмендеги аңлатпаны аламыз:

$$\langle\Omega\rangle=\frac{\hbar}{i}\int\left[x\left(f\frac{\partial f}{\partial x}+g\frac{\partial g}{\partial x}\right)+\alpha\,(f^2+g^2)\right]d^3x+$$
$$+\hbar\int x\left(f\frac{\partial g}{\partial x}-g\frac{\partial f}{\partial x}\right)d^3x.$$

Бул аңлатпаның оң тәрепиндеги екинши интеграл ҳақыйқый. Ал биринши интеграл болса жормал ҳәм (7.4)-аңлатпаға сәйкес жоғалыўы керек. Соның менен бирге

$$\int(f^2+g^2)\,d^3x=1$$

ҳәм бул теңликти

$$\frac{1}{2}\int x\frac{\partial}{\partial x}(f^2+g^2)\,d^3x=-\alpha$$

теңлиги түринде жазыў мүмкин. Бул теңлик болса бөлеклерге бөлип интеграллағаннан кейин

$$\alpha=\frac{1}{2} \tag{7.5}$$

мәнисин береди.

Солай етип Ω операторының эрмитлигин тәмийинлеўши

$$\Omega=\frac{1}{2}(xp_x+p_xx) \tag{7.6}$$

симметриялық комбинациясы дурыс болады.

Егер комплексли α ға өтсек α шамасының

$$\alpha=\frac{1}{2}+i\beta \tag{7.7}$$

түриндеги қәлеген түри пайдаға асады. Бул аңлатпада β арқалы ықтыярлы ҳақыйқый сан белгиленген. Ҳақыйқатында бул жағдайда

$$\Omega=\frac{1}{2}(xp_x+p_xx)+i\beta(p_xx-xp_x) \tag{7.8}$$

ҳәм биз биринши қосылыўшының орташа мәнисиниң ҳақыйқый екенлигин, екиншисин орташалағанда болса (7.1)-орын алмастырыў қатнасының орын алыўына байланыслы квантлық ҳалдың сайлап алыныўынан ғәрезсиз турақлы $\beta\hbar$ үлесин беретуғынлығын көремиз. Демек бул қосылыўшы физикалық мәниске ийе емес. Сонлықтан оны есапқа алмаў керек.

б) Оператордың эрмитлигин тап сондай табыс пенен

$$\langle u\mid\Omega v\rangle=\langle\Omega u\mid v\rangle \tag{7.9a}$$

ямаса толығырақ

$$\int u^*\Omega v\,d^3x=\int(\Omega u)^*v\,d^3x \tag{7.9б}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықлаў мүмкин. Бул жерде u менен v арқалы комплексли ықтыярлы функциялар белгиленген. Бундай функцияларды сайлап алыў тек интеграллардың бар болыў шәрти менен шекленеди. (7.3)-оператор ушын ҳақыйқый α де бул

$$\frac{\hbar}{i}\int u^* \left[(1-\alpha)\, x\frac{\partial v}{\partial x} + \alpha\frac{\partial (xv)}{\partial x}\right] d^3x = \\ = -\frac{\hbar}{i}\int \left[(1-\alpha)\, x\frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha\frac{\partial (xu^*)}{\partial x}\right] v\, d^3x$$

ямаса

$$\int u^* \left(x\frac{\partial v}{\partial x} + \alpha v\right) d^3x = -\int \left(x\frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha u^*\right) v d^3x$$

аңлатпасын береди. Бул жерде қосылыўшылардың тәртибин өзгертип мынаны аламыз:

$$\int x\frac{\partial}{\partial x}(u^*v)\, d^3x = -2\alpha \int u^*v\, d^3x.$$

Шеп тәрепинде турған ағзадан бөлеклерге бөлип интеграл алсақ

$$-\int u^*v\, d^3x = -2\alpha \int u^*v\, d^3x$$

аңлатпасын табамыз. Бул бизиң ески (7.5) нәтийжемизди, яғный α = ½ ди береди.

8-мәселе. Операторды дифференциаллаў

Мейли $f(p,\ x)$ функциясы $p_k,\ x_k$ операторларының пүтин функциясы болсын. Коммутациялық қағыйдалардан

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = -[f,\ p_k], \tag{8.1}$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_k} = [f,\ x_k] \tag{8.2}$$

қатнасларының келип шығатуғынлығын көрсетиңиз. Бул аңлатпаларда қысқартыў мақсетинде

$$[f,\ g] = \frac{i}{\hbar}(fg - gf)$$

белгилеўи қолланылған.

Шешими: Каноникалық коммутациялық қағыйдалар

$$[p_k,\ p_l] = 0, \quad [x_k,\ x_l] = 0, \quad [p_k,\ x_l] = \delta_{kl} \tag{8.3}$$

формулалары менен бериледи. (8.1)- ҳәм (8.12)-аңлатпалардың дурыслығы төрт избе-из баскышқа бөлинеди.

1. Мейли $f=p_l$. Бул жағдайда $\partial f/\partial x_k=0$ ҳәм $\partial f/\partial p_k=\delta_{kl}$. Демек (8.1)- ҳәм (8.2)-қатнаслар

$$[p_k,\ p_l]=0, \quad [p_l,\ x_k]=\delta_{lk}$$

түрине енеди ҳәм сонлықтан (8.3)-формулаларға сәйкес келеди. Тап усындай жоллар менен олардың дурыслығы $f=x_l$, $\partial f/\partial x_k=\delta_{kl}$, $\partial f/\partial p_k=0$ болған жағдайлар ушын да көрсетиледи.

2. Мейли (8.1)- ҳәм (8.2)-қатнаслар f ҳәм g функциялары ушын да орынлы болсын. Бирақ сызықлылық қәсийетке ийе болғанлықтан олар c_1 ҳәм c_2 ықтыярлы комплексли коэффициентлерге ийе қәлеген c_1f+c_2g сызықлы комбинациясы ушын да дурыс болады.

3. f ҳәм g функциялары ушын орынлы болған (дурыс болған) бул қатнаслар fg көбеймеси ушын да дурыс болады. (8.1) жағдайында буны тиккелей өткерилген

$$\frac{\partial}{\partial x_k}(fg)=f\frac{\partial g}{\partial x_k}+\frac{\partial f}{\partial x_k}g=-\{f[g,\ p_k]+[f,\ p_k]g\}=$$
$$=-\frac{i}{\hbar}\{fgp_k-fp_kg+fp_kg-p_kfg\}=-[fg,\ p_k]$$

есаплаўларының жәрдеминде тексерип көриў мүмкин. Тап сол сыяқлы есаплаўларды (8.2)-қатнас жағдайы ушын да орынлаўға болады.

4. Жоқарыдағы 3-пунктте көрсетилген жағдайлардан биз қарап атырған қатнаслардың қәлеген сандағы p_k ҳәм x_k көбейтиўшилерине ийе ықтыярлы көбеймелердиң сызықлы комбинациясы ушын да дурыс. Бул жағдай олардың p_k ҳәм x_k өзгериўшилериниң қәлеген пүтин функциясы ушын да дурыс екенлигин көрсетеди. Бул жағдайды бизиң дәлиллеўимиз керек еди.

9-мәселе. Орташа мәнислердиң ўақыттың өтиўи менен өзгериўи

Мейли <*A*> арқалы ψ ҳалындағы *A* операторының ўақыттан ғәрезсиз болған орташа мәниси болсын. ψ ҳалы ўақыттың өтиўи менен өзгеретуғын болсын. <*A*> шамасының ўақыттың өтиўи менен қалайынша өзгеретуғынлығын анықлаңыз. Сиз $\langle x_k\rangle$ ҳәм $\langle p_k\rangle$ орташа мәнислериниң өзгерислери ҳаққында не айта аласыз?

Шешими.

$$\langle A\rangle=\langle\psi\,|\,A\,|\,\psi\rangle=\int\psi^*(t)\,A\psi(t)\,d\tau \qquad (9.1)$$

орташа мәнисиниң өзгериў тезлиги

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\int(\dot\psi^*A\psi+\psi^*A\dot\psi)\,d\tau \qquad (9.2)$$

шамасына тең. ψ ҳәм ψ* толқын функцияларының туўындылары Шредингер теңлемесине бағынады:

$$-\frac{\hbar}{i}\dot\psi=H\psi, \quad \frac{\hbar}{i}\dot\psi^*=H^\dagger\psi^*. \qquad (9.3)$$

Бул жерде *H* гамильтонианы эрмитлик оператор болып табылады. Сонлықтан $H = H^\dagger$.

(9.3)-аңлатпаны (9.2)-аңлатпаға қойып

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\int \left[(H^{\dagger}\psi^{*})\,A\psi - \psi^{*}AH\psi\right] d\tau$$

екенлигине ямаса функционаллық анализ белгилеўлеринде

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\left[\langle H\psi\,|\,A\psi\rangle - \langle\psi\,|\,AH\psi\rangle\right] \tag{9.4}$$

аңлатпасын аламыз. (9.4)-аңлатпаның биринши қосылыўшысын

$$\langle\Omega\psi\,|\,\varphi\rangle = \langle\psi\,|\,\Omega^{\dagger}\varphi\rangle$$

аңлатпасының жәрдеминде түрлендирип

$$\langle H\psi\,|\,A\psi\rangle = \langle\psi\,|\,H^{\dagger}A\psi\rangle = \langle\psi\,|\,HA\psi\rangle$$

аңлатпасына ийе боламыз. Сонлықтан (9.4)-теңлик

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi\,|\,HA - AH\,|\,\psi\rangle \tag{9.5}$$

түрине енеди ямаса қысқа түрде жазылған

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \langle[H, A]\rangle \tag{9.6}$$

аңлатпасын аламыз. (9.6)-қатнасты $A = x_k$ ҳәм $A = p_k$ болған дара жағдай ушын қолланамыз. (8.1)- ҳәм (8.2)-қатнасларды есапқа алғанда бул қолланыў

$$\frac{d}{dt}\langle x_k\rangle = \left\langle\frac{\partial H}{\partial p_k}\right\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle p_k\rangle = -\left\langle\frac{\partial H}{\partial x_k}\right\rangle \tag{9.7}$$

аңлатпаларын береди. Солай етип орташа мәнислер классикалық механиканың каноникалық нызамлары бойынша өзгереди екен.

Ескертиў: Гүман пайда болмаўы ушын улыўма жағдайда

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \left\langle\frac{\partial A}{dt}\right\rangle + \langle[H,\ A]\rangle$$

теңлигиниң орынлы екенлигин атап өтемиз.

II. Спин есапқа алынбайтуғын бир бөлекшели мәселелер

А. Бир өлшемли мәселелер

Бир өлшемли мәселелер әдеўир идеалластырыў болып табылады. Бирақ бундай мәселелерди квантлық механиканың тийкарғы өзгешеликлерин айқынластырыў ушын пайдаланыў мүмкин. Бундай мәселелер

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x,\ t)\psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{A.1}$$

түриндеги толқынлық теңлемени шешкенде пайда болады. Бундай мәселеде потенциал тек бир *x* декарт координатасынан ғәрезли болады.

$$\psi=e^{i(k_2y+k_3z)}\varphi(x,\ t) \tag{A.2}$$

факторластырылыўының жәрдеминде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2+k_3^2)\varphi+V(x,\ t)\varphi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\varphi}{\partial t} \tag{A.3}$$

теңлемесин аламыз. Егер

$$\varphi(x,\ t)=e^{-i\omega_0t}u(x,\ t),\qquad \hbar\omega_0=\frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2+k_3^2) \tag{A.4}$$

белгилеўлерин қабыл етсек бул теңлемени және де әпиўайыластырыўға болады. Усының нәтийжесинде биз бир өлшемли толқын теңлемесине келемиз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+V(x,\ t)u=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial u}{\partial t}\,. \tag{A.5}$$

~~(A.2)-~~ ҳәм (A.3)-формулалардағы экспоненциаллық көбейтиўшилер x көшерине перпендикуляр бағытта тарқалатуғын тегис толқынларды тәрийиплейди. Бул толқынлар x бағытындағы толқын функциясының қәсийетлерине тәсир етпейди.

16-мәселе. Еркин қозғалыс жағдайындағы фундаменталлық шешимлер

V = 0 болған жағдай ушын бир өлшемли толқын теңлемесин шешиңиз. Алынған шешимлердиң физикалық мәнисин таллаңыз.

Шешими.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{16.1}$$

толқын теңлемеси өзгериўшилерди айырыўға мүмкиншилик береди[1]:

$$\psi(x,\ t)=u(x)g(t). \tag{16.2}$$

Себеби (16.2)-аңлатпаны (16.1) теңлемеге қойсақ

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{u''}{u}=-\frac{\hbar}{i}\frac{\dot g}{g}=\hbar\omega \tag{16.3}$$

теңлемесин аламыз. Бул аңлатпада $\hbar\omega$ арқалы айырыў турақлысы белгиленген.

---

[1] Бул жерде ҳәм буннан кейин (A.4)-теңлемени қанаатландыратуғын бир өлшемли толқын функциясын ψ арқалы, ал оның кеңисликлик бөлимин *u* арқалы белгилеймиз.

(16.3)-теңлемени еки теңлемеге айырыў арқалы

$$\dot{g} = -i\omega g \text{ яғный } g(t) = e^{-i\omega t} \tag{16.4}$$

ҳәм

$$u'' + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0. \tag{16.5}$$

Егер ω ҳақыйқый шама болып табылатуғын болса, онда толқын функциясы дәўирли болады ҳәм $|\psi|^2$ шамасы ўақыттан ғәрезли болмайды (стационар ҳал). Егер ω оң шама болса, онда

$$\frac{2m\omega}{\hbar} = k^2 \tag{16.6}$$

шамасы да оң шама болады. Сонлықтан жоқарыда айтылғанлардан басқа (16.5)-теңлемениң шешими x кеңисликлик өзгериўшисиниң дәўирли функциясы болады.

> **Ескертиў**: Толқын функциясының ўақыттан ғәрезли екенлигин көрсететуғын (16.4) комплексли формасы квантлық механиканың өзине тән әҳмийетли өзгешелигин қурайды: sinωt менен cosωt функциялары (16.4)-дифференциал теңлемениң шешимлери болып табылмайды. Классикалық физика менен квантлық механика арасындағы бундай айырма Шредингер теңлемесиниң ўақыт бойынша биринши тәртипли теңлеме екенлиги менен байланыслы.

ω параметриниң физикалық мәнисин (16.1)-теңлемениң шеп тәрепиндеги операторды Гамильтон операторы деп қарап анықлаймыз (бул жағдайда Гамильтон операторы тек кинетикалық энергияның операторы болған бир оператордан турады). Буннан $E = \hbar\omega$ шамасының бөлекшениң кинетикалық энергиясы екенлиги келип шығады. Сонлықтан оның мәниси барлық ўақытта да оң болыўы керек ҳәм бизиң шешимимиз гамильтонианның меншикли функциясы болып табылады.

k^2 шамасының мәниси оң болғанлықтан (16.5)теңлемениң ямаса

$$u'' + k^2 u = 0 \tag{16.7}$$

теңлемесиниң улыўмалық шешими

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{16.8а}$$

түрине ийе болады. Сонлықтан бир өлшемли

$$\psi(x,\ t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)} \tag{16.8б}$$

толқын функциясы қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын еки толқыннан турады. Еки толқынның да фазалық тезлиги $v_ф = \omega/k$ шамасына тең.

Егер тығызлық ушын аңлатпаны анық түрде

$$\rho = \psi^*\psi, \tag{16.9}$$

ал ағыс ушын аңлатпаны

$$s=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) \tag{16.10}$$

түринде жазсақ, онда толқын функциясының кеңисликлик бөлиминиң физикалық мәниси айқынласады. (16.8б)-аңлатпаға муўапық биз

$$\rho=|A|^2+|B|^2+(AB^*e^{2ikx}+A^*Be^{-2ikx}),$$

$$s=\frac{\hbar k}{m}(|A|^2-|B|^2)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. A ҳәм B амплитудаларына ийе еки толқынның қарама-қарсы бағытланған еки ағысқа сәйкес келетуғынлығы көринип тур. Олардың интенсивлиги толқынлардың салыстырмалы нормировка турақлысы арқалы анықланады ҳәм k ға пропорционал. Тығызлық ушын аңлатпа толқынлардың (когерент толқынлардың) интерференциясының орын алатуғынлығын көрсетеди. Бул интерференция кеңисликлик дәўирлиликтиң пайда болыўының себепшиси болады.

Когерентликтиң пайда болыўы ушын айрықша себеп болмаған жағдайда (мысалы шегаралық шәртлер болмағанда) ҳәр бир толқынды өз алдына қараў ақылға муўапық келеди. Бундай жағдайда $B = 0$ деп болжаймыз ҳәм бул болжаў $s > 0$ теңсизлигин береди. Соның менен бирге $A = 0$ деп болжасақ та болады. Бундай жағдайда $s < 0$ теңсизлигин аламыз. Нәтийжеде бир бирине қарама-қарсы болған анаў ямаса мына бағыттағы бөлекшениң туўры сызықлы қозғалысы алынады. k шамасы еки белгиге де ийе болады деп есаплап бизиң нәтийжелеримизди былайынша жуўмақлаў мүмкин:

$$\begin{gathered}\psi(x,\ t)=Ce^{i\,(kx-\omega t)},\\ E=\hbar\omega,\quad k^2=\frac{2m\omega}{\hbar},\\ \rho=|C|^2,\quad s=\frac{\hbar k}{m}|C|^2.\end{gathered} \tag{16.11}$$

ω ны жоқ етип

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{16.12}$$

екенлигине ийе боламыз. Сонлықтан бөлекшениң импульси ҳәм оның классикалық тезлиги сәйкес

$$p=\hbar k \tag{16.13}$$

ҳәм

$$v=\frac{\hbar k}{m} \tag{16.14}$$

шамаларына тең болады. Тезлик ушын алынған соңғы аңлатпа

$$v_{\Phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} v$$

фазалық тезлик аңлатпасына пүткиллей сәйкес келмейди. Бирақ бул аңлатпа толқынның группалық тезлигине сәйкес келеди:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v.$$

Ескертиў: (16.1)-тийкарғы дифференциал теңлемени *D* жормал диффузия коэффициентине ийе диффузия теңлемеси деп қараўға болады:

$$D\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\partial\psi}{\partial t}, \quad D = i\,\frac{\hbar}{2m}.$$

Квантлық теорияда өзгериўшилерди айырыў әҳмийетли орынды ийелейтуғынлығын, ал диффузия теориясында әҳмийетли орынды ийелемейтуғынлығын есапқа алсақ диффузия мәселелериндеги көп ушырасатуғын *D* коэффициенти ҳақыйқый мәниске ийе болғандағы

$$\psi(x,\ t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left[\frac{im}{2\hbar} \cdot \frac{(x-\xi)^2}{t}\right] d\xi$$

шешими квантлық механиканда пайдаланылыў ушын орын таппайды.

(16.1)-теңлемедеги ўақыттың белгисин өзгертиў ψ толқын функциясын ψ* пенен алмастырыўға алып келеди.

17-мәселе. Еркин қозғалыстағы толқын пакети

Толқын пакетин дүзиңиз ҳәм оның ўақытлық эволюциясын изертлеңиз.

Шешими. Биз толқын теңлемесин дара жағдай ушын шешемиз ҳәм оны бурын тапқан (16.11)-шешим түринде жазамыз:

$$\psi(k;\ x,\ t) = C(k)\, e^{i\,(kx-\omega t)}, \tag{17.1}$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2. \tag{17.2}$$

Бул аңлатпада $C(k)$ арқалы ықтыярлы турақлы амплитуда белгиленген. Ал k шамасы болса елеге шекем еркин параметр. Сонлықтан толқын теңлемесиниң улыўмалық шешими

$$\psi(x,\ t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi(k;\ x,\ t)\, dk \tag{17.3}$$

аңлатпасындағы k бойынша қәлеген жыйнақлы интеграл түринде жазылады.

(17.3)-теңлик ең улыўма түрдеги бир өлшемли толқын пакетин тәрийиплейди. Интегралдың жыйнақлы болыўы ушын $|k| \to \infty$ шегинде $C(k)$ коэффициенти ең кеминде $1/k$ түринде нолге умтылыўы керек. Тап сол сыяқлы сайлап алынған $C(k)$ амплитудасы белгили бир түрдеги шешимге алып келеди.

Енди $p_0=\hbar k_0$ импульсине ийе биз тәрийиплеп атырған бөлекшени $t = 0$ басланғыш ўақыт моментинде $x = 0$ ноқатының әтирапында табыўдың итималлығы нолден сезилерликтей айырмасы бар жағдай ушын толқын пакетин қурамыз. Егер толқын пакетин

$$\psi(x,\ 0)=A\exp\left[-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x\right] \tag{17.4}$$

түринде алатуғын болсақ бул мақсетке жетиўге болады. Ҳақыйқатында да бул жағдайда

$$\rho(x,\ 0)=|\psi(x,\ 0)|^2=|A|^2\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$$

тығызлығы $|x|\leqslant a$ областында локализицияланған бөлекшеге жуўап береди. Ал (16.10) ағысы

$$s(x,\ 0)=\frac{\hbar}{2mi}2ik_0|A|^2\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)=\rho\frac{\hbar}{m}k_0$$

шамасына тең. Сонлықтан $v_0=\hbar k_0/m$ шамасы бөлекшениң тезлигине, ал $p_0=mv_0=\hbar k_0$ шамасы пакеттиң импульсине тең. Толқын функциясы тек бир бөлекшени тәрийиплейтуғын болғанлықтан

$$\int_{-\infty}^{\infty}\rho\,dx=1$$

нормировка шәрти орынлы болады. Яғный

$$|A|^2=\frac{1}{a\sqrt{\pi}}. \tag{17.5}$$

(17.3)- ҳәм (17.1)-аңлатпаларды пайдаланып (17.4)-аңлатпаны тегис толқынлар бойынша жайыў мүмкин:

$$\psi(x,0)=\int_{-\infty}^{\infty}C(k)\,e^{ikx}\,dk. \tag{17.6}$$

Бул интеграл Фурье интегралы болып табылады. Бул аңлатпадан $C(k)$ коэффициентлери былайынша табылады:

$$C(k)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)\,e^{-ikx}\,dx=\frac{A}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{x^2}{2a^2}+i(k_0-k)\,x\right]dx.$$

Бул интегралды жақсы белгили болған

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^2}\,dz=\sqrt{\pi} \tag{17.7}$$

формуласының жәрдеминде есаплап ең ақырында

$$C(k) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}(k-k_0)^2\right] \tag{17.8}$$

екенлигине ийе боламыз. Бул нәтийжени Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасларын пайдаланған ҳалда аңсат түсиниўге болады. Басланғыш ҳалда (17.4)-аңлатпаға сәйкес бөлекшениң координатасының анықсызлығы $\Delta x \approx a$ шамасына тең болады. Екинши тәрептен (17.8)-аңлатпаның көрсеткениндей толқын функциясына тийкарғы үлести $k = k_0$ ноқатының әтирапындағы кеңлиги $\Delta k \approx 1/a$ шамасына тең k толқын санының спектри (ямаса кеңлиги $\Delta p \approx \hbar/a$ шамасына тең $p = \hbar k$ импульси спектри) береди. Демек a шамасының қалайынша сайлап алынғанлығынан ғәрезсиз

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar \tag{17.9}$$

қатнасы орын алады. Бул Гейзенбергтиң анықсызлық қатнасы болып табылады.

t = 0 ўақыт моментиндеги $C(k)$ амплитудасын анықлап (17.3)-антегралды қәлеген ўақыт моменти ушын есаплаўға өте аламыз:

$$\psi(x,\ t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}a^2(k-k_0)^2 + ikx - i\frac{\hbar t}{2m}k^2\right] dk.$$

Бул аңлатпадағы экспонентада k ның квадратлық формасы тур. Сонлықтан бул интегралды қайтадан (17.7) қәтелер интегралына алып келиўге болады. Нәтийже

$$\psi(x,\ t) = \frac{A}{\left(1+i\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^{1/2}} \exp\left[-\frac{x^2 - 2ia^2k_0x + i\frac{\hbar t}{2m}k_0^2a^2}{2a^2\left(1+i\frac{\hbar t}{ma^2}\right)}\right] \tag{17.10}$$

түрине ийе болады.

Енди тығызлық ρ менен s ағысын қәлеген ўақыт моментинде қарап бул әдеўир қурамалы аңлатпаны түсиниў қыйын болмайды. Бул жағдайда тығызлық мынаған тең:

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \frac{|A|^2}{\left[1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]^{1/2}} \exp\left[-\frac{\left(x-\frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2\left[1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]}\right]. \tag{17.11}$$

Координата x тың функциясы сыпатында ол қоңыраў тәризли иймеклик формасына ийе болады. Бирақ бул жағдайда оның максимумы $x = 0$ ноқаттан $x = (\hbar k_0/m)\,t$ ноқатына аўысқан болады. Демек (17.10)-аңлатпа менен тәрийипленетуғын «толқынның дөңес» орны $v_0 = \hbar k_0/m$ тезлиги менен қозғалады (группалық тезлик бөлекшениң тезлигине тең). Соның менен бир қатарда (17.11)-экспонентадағы бөлшектиң бөлими толқын пакетиниң кеңлигиниң t = 0 моменттен баслап a шамасынан *t = t ўақыт моментинде*

$$a' = a\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]^{1/2} \approx \frac{\hbar}{ma}\,t$$

шамасына шекем үлкейетуғынлығын көрсетеди. Бул эффектти (17.8)-спектрлик функцияның түринен аңсат түсиндириўге болады. Толқын санларының спектри $\Delta k \approx 1/a$ шамасындағы кеңликке ийе болатуғын болғанлықтан ҳәр қыйлы толқынлардың тезликлери кеңлиги $\Delta v = (\hbar/m)\, \Delta k = \hbar/ma$Т шамасына тең областта жайылған. Сонлықтан пакет t ўақытқа пропорционал $\Delta x = t\Delta v = (\hbar/ma)\, t$ шамасына кеңейеди. Бул нәтийжени жоқарыда тапқан едик.

Ағыс ушын аңлатпа (17.10)-аңлатпадан

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = ik_0\,\frac{1 + i\,\dfrac{x}{a^2k_0}}{1 + i\,\dfrac{\hbar t}{ma^2}}\,\psi$$

аңлатпасының жәрдеминде алынады. (17.11)-формула менен салыстырғаннан кейинги тиккелей есаплаўлар

$$s(x,\ t) = \rho\,(x,\ t)\,v_0\,\frac{1 + \dfrac{\hbar t x}{ma^4k_0}}{1 + \left(\dfrac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \tag{17.12}$$

формуласын береди. Буннан биз ықтыярлы ўақыт ушын $s = \rho v_0$ теңлигине пүткиллей ийе болмайтуғынымызды көремиз (биз $t = 0$ моментинде усындай жағдайға ийе болған едик). Бул жағдай да тезликлер спектриниң шекли кеңлигиниң бар екенлигиниң нәтийжеси болып табылады. $x_0 = v_0 t$ пакетиниң максимумы ушын (17.12)-теңлик те $s = \rho v_0$ элементар қатнасына алып келеди. Екинши тәрептен $x \lesseqgtr x_0$ ушын $s \lesseqgtr \rho v_0$ теңсизлигине ийе боламыз. Бул да ақылға толық жуўап береди. Себеби t моментине шекем $x < x_0$ $(x > x_0)$ ноқатына тезлиги v_0 шамасынан киши (үлкен) болған толқын пакетиниң бөлимлери ғана жетеди.

Ең ақырында $\int \rho\, dx = 1$ нормировка шәртиниң ўақыттың барлық моментлери ушын (барлық ўақыт ушын) орынланатуғынлығын еске түсирип өтемиз. Бул заттың сақланыў нызамының көриниўи болып табылады.

18-мәселе. Турғын толқынлар

Бөлекше $x = -a$ ҳәм $x = +a$ ноқатларында жайласқан өткермейтуғын дийўаллардың арасына қойылған (дийўаллар усы шегараларға бөлекшелер келгенде күшли ийтерилиске ушыраўы ушын ойлап табылған идеализация болып табылады). Меншикли ҳалларды табыў ҳәм олардың қәсийетлерин таллаў керек.

Шешими. Стационар ҳаллар ушын биз

$$\psi\,(x,\,t) = u\,(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t} \tag{18.1}$$

функциясына ийе боламыз. Толқын функциясының кеңисликлик бөлеги $u\,(x)$

$$u'' + k^2 u = 0 \tag{18.2}$$

Шредингер теңлемесин қанаатландырады. Бул аңлатпада

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{18.3}$$

ҳәм ең улыўмалық жағдайда

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{18.4}$$

түрине ийе болады.

Өткизбейтуғын диййаллардың болыўы

$$u(a) = 0, \quad u(-a) = 0 \tag{18.5}$$

шегаралық шәртлерин пайда етеди. Бул шәртлер

$$\int_{-a}^{a} |u(x)|^2 dx = 1 \tag{18.6}$$

нормировка шәрти менен квантлық механиканда сайлап алыныўы ҳеш қашан регламентленбеген фазалық көбейтиўшини есапқа алмағанда меншикли функцияларды толық анықлаўға мүмкиншилик береди.

(18.4)-аңлатпаны (18.5)-аңлатпаға қойсақ *A* ҳәм *B* ларды анықлаў ушын бир текли теңлемелер системасын аламыз:

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0,$$
$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0.$$

Бул система тек анықлаўшы нолге тең болғанда ғана әпиўайы шешимге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} e^{ika} e^{-ika} \\ e^{-ika} e^{ika} \end{vmatrix} = 0 \text{ ямаса } \sin 2ka = 0. \tag{18.7}$$

(18.7) шәртти тек

$$k_n = \frac{\pi}{2a} n, \quad n = \pm 1, \ \pm 2, \ \pm 3, \ \ldots \tag{18.8}$$

формуласы менен анықланатуғын k_n коэффициентлериниң меншикли мәнислери ғана қанаатландырады. (18.7)-шәртти қанаатландыратуғын $k = 0$ мәниси (18.6)-нормировка шәртине қайшы келгенликтен итибарға алынбаўы керек. (18.3)- ҳәм (18.8)-аңлатпалардан энергияның меншикли мәнислери ушын

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \tag{18.9}$$

фомуласын аламыз.

(18.8)-аңлатпа тийкарында

$$e^{ik_n a} = e^{i\frac{\pi}{2}n} = i^n$$

теңликлерине ийе боламыз. Сонлықтан

$$B = (-1)^{n+1} A.$$

Егер n тақ сан болса $B = A$ ҳәм нормировкаланған функциялар төмендегилерге тең:

$$u_n^+(x) = a^{-\frac{1}{2}} \cos k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi n x}{2a}, \qquad n = \pm 1, \pm 3, \ldots \tag{18.10a}$$

Егер n жуп сан болса $B = - A$ ҳәм

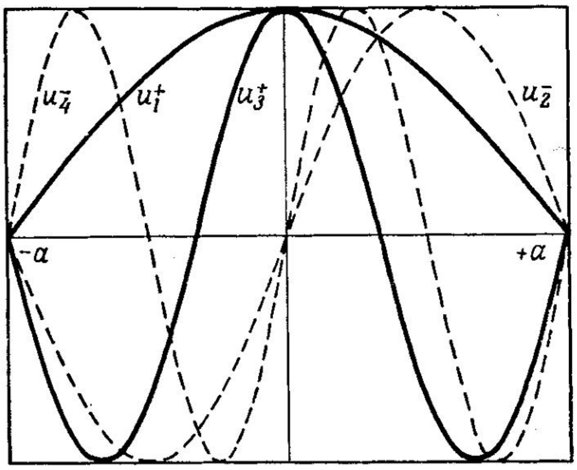
$$u_n^-(x) = a^{-\frac{1}{2}} \sin k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi n x}{2a}, \qquad n = \pm 2, \pm 4, \ldots . \tag{18.10б}$$

u_n функциялары [егер (18.10б) формуласындағы белгиниң сезилерликтей өзгерисин есапқа алмағанда] n ниң белгисинен ғәрезсиз болғанлықтан оның (n ниң) терис мәнислерин итибарға алмаўға болады. Сонлықтан (мысал ретинде) ең төменги төрт ҳалдың толқын функциялары төмендегидей болады:

$$\begin{array}{lll}
n = 1, & E_1 = \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, & u_1^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \dfrac{\pi x}{2a}, \\
n = 2, & E_2 = 4E_1, & u_2^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \dfrac{\pi x}{a}, \\
n = 3, & E_3 = 9E_1, & u_3^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \dfrac{3\pi x}{2a}, \\
n = 4, & E_4 = 16E_1, & u_4^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \dfrac{2\pi x}{a}.
\end{array} \tag{18.11}$$

Координата басындағы орайдағы инверсияға қатнасы бойынша меншикли функциялардың жуп (n тақ болғанда) ямаса тақ (n жуп болғанда) болатуғынлығын атап өтиў керек. Толқын функцияларының усындай қәсийети ҳаққында гәп еткенде ҳалдың жуплығы ҳаққында гәп етеди: симметриялық толқын функциясы болған жағдайда жуплықты оң, ал қарама-қарсы жағдайда терис деп есаплаймыз. Қабыл етилген (u_n^+, u_n^-) белгилеўлеринде жуплық жоқарғы «$^+$» ҳәм «$^-$» индекслери менен белгиленеди.

Биринши төрт меншикли функциялар 1-сүўретте көрсетилген.



1-сүўрет.

Шексиз бийик дийўалларға ийе бир өлшемли потенциал қутыдағы биринши төрт меншикли функциялар.

Меншикли функциялардың кеңисликлик бөлимлери ҳақыйқый болғанлықтан итималлықтың қосынды тоғы (результирующий ток вероятности) ҳеш бир халда бар бола алмайды. Бул (18.4)-формулада $|A| = |B|$ теңлигиниң орынланыўы менен байланыслы (16-мәселеде келтирилген таллаўларды еске түсириңиз). (18.4)-аңлатпадағы A ҳәм B амплитудаларына ийе толқынлар тоқлар менен импульслерге қарама-қарсы болған үлеслерди қосады. Сонлықтан энергияның дискрет меншикли мәнислерине тийисли гамильтонианның меншикли функциялары

$$p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

импульс операторының меншикли функциялары бола алмайды. Ҳақыйқатында да (18.10а) ҳәм (18.10б) аңлатпаларын дифференциаллаў синусоидалық шешимлердиң қайта тиклениўине алып келмейди, ал синусоидалық шешимлерди косинусоидалық шешимлер менен алмастырады. Импульстиң орташа мәнисин болса

$$\langle n|p|n\rangle = \frac{\hbar}{i}\int_{-a}^{a} u_n(x)\frac{\partial}{\partial x}u_n(x)\,dx$$

формуласының жәрдеминде есаплаўға болады. Барлық ҳаллар ушын бул интеграл жоғалады. Себеби интеграл белгиси астында турған аңлатпа x тың тақ функциясы болып табылады. Солай етип итималлық тоғының тығызлығының нолге айланыўына сәйкес $\langle n|p|n\rangle = 0$ аңлатпасына ийе боламыз.

Ескертиў: Математикалық көз-қарастан бул мәселе тардың (струнаның) тербелиси ҳаққындағы классикалық мәселе болып табылады. Бирден бир айырма мынадан ибарат: квантлық механикада энергияның меншикли мәнислери квадратлық нызам бойынша өзгереди. Ал классикалық физикада болса меншикли жийиликлер усындай нызам бойынша өзгереди. Бирақ тербелислердиң классикалық энергиясы квантлық механикада ҳеш қандай аналогқа ийе емес. Себеби тербелислердиң классикалық энергиясы тербелислердиң амплитудасынан ғәрезли ҳәм амплитуда ықтыярлы мәниске ийе бола алмайды. Квантлық механикада болса толқын функциясының амплитудасы (18.6)-нормировка шәрти менен бөлекшелердиң саны бирге тең екенлиги жағдайы бойынша белгиленип алынған.

19-мәселе. Ярым өткериўши дийўал (полупроницаемая перегородка)

18-мәселениң шәртлерине қосымша $x=0$ ноқатына жуқа ҳәм шексиз бийик ярым өткериўши дийўал орнатылған. Усы дийўалдың стационар ҳалларға тәсирин анықлаңыз.

Шешими. Барлық областты теңдей еки областқа бөлип туратуғын ярым өткериўши дийўалды 2ε шекли кеңлигине ҳәм шекли V_0 бийикликке ийе барьердиң дара жағдайы сыпатында қараўға болады (x = - ε ҳәм x = + ε ноқатлары арасындағы). Қысқалық ушын

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2, \quad \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)=\varkappa^2 \tag{6.3.1}$$

белгилеўлерин киргиземиз. Еки $u(\pm a)=0$ шегаралық шәртинен басқа барьердиң бар болғанлығы себепли биз және де төрт шегаралық шәртке ийе боламыз. Себеби $u(x)$ ҳәм $u'(x)$ функциялары $x=\pm\varepsilon$ ноқатларында үзликсиз болыўы керек. Биринши еки шәртти қанаатландырып ҳәм шешимди ҳақыйқый формада алып

$$u=\begin{cases} A_1\sin k(x+a), & -a\leqslant x\leqslant-\varepsilon, \\ Be^{-\varkappa x}+Ce^{\varkappa x}, & -\varepsilon\leqslant x\leqslant\varepsilon, \\ A_2\sin k(x-a), & \varepsilon\leqslant x\leqslant a. \end{cases} \tag{6.3.2}$$

аңлатпаларына ийе боламыз. $x=\pm\varepsilon$ ноқатларындағы үзликсизлик шәрти енди

$$u(-\varepsilon)=A_1\sin k\ \ (a-\varepsilon)=Be^{\varkappa\varepsilon}+Ce^{-\varkappa\varepsilon}, \tag{19.3а}$$

$$u'(-\varepsilon)=kA_1\cos k(a-\varepsilon)=\varkappa(-Be^{\varkappa\varepsilon}+Ce^{-\varkappa\varepsilon}), \tag{19.3б}$$

$$u(+\varepsilon)=A_2\sin k\ \ (\varepsilon-a)=Be^{-\varkappa\varepsilon}+Ce^{\varkappa\varepsilon}, \tag{19.3в}$$

$$u'(+\varepsilon)=kA_2\cos k\ (\varepsilon-a)=\varkappa(-Be^{-\varkappa\varepsilon}+Ce^{\varkappa\varepsilon}) \tag{19.3г}$$

теңлемелерин береди. (19.3а), (19.3б) ҳәм (19.3в), (19.3г) теңликлеринен A_1 менен A_2 ни жоғалтсақ сәйкес еки аңлатпа қалады

$$\begin{aligned} k\operatorname{ctg}k(a-\varepsilon)&=\varkappa\frac{-Be^{2\varkappa\varepsilon}+C}{Be^{2\varkappa\varepsilon}+C}, \\ k\operatorname{ctg}k(a-\varepsilon)&=\varkappa\frac{B-Ce^{2\varkappa\varepsilon}}{B+Ce^{2\varkappa\varepsilon}}. \end{aligned} \tag{19.4}$$

Теңлемелердиң шеп тәреплери бир бирине тең болғанлықтан оң тәреплери де бир бирине тең болады. Ал теңлемелердиң оң тәреплери бир бири менен тек $B = \pm C$ *болған жағдайда ғана* тең болады. $B = + C$ болған жағдайда (19.3а) ҳәм-(19.3в) теңликлеринен $A_1 = - A_2$ екенлигине ийе боламыз ҳәм оң жуплыққа ийе шешим аламыз. Егер $B = - C$ теңлиги орынланатуғын болса $A_1 = A_2$ ҳәм бизлер терис жуплыққа ийе шешим аламыз. Демек буннан бурынғы мәселедегидей стационар ҳаллар ҳәр қыйлы жуплық пенен характерленетуғын еки классқа бөлинеди екен.

Енди $\varkappa\varepsilon\longrightarrow 0$ ҳәм

$$\varkappa^2\varepsilon = \Omega \tag{19.5}$$

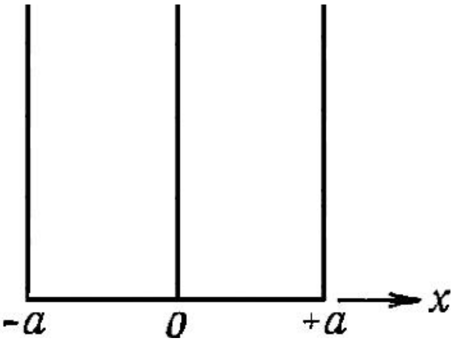
шамасы шекли болып қалатуғын $\varepsilon \longrightarrow 0,\ \varkappa \longrightarrow \infty$ шегине өтемиз. Ω шамасын дийўалдың өткизбеўшилик коэффициенти деп атаймыз. Себеби Ω шамасының өсиўи менен дийўалдың өткериўшилиги кемейеди. Оң жуплықта *(B = C)* (19.4)-қатнас оң тәрепин қатарға жайғанда

$$k \operatorname{ctg} ka = -\Omega \tag{19.6а}$$

аңлатпасын береди. Терис жуплықта *(B = — C)* жоқарыда келтирилгендей жоллар менен

$$k \operatorname{ctg} ka \longrightarrow -\infty \tag{19.6б}$$

аңлатпасы алынады.



2-сүўрет.

Ярым өткериўши дийўалға ийе потенциал қуты.

Екинши жағдай әдеўир әпиўайы. Меншикли функциялар дийўалда нолге айланады. Сонлықтан шешим мынадай түрге ийе болады:

$$u_n^-(x) = \begin{cases} A \sin k_n^-(x+a), & -a \leqslant x < 0, \\ A \sin k_n^-(x-a), & 0 < x \leqslant a, \end{cases} \tag{19.7а}$$
$$k_n^- a = n\pi, \quad n = 1,\ 2,\ 3\ \ldots,$$
$$u_n^-(-x) = -u_n^-(x), \quad |A|^2 = \frac{1}{a}.$$

(19.6а) теңлемеси болса, ол k_n^+ меншикли мәнислерин тек санлы анықлаўға мүмкиншилик береди. Тек еки шеклик жағдай буған кирмейди÷

1) толық (пүткиллей) өткермейтуғын дийўал (Ω → ∞), бундай жағдайда меншикли мәнислер ушын (19.6б) теңлемесиндегидей нәтийже, яғный $k_n^+ = n\pi$ нәтийжеси алынады;

2) толық өткеретуғын дийўал (Ω = 0), бундай жағдайда $k_n^+ = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi$ нәтийжесине ийе боламыз.

Солай етип өткизбеўшилик коэффициенти шекли мәниске ийе болғанда k_n^+ меншикли мәнислери k_n^- пенен k_{n-1}^-Т шамаларының арасында жатады, яғный оң ҳәм терис жуплыққа ийе қәддилер гезеклеседи екен. Меншикли функцияларды

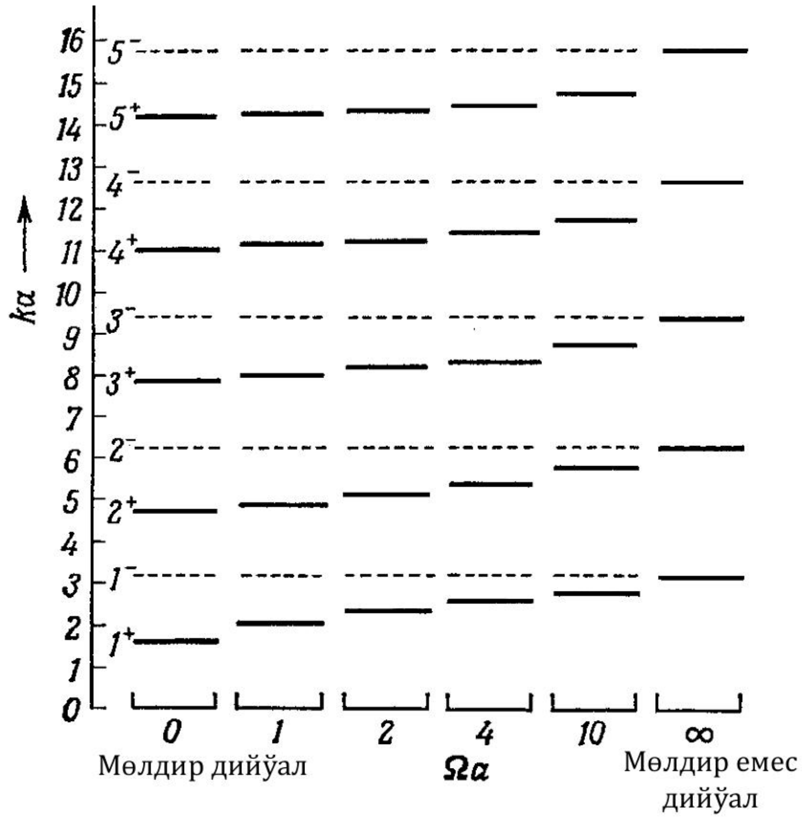
$$u_n^+(x) = \begin{cases} -A\sin k_n^+(x+a), & -a \leqslant x < 0, \\ +A\sin k_n^+(x-a), & 0 < x \leqslant +a, \end{cases}$$
$$\left(n-\frac{1}{2}\right)\pi < k_n^+ a < n\pi, \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots, \tag{19.7б}$$
$$u_n^+(-x) = u_n^+(x), \qquad |A|^2 = \frac{2k_n^+}{2k_n^+ a - \sin 2k_n^+ a}\,.$$

түринде жазыў мүмкин. Олардың мәниси $x = 0$ ноқатында шекли ҳәм графиклерде сынықлар пайда болады.

Төменде келтирилген кестеде өлшем бирлигине ийе емес Ωa параметриниң базы бир мәнислериндеги төменги ҳаллар ушын (19.6а) теңлемесиниң жәрдеминде алынған $k_n^+ a$ көбеймесиниң санлы мәнислери келтирилген:

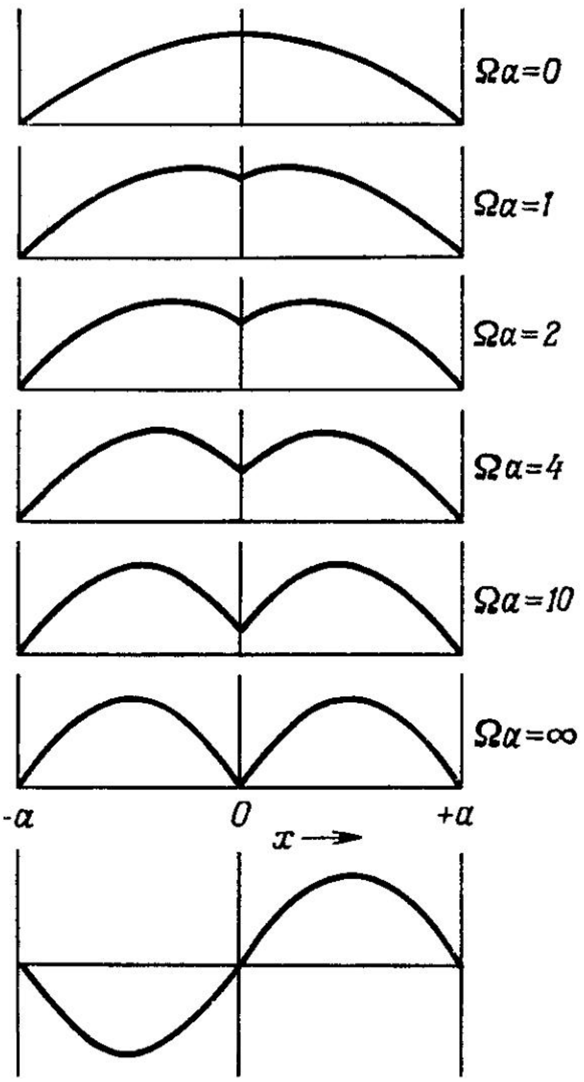
Ωa	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$
0	1,571	4,712	7,854	10,996	14,187
¼	1,715	4,765	7,886	11,018	14,155
½	1,835	4,816	7,917	11,040	14,171
1	2,023	4,925	7,979	11,085	14,208
2	2,282	5,091	8,097	11,173	14,276
4	2,568	5,361	8,305	11,335	14,408
10	2,866	5,763	8,711	11,704	14,734
∞	3,142	6,283	9,425	12,566	15,708

Усындай жоллар менен алынған қәддилер 3-сүўретте көрсетилген. Бул сүўретте тутас сызықлар оң жуплыққа ийе ҳалларға, ал пунктир сызықлар терис мәнисли жуплыққа ийе ҳалларға тийисли. Бул сүўреттиң шеп тәрепиндеги ең шетки қәддилер дийўал пүткиллей мөлдир болған (Ω = 0) жағдай ушын алынған. Бул жағдай 18-мәселеде соғылған сүўретке сәйкес келеди. Дийўал қанша мөлдир болған сайын, яғный сүўреттиң оң шетине жақынлаған сайын оң жуплыққа ийе қәддилер жоқары көтериледи, ал терис мәнисли жуплыққа жуўап беретуғын қәддилер өзлериниң дәслепки ийелеген орынларында қалады. Бул жағдай жуп толқын функцияларының қәсийетлеринде де сәўлеленген. Мысал ретинде n = 1 ушын бир усындай функция 4-сүўретте келтирилген (толқын функциялары нормировкаланбаған). Өткермейтуғын дийўал жағдайында (Ω → ∞) ол $x = 0$ ноқатында нолге айланады ҳәм қутының еки тәрепи бир биринен ғәрезсиз болады. Егер белгисине итибар бермесек қутының шеп тәрепинде бул функция биринши тақ меншикли функцияға сәйкес келеди (4-сүўреттиң төменги бөлиминде көрсетилген). Солай етип Ω → ∞ шегинде энергия қәддилери айныйды (3-сүўреттеги шетки оң жолақ).



3-сүўрет. Дийўалдың өткизбеўшилик коэффициентиниң ҳәр қыйлы мәнислериндеги қәддилердиң жайласыўлары.

Тутас сызықлар оң жуплыққа ийе ҳаллар, ал пунктирлик сызықлар терис мәнисли жуплыққа ийе қәддилер ушын.



4-сүўрет.

Дийўалдың өткизбеўшилик коэффициентиниң ҳәр қыйлы мәнислериндеги биринши еки стационар ҳаллардың толқын функциялары.

Жоқарысында 1^+ ҳалы, төменде 1^- ҳалы.

20-мәселе. δ-тәризли потенциал барьердиң ярым өткигизгиш дийўалы

19-мәселедеги потенциал дийўалды Дирактың δ-функциясының жәрдеминде де тәрийиплеў мүмкин. Бул жағдайда потенциалды

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m}\Omega\delta(x) \qquad (20.1)$$

түрине ийе деп болжаймыз. Буның дурыс екенлигин дәлиллеңиз ҳәм усындай дийўалға байланыслы келип шығатуғын шегаралық шәртлерди таллаңыз.

Шешими. Бизге

$$u'' + [k^2 - 2\Omega\delta(x)]\,u = 0 \qquad (20.2)$$

Шредингер теңлемесин шешиў керек. Ең дәслеп (20.2)-дифференциал теңлеме де, $u(\pm a) = 0$ шегаралық шәрти де $x \longrightarrow -x$ инверсиясына қарата инвариант екенлигин көремиз. Демек дифференциал теңлеме ҳәм шегаралық шәртлер менен анықланатуғын бул мәселениң шешимлери жуплық операторының меншикли функциялары ғана бола алады (жуплық операторы x шамасын $-x$ шамасына айландырады). Бунның дурыслығына былайынша исениўге болады. Қәлеген $u(x)$ функциясын еки бөлекке бөлиўге болады: жуп $f(x)=f(-x)$ ҳәм тақ $g(x)=-g(-x)$. Сонлықтан

$$u(x)=Af(x)+Bg(x),$$
$$u(-x)=Af(x)-Bg(x).$$

Егер $u(x)$ функциясы бизиң мәселемиздиң шешими болатуғын болса, $u(-x)$ шешими де бизиң мәселемиздиң шешими болады. Ал айныў (вырождение) болмайтуғын болғанлықтан шешим мультипликативлик турақлы дәллигине шекем (мысалы α ге шекем) бир мәнисли болады. Демек

$$u(-x)=\alpha u(x)$$

ямаса

$$Af(x)-Bg(x)=\alpha\,[Af(x)+Bg(x)].$$

f пенен g бир бирине сызықлы ғәрезсиз. Бул жағдайдың орын алыўы ушын $A = \alpha A$ ҳәм $B = -\alpha B$ теңликлериниң орынланыўы шәрт. Демек $\alpha = 1$, $B = 0$, сонлықтан $u(x)$ функциясы жуп функция болып табылады. Егер $\alpha = -1$ болса $A = 0$ ҳәм $u(x)$ тақ функция болады.

Енди потенциал дийўал қасындағы жағдайларды үйренемиз. (20.2)-теңлемени дийўалдың тиккелей қасы областында интеграллағанда [$u(x)$ функциясын үзликсиз деп есаплаймыз]

$$u'(+0)-u'(-0)=2\Omega u(0) \tag{20.3}$$

теңлемесине ийе боламыз. Басқа сөз бенен айтқанда

$$L(x)=\frac{u'(x)}{u(x)} \tag{20.4}$$

логарифмлик туўындысы дийўалда 2Ω шамасына тең секириўге ушырайды:

$$L(+0)-L(-0)=2\Omega. \tag{20.5}$$

Солай етип 19-мәселеде пайдаланылған жеткиликли дәрежедеги қыйын процедураны потенциал дийўалдағы белгили дәрежедеги жасалма, бирақ жүдә апиўайы шегаралық шәрт пенен алмастырыўға болады екен. Бул шегаралық шәртти алыўымыздың себеби биз дифференциал теңлемениң потенциал дийўалдың тиккелей қасындағы қәсийетлерин ғана есапқа алыў болып табылады. Сонлықтан егер қосымша $V(x)$ сингулярлық емес потенциал болған жағдайда да, басқа қәлеген орында қойылған шегаралық шәртлерде де бул теңлемени қанаатландыратуғынлығын атап өтемиз.

Енди меншикли функциялар ҳаққындағы мәселеге дыққат аўдарамыз. Егер $u_n^-(x)$ тақ шешимлерине итибар беретуғын болсақ, онда ол потенциал дийўалда нолге айланады, яғный $u_n^-(0)=0$. Бирақ бул жағдайда (20.3)-теңликке байланыслы түўында ҳеш қандай секирмели өзгериске ушырамайды, ал ол үзликсиз болады. Солай етип дийўалдың болыўы өткизбеўшилик коэффициентиниң қандай болыўына байланыссыз тақ шешимлерге тәсир етпейди екен. Бул жағдай 19-

мәселедеги алынған нәтийжелерге толық сәйкес келеди [~~(19.7а) теңликке қараңыз].~~

Екинши тәрептен зәрүрлик бойынша жуп шешимлер төмендегидей түрге ийе болыўы керек:

$$u_n^+(x) = \begin{cases} -A\sin k_n^+(x+a), & -a \leqslant x < 0, \\ +A\sin k_n^+(x-a), & 0 < x \leqslant a. \end{cases} \tag{20.6}$$

Буннан

$$L(+0) = -k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a, \quad L(-0) = k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a$$

ҳәм сонлықтан (20.5)-шәрттиң күшине ҳәм (19.6а)-теңлемеге сәйкес

$$k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a = -\Omega.$$

Солай етип буннан кейинги таллаўлар 19-мәселениң таллаўын толық қайталайды.

21-мәселе. δ тәризли потенциал барьердеги шашыраў

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m}\Omega\delta(x) \tag{21.1}$$

потенциал барьерине шеп тәрептен энергиясы *E* шамасына тең болған бөлекшелер ағысы келип түссин. Барьердиң бар болыўының бул барьердиң еки тәрепинен де «шағылысып» еки тәрепке қарай тарқалатуғын толқынлардың пайда болыўына алып келетуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими. $x = 0$ болған ноқаттың тиккелей қасынан басқа барлық орынларда Шердингер теңлемесиниң улыўмалық шешимин былайынша жазамыз

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k > 0. \tag{21.2}$$

Бул теңлемеде *A* ҳәм *B* лар арқалы $x < 0$ ҳәм $x > 0$ областларында ҳәр қыйлы мәнислерге ийе константалар белгиленген. Бул константалардың мәнислерин сайлап алыў жолы менен (21.2)-шешиминиң шегаралық шәртти қанаатландыратуғын жағдайға алып келиў мүмкин. Егер барьерге келип түсиўши толқынның амплитудасын 1 ге тең деп есаплап нормировканы сайлап алсақ, онда бизиң шешимимизди басқаша жазыў мүмкин

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \\ (1+F)e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \tag{21.3}$$

Бул аңлатпаларда *B* ҳәм *F* сәйкес арқалы алдыға қарай ҳәм кейинге қарай шашыраған толқынлардың амплитудалары белгиленген.

(20.3)-теңлик бойынша $x = 0$ ноқатында $u(x)$ функциясының қәсийетлери

$$u(+0) = u(-0) \quad \text{и} \quad u'(+0) - u'(-0) = 2\Omega\, u(0) \tag{21.4}$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул қатнаслар *B* = *F* ҳәм

$$ik(1+F) - ik(1-B) = 2\Omega(1+B)$$

қатнасын береди. Сонлықтан ең ақырында

$$B = F = \frac{\Omega}{ik - \Omega} \tag{21.5}$$

формуласын аламыз.

~~(21.3)-шешимде үш толқынды бир биринен айырыў мүмкин~~: интенсивлиги 1 ге тең келип түсиўши толқын, интенсивлиги $|B|^2$ қа тең шашыраған толқын ҳәм интенсивлиги $|1 + F|^2$ қа тең барьерден өткен толқын. (21.5)-қатнастан

$$|B|^2 = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + k^2}, \quad |1 + F|^2 = \frac{k^2}{\Omega^2 + k^2} \tag{21.6}$$

екенлиги келип шығады. Бул

$$1 = |B|^2 + |1 + F|^2 \tag{21.7}$$

сақланыў нызамына (үзликсизлик теңлемесине) алып келеди. Бул нызам бойынша өткен ҳәм шашыраған толқынлардың интенсивликлериниң қосындысы келип түсиўши толқынның интенсивлигине тең.

Егер потенциал барьер дерлик өткермейтуғын болса (Ω → ∞), онда (21.5) ке байланыслы $B \approx -1$ ҳәм $1 + F \approx 0$. Сонлықтан биз толық шағылысыўға ийе боламыз. Егер потенциал барьер дерлик мөлдир болса (Ω = ∞)

$$B = F \approx \frac{\Omega}{ik}$$

ҳәм шашыраған толқынның интенсивлиги бөлекшениң энергиясына кери пропорционал болып шығады. Әлбетте, бул жағдай бөлекшениң энергиясы жүдә үлкен болған шеклерде орын алады ҳәм бөлекшениң энергиясы киши болғанда $(k \leqslant \Omega)$ бундай жағдай орын алмайды. Бизлер бул жерде Борнның биринши жақынласыўының дара жағдайын көремиз. Бул жақынласыў тек жоқары энергияларда ғана дурыс. Бирақ анықлық ушын мына жағдайды атап өтиўимиз керек: кинетикалық энергияның $V(x)$ потенциал энергияға салыстырғанда үлкен болыўы пүткиллей талап етилмейди (гейде усындай талап қойылады). Ҳақыйқатында да, биз келтирген мысалда $x = 0$ ноқатында ҳәтте шексиз үлкен мәниске ийе болады.

Алға қарай ҳәм артқа (кейинге) қарай бағытланған толқынлар ушын шашыраў амплитудаларының теңлиги (21.1)-потенциалдың өзине тән белгиси болып табылады

22-мәселе. Симметриялы потенциал барьердеги шашыраў

Энергиясы E болған бөлекшелер ағысы $-a \leqslant x \leqslant a$ областында шекленген потенциальный барьерге келип түседи. Потенциал x тың төмендегидей жуп функциясы болсын:

$$V(x) = V(-x) \tag{22.1}$$

$x = \pm a$ ноқатларында алға ҳәм кейинге шашыраған толқынлардың амплитудасын толқын функциясының логарифмлик туўындысы арқалы көрсетиў талап етиледи.

Шешими. (22.1)-симметрия шәртинен әҳмийетли нәтийже келип шығады: энергия E ниң қәлеген мәнисинде Шредингер теңлемеси жуп

$$u_+(x) = u_+(-x), \quad u'_+(x) = -u'_+(-x) \tag{22.2а}$$

шешимине де, тақ

$$u_-(x) = -u_-(-x), \quad u'_-(x) = u'_-(-x) \tag{22.2б}$$

шешимине де ийе болады. Бул шешимлер сызықлы ғәрезсиз емес, сонлықтан улыўмалық шешимди ықтыярлы сызықлы комбинация сыпатында жазыў мүмкин. $-a \leqslant x \leqslant a$ интервалында u_+ пенен u_- дара шешимлерин $x = 0$ ноқатта

$$u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0$$

ҳәм

$$u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1$$

деп есаплап санлы усыллардың жәрдеминде де анықлаў мүмкин. Әлбетте, бундай жағдайларда базислик шешимлердиң нормировкасы жеткиликли дәрежеде ықтыярлы түрде әмелге асырылады. Солай етип биз $x = a$ ноқаттағы олардың логарифмлик туўындыларын есаплаўымыз мүмкин. Бул туўындыларды өлшем бирликке ҳәм салыстырмалы нормировкаға ғәрезли емес түрде былайынша жаза аламыз

$$au'_+(a)/u_+(a) = L_+, \qquad au'_-(a)/u_-(a) = L_-. \tag{22.3}$$

$x = -a$ ноқатында логарифмлик туўындылар $au'_\pm(-a)/u_\pm(-a)$ (22.2)-аңлатпаға сәйкес- $-L_+$ ҳәм $-L_-$ ге тең болады.

Шеп тәрептен келип түсетуғын, амплитудасы 1 ге тең толқын ушын шешим мына түрге ийе болады:

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & -\infty < x \leqslant -a, \\ C_1u_+(x) + C_2u_-(x), & -a \leqslant x \leqslant a, \\ (1+F)e^{ikx}, & a \leqslant x < \infty. \end{cases} \tag{22.4}$$

$x = \pm a$ ноқатларындағы $u(x)$ ҳәм $u'(x)$ функцияларының үзликсизлиги төмендегидей төрт шәртти береди:

$$e^{-ika} + Be^{ika} = C_1u_+(a) - C_2u_-(a), \tag{22.5а}$$

$$ik(e^{-ika} - Be^{ika}) = -C_1u'_+(a) + C_2u'_-(a), \tag{22.5б}$$

$$(1+F)e^{ika} = C_1u_+(a) + C_2u_-(a), \tag{22.5в}$$

$$ik(1+F)e^{ika} = C_1u'_+(a) + C_2u'_-(a). \tag{22.5г}$$

(22.5а)- ҳәм (22.5в)-теңликлерин қосып ҳәм (22.56)-теңликтен (22.5г)-теңликти алсақ оң тәрепте сәйкес $2C_1u_+(a)$ ҳәм $2C_1u'_+(a)$ функцияларын аламыз. Енди олардың қатнасларын алсақ

$$L_+ = ika\frac{-e^{-ika}+(1+F+B)\,e^{ika}}{e^{-ika}+(1+F+B)\,e^{ika}} \qquad (22.6а)$$

аңлатпасын аламыз. Тап сол сыяқлы, бирақ белгилерин өзгертип исленген процедура

$$L_- = ika\frac{e^{-ika}+(1+F-B)\,e^{ika}}{-e^{-ika}+(1+F-B)\,e^{ika}} \qquad (22.6б)$$

аңлатпасын береди. (22.6а)- ҳәм (22.6б)-теңлемелерин $1+F\pm B$ шамасына қарата шешсек ҳәм әпиўайылық ушын

$$ka = q \qquad (22.7)$$

амплитудалар ушын төмендегидей аңлатпаларды аламыз:

$$B = -\frac{1}{2}e^{-2iq}\left[\frac{L_+ + iq}{L_+ - iq}+\frac{L_- + iq}{L_- - iq}\right], \qquad (22.8а)$$

$$1+F = -\frac{1}{2}\,e^{-2iq}\left[\frac{L_+ + iq}{L_+ - iq}-\frac{L_- + iq}{L_- - iq}\right]. \qquad (22.8б)$$

Үзликсизлик теңлемеси тийкарында өткен ҳәм шағылысқан толқынлардың интенсивликлери келип түсиўши толқынның интенсивлигине тең болыўы керек екенлигин күтиў шәрт. Ҳақыйқатында да (22.8а)- ҳәм (22.86)-қатнаслардан

$$|B|^2 = \frac{(L_+L_- + q^2)^2}{(L_+L_- + q^2)^2 + q^2\,(L_+ - L_-)^2}, \qquad (22.9а)$$

$$|1+F|^2 = \frac{q^2\,(L_+ - L_-)^2}{(L_+L_- + q^2)^2 + q^2\,(L_+ - L_-)^2} \qquad (22.9б)$$

формулалары келип шығады. Солай етип биз күтип атырған

$$|B|^2 + |1+F|^2 = 1 \qquad (22.10)$$

қатнасы сөзсиз орынланады.

Солай етип алға ҳәр артқа қарай шашыраған толқынлардың амплитудасын табыў проблемасы $x = a$ ноқатындағы жуп ҳәм тақ толқын функцияларының (22.3)-логарифмлик туўындыларын табыўға алып келинеди екен. Әлбетте бул соңғы мәселени (22.1)-потенциал анық түрде берилмеген жағдайда шешиўге болмайды

21-мәселениң нәтийжесиндегидей бул жағдайда $B = F$ теңлиги ушын орын жоқ. Егер

$$q\,|L_+ - L_-| > |L_+L_- + q^2|$$

теңсизлиги орынланатуғын болса алға қарай шашыраған толқын, ал қарама-қарсы жағдайда кейин қайтқан толқынның интенсивлиги жоқары болады.

23-мәселе. Туўры мүйешли барьерден шағылысыў

22-мәселеде алынған улыўма формуланы

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = k_0^2, \quad |x| \leqslant a \qquad (23.)$$

түриндеги потенциаллық барьерге ҳәм бул интервалдың сыртындағы $V=0$ потенциалына қолланыңыз. Өтиў коэффициентин есаплаңыз.

Шешими. Барьердиң ишинде Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$u'' + (k^2 - k_0^2)\, u = 0. \qquad (23.2)$$

Бул теңлеме еки типтеги шешимге ийе болады: табалдырықтан киши болған потенциал энергия ушын $(k < k_0)$ ҳәм табалдырықтан жоқары болған кинетикалық энергия ушын $(k > k_0)$. Биз биринши жағдайдан баслаймыз.

$$k_0^2 - k^2 = \varkappa^2. \qquad (23.3)$$

Бундай жағдайда

$$u'' - \varkappa^2 u = 0.$$

Сонлықтан жуп ҳәм тақ шешимлер ушын сәйкес

$$u_+(x) = \operatorname{ch} \varkappa x, \quad u_+(0) = 1, \quad u_+'(0) = 0 \qquad (23.4а)$$

ҳәм

$$u_-(x) = \frac{1}{\varkappa} \operatorname{sh} \varkappa x, \; u_-(0) = 0, \quad u_-'(0) = 1 \qquad (23.4б)$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Демек

$$L_+ = a u_+'(a)/u_+(a) = \varkappa a \operatorname{th} \varkappa a, \qquad (23.5а)$$

$$L_- = a u_-'(a)/u_-(a) = \varkappa a \operatorname{cth} \varkappa a. \qquad (23.5б)$$

(22.9б) формуласының жәрдеминде элементар түрлендириўлерден кейин өтиў коэффициенти ушын

$$T \equiv |1 + F|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2k\varkappa}\right)^2 \operatorname{sh}^2 2\varkappa a} \qquad (23.6)$$

формуласын аламыз.

Шағылысыў коэффициенти болса (22.10)-формуланың жәрдеминде алынады:

$$R \equiv |B|^2 = 1 - T. \qquad (23.7)$$

Классикалық механикада келип түсиўши ағыс барьерде толық шағылысқан болар еди ҳәм биз $|B|^2=1$ ҳәм $|1+F|^2=0$ теңликлерине ийе болған болар едик. (23.6)-формулаға сәйкес бул $\varkappa a \longrightarrow \infty$ шәрти орынланғанда ғана, яғный бөлекшениң энергия қәдди үстинде бийик "потенциал таў" пайда болғанда ғана жүзеге келген болар еди. Бул жағдайда өтиў коэффицинти жүдә киши шамаға, бирақ шекли мәниске ийе болған болар еди („туннель эффекти"). Оны жуўық түрде былайынша жазыў мүмкин

$$T=\frac{16k^2\varkappa^2}{k_0^4}\,e^{-4\varkappa a}. \tag{23.8}$$

Өтиў коэффициентиниң шамасының тәртиби тийкарынан экспоненциаллық көбейтиўши тәрепинен анықланады.

Ескертиў ретинде: Буннан былай экспонентаның көрсеткиши ушын ықтыярлы $V(x)$ потенциалында биз интеграл түриндеги улыўма аңлатпа аламыз (16-мәселени қараңыз):

$$4\varkappa a=2\int\limits_{-a}^{+a}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}\,dx$$.

Бөлекшениң кинетикалық энергиясының мәниси потенциал барьердиң бийиклигинен жоқары болса (23.3)-аңлатпаның жәрдеминде анықланган $\varkappa$ шамасы жормал шамаға айланады. Қолайлылық ушын

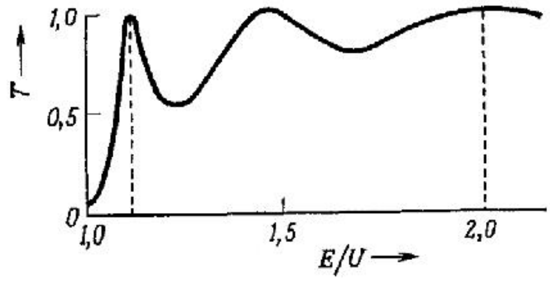
$$K^2=k^2-k_0^2=-\varkappa^2 \tag{23.9}$$

белгилеўин киргизип биз енди (23.6)-аңлатпаның орнына

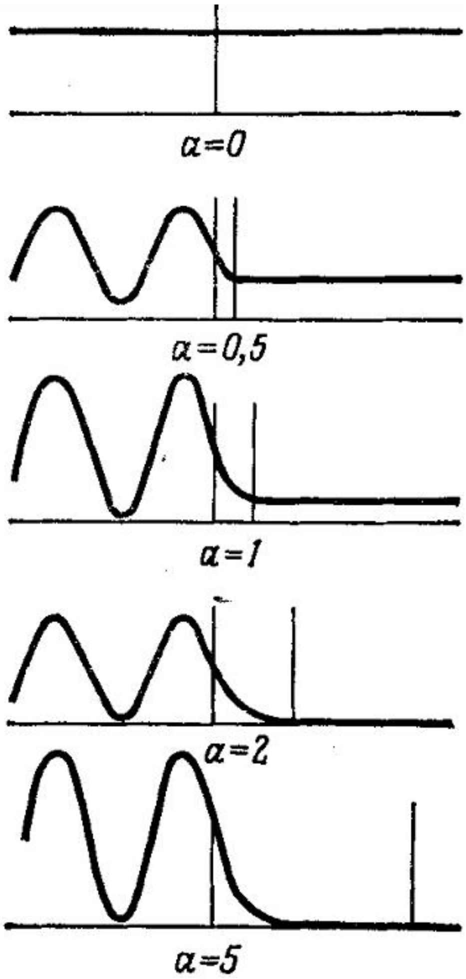
$$T=\frac{1}{1+\left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2\sin^2 2Ka} \tag{23.10}$$

аңлатпасын жаза аламыз. Биз қарап атырған энергияларды классикалық механикада *T* = 1 ҳәм *R* = 0, (23.10)-формула бойынша анықланған өтиў коэффициенти болса *T* = 1 болған жағдайда тек $2Ka=n\pi\ (n=1,\ 2,\ 3,\ \ldots)$ болған жағдайда максимум мәнисине жеткен болар еди. Усындай максимумлар арасында $2Ka=(n+{}^1/_2)\,\pi$ ноқатларында минимумлар жайласады. (23.10)-формуладағы синустағы көбейтиўши қанша киши болса бул минимумлар *T* = 1 мәнисине жақын жайласады (басқа сөз бенен айтқанда потенциал барьердиң бийиклигине салыстырғанда бөлекшениң энергиясы қаншама үлкен болса).

Өтиў коэффициенти *T* шамасының энергияның барьердиң бийиклигине қатнасынан ғәрезлиги (айтайық U шамасынан) 5-сүўретте келтирилген. Бул сүўретте $2k_0a=3\pi$ болған жағдай ушын $T\,(E/U)$ функциясының графиги келтирилген. 6-сүўретте толқын функциясының қалайынша өзгеретуғынлығы көрсетилген: бул сүўретте итималлық тығызлығы $|u|^2$ шамасының координата x тан ғәрезлиги сәўлелендирилген. Барьердиң оң тәрепинде $|u|^2=|1+F|^2$, яғный итималлықтың тығызлығы турақлы шама, барьердиң шеп тәрепинде болса келип түскен толқын менен шашыраған толқынлардың интерференциясы орын алады. 6-сүўретте ҳәр қыйлы кеңликке ийе барьерлер ушын $k^2=\varkappa^2={}^1/_2k_0^2$ болған жағдай сүўретленген. Барьер қаншама кең болса өткен толқынның интенсивлиги соншама киши ҳәм интерференция қубылысы анық көринеди.



5-сүўрет. Өтиў коэффициенти *T* менен энергияның барьердиң бийиклигине қатнасы арасындағы байланыс (*E* > *U* болған жағдай ушын)



6-сүўрет. *E* < *U* болған жағдайда шеп тәрептен туўры мүйешли барьерге келип түсетуғын бөлекшелер ағысы ушын $|u|^2$ шамасының x координатасынан ғәрезлиги. Вертикал жайласқан сызықлар жубы жәрдеминде барьердиң кеңлиги *a* белгиленген. Барьердиң шеп тәрепиндеги осцилляция келип түсиўши ҳәм шашыраған толқынлардың интерференциясынан пайда болған.

24-мәселе. Шағылысыў инверсиясы

Мейли $0 < x < a$ областта $V(x) > 0$ потенциал барьер түриндеги тосқынлыққа шеп тәрепинен толқын келип түсетуғын болсын. Потенциалдың формасынан ғәрезсиз толқын оң тәрептен келип түсетуғын болса да шашыратыў коэффициентиниң тап сондай мәниске ийе болатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими. Мейли $u(x)$ пенен $v(x)$ функциялары $0 < x < a$ областы ушын вронскианы

$$uv' - vu' = 1 \tag{24.1}$$

болған Шредингер теңлемесиниң бир биринен ғәрезсиз еки ҳақыйқый шешими болсын. Шеп тәрептен келип түсетуғын толқын ушын толқын функциясы

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0, \\ Au(x) + Bv(x), & 0 < x < a \\ Ce^{ik(x-a)}, & x > a, \end{cases} \tag{24.2}$$

түрине ийе болады ҳәм $x = 0$ менен $x = a$ ноқатларындағы ψ ҳәм ψ′ функцияларының үзликсизлиги

$$\begin{gathered} 1 + R = Au(0) + Bv(0), \\ ik(1 - R) = Au'(0) + Bv'(0), \\ Au(a) + Bv(a) = C, \\ Au'(a) + Bv'(a) = ikC \end{gathered} \tag{24.3}$$

аңлатпаларын береди. (24.1)-аңлатпаның жәрдеминде соңғы еки теңлемелер жубынан

$$\begin{aligned} A &= C\,[v'(a) - ikv(a)], \\ B &= -C\,[u'(a) - iku(a)] \end{aligned} \tag{24.4}$$

аңлатпаларын табамыз. *A* ҳәм *B* ушын табылған аңлатпаларды (24.3)-теңлемелер системасының биринши жубына қойсақ

$$1 + R = (p_{0a} - iq)\,C, \quad 1 - R = (p_{a0} - ir)\,C \tag{24.5}$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Бул аңлатпаларда жазыўды қысқартыў ушын мынадай белгилеўлер қабыл етилген:

$$\begin{aligned} p_{0a} &= u(0)\,v'(a) - v(0)\,u'(a), \\ p_{a0} &= u(a)\,v'(0) - v(a)\,u'(0), \\ q &= k\,[u(0)\,v(a) - v(0)\,u(a)], \\ r &= \frac{1}{k}\,[u'(0)\,v'(a) - v'(0)\,u'(a)]. \end{aligned} \tag{24.6}$$

(24.5)-қатнастың жәрдеминде ең ақырында мынадай аңлатпаға ийе боламыз:

$$R = \frac{(p_{0a} - p_{a0}) - i\,(q - r)}{(p_{0a} + p_{a0}) - i\,(q + r)}. \tag{24.7}$$

Сонлықтан шағылыстырыў коэффициенти ушын

$$|R|^2 = \frac{(p_{0a} - p_{a0})^2 + (q - r)^2}{(p_{0a} + p_{a0})^2 + (q + r)^2} \tag{24.8}$$

түриндеги аңлатпаны аламыз.

Енди келип түсиўши толқын барьерге оң тәрептен келип түсетуғын болсын. Буның ушын (24.2) толқын функциясын

$$\tilde{\psi} = \begin{cases} \tilde{C}e^{-ikx}, & x < 0, \\ \tilde{A}u(x) + \tilde{B}v(x), & 0 < x < a, \\ e^{-ik(x-a)} + \tilde{R}e^{ik(x-a)}, & x > a \end{cases} \tag{24.9}$$

аңлатпасы менен алмастырыў жеткиликли. Енди үзликсизлик шәрти мынаны береди:

$$\begin{aligned} 1 + \tilde{R} &= \tilde{A}u(a) + \tilde{B}v(a), \\ -ik(1 - \tilde{R}) &= \tilde{A}u'(a) + \tilde{B}v'(a), \\ \tilde{A}u(0) + \tilde{B}v(0) &= \tilde{C}, \\ \tilde{A}u'(0) + \tilde{B}v'(0) &= -ik\tilde{C}. \end{aligned} \tag{24.10}$$

Бул теңлемелердиң структурасы (24.3)-теңлемелердиң структурасы менен бирдей. (24.10)-теңлемелерди (24.3)-теңлемелерден k ны $-k$ ға алмастырыў ҳәм a аргументи менен 0 ди орын алмастырыў жолы менен алыў мүмкин. Бундай түрлендириўлерди (24.6)-қатнасларға қоллансақ

$$p_{0a} \longrightarrow p_{a0}, \quad p_{a0} \longrightarrow p_{0a}, \quad q \longrightarrow q, \quad r \longrightarrow r \tag{24.11}$$

өзгерислерин береди. Солай етип ең ақырғы формулалар (24.7) менен (24.8) ден тек p_{0a} менен p_{a0} диң орынларының алмасқанлығы менен ғана айрылады екен. (24.8)-аңлатпа p_{0a} менен p_{a0} шамаларына қарата симметриялы болғанлықтан шағылыстырыў коэффициенти

$$|\tilde{R}|^2 = |R|^2 \tag{24.12}$$

шеп тәрептен келип түсетуғын толқын ушын да, оң тәрептен келип түсетуғын толқын ушын да бирдей мәниске ийе болады. Бирақ бул R амплитудасы ушын мәниске ийе болмайды. Ҳақыйқатында да (24.7)-теңлик α ҳәм β комплексли санларының $R = \alpha/\beta$ қатнасы түринде жазылғанда (24.11)-қатнасқа сәйкес $\tilde{R} = -\alpha^*\beta$ түрине түрленеди.

25-мәселе. Туўры мүйешли потенциал шуқыр

$$V(x) = \begin{cases} -U, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a \end{cases} \tag{25.1}$$

туўры мүйешли потенциал шуқыр бар болған жағдай ушын байланысқан ҳалларды ҳәм усындай ҳаллар менен байланыслы болған меншикли мәнислерди табыңыз.

Шешими. Буннан бурын қарап шығылған еки мәселениң нәтийжелери оң мәнисли энергияға ийе ҳаллардың қәсийетлерин қыйыншылықсыз үйрениўге мүмкиншилик береди. Сонлықтан бизге байланысқан ҳалларға сәйкес келиўши терис энергиялар жағдайын қарап шығыў жеткиликли.

Потенциал $V(x) = V(-x)$ инверсиясына қарата инвариант. Сонлықтан шешимлердиң жуп ямаса тақ болыўы шәрт (20-мәселеге қараңыз).

$$E = -\frac{\hbar^2\varkappa^2}{2m}, \quad U = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}, \quad k^2 = k_0^2 - \varkappa^2 \tag{25.2}$$

деп есаплап бул шешимлерди былайынша жазыўға болады:

Жуп шешимлер:

$$u_+(x)=\begin{cases} A_+\cos kx, & 0\leqslant x\leqslant a,\\ A_+\cos ka e^{\varkappa(a-x)}, & x>a,\end{cases}\qquad (25.3а)$$
$$u_+(-x)=u_+(x),$$
$$\frac{1}{A_+^2}=\frac{1}{k}\left[ka+\sin ka\cos ka\right]+\frac{1}{\varkappa}\cos^2 ka;$$

Тақ шешимлер:

$$u_-(x)=\begin{cases} A_-\sin kx, & 0\leqslant x\leqslant a,\\ A_-\sin ka e^{\varkappa(a-x)}, & x>a,\end{cases}\qquad (25.3б)$$
$$u_-(-x)=-u_-(x),$$
$$\frac{1}{A_-^2}=\frac{1}{k}\left[ka-\sin ka\cos ka\right]+\frac{1}{\varkappa}\sin^2 ka.$$

Жоқарыда потенциал шуқырдың ишиндеги ҳәм сыртындағы амплитудалардың мәниси $u(x)$ функциясы $x=a$ ноқатында үзликсиз болатуғындай етип сайлап алынған. Нормировкалаўшы турақлы

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}|u|^2\,dx=1$$

шәртиниң жәрдеминде анықланған еди. u' дың $x=a$ ноқатында үзликсиз болыўы талабы және бир шәртти береди:

Жуп

$$-k\sin ka=-\varkappa\cos ka \qquad (25.4а)$$

ямаса

$$\operatorname{tg} ka=\frac{\varkappa}{k}; \qquad (25.4б)$$

Тақ

$$k\cos ka=-\varkappa\sin ka \qquad (25.5а)$$

ямаса

$$\operatorname{ctg} ka=-\frac{k}{\varkappa}. \qquad (25.5б)$$

(25.4)- ҳәм (25.2)-аңлатпалардың жәрдеминде нормировкаланған турақлылар ушын келтирип шығарылған аңлатпаларды еки жағдайда да бирдей теңлик алынатуғындай етип әпиўайыластырыў мүмкин:

$$\frac{1}{A_\pm^2}=a+\frac{1}{\varkappa}. \qquad (25.5)$$

(25.4)-теңлемелерден меншикли мәнислерди табыў ушын бул теңлемелердиң оң тәрепиндеги шаманы (25.2)-аңлатпа менен алмастырамыз ҳәм

$$C = k_0 a \tag{25.6}$$

белгилеўин киргиземиз. Нәтийжеде төмендегилерди аламыз:

Жуп:

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}{ka} \tag{25.7а}$$

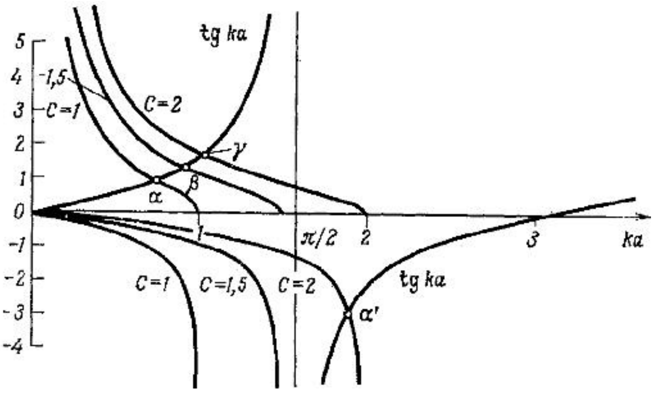
ҳәм тақ:

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{ka}{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}\,. \tag{25.7б}$$

Потенциалдың берилген мәнисинде C шамасы турақлы, оның мәниси шуқырдың өлшемлеринен $(C^2 \sim Ua^2)$ ғана ғәрезли. Ал (25.7а)- ҳәм (25.7б) теңлемелери ka ның барлық мәнислерин, соның менен бирге энергияның берилген өлшемлердеги шуқырда жүзеге келетуғын барлық

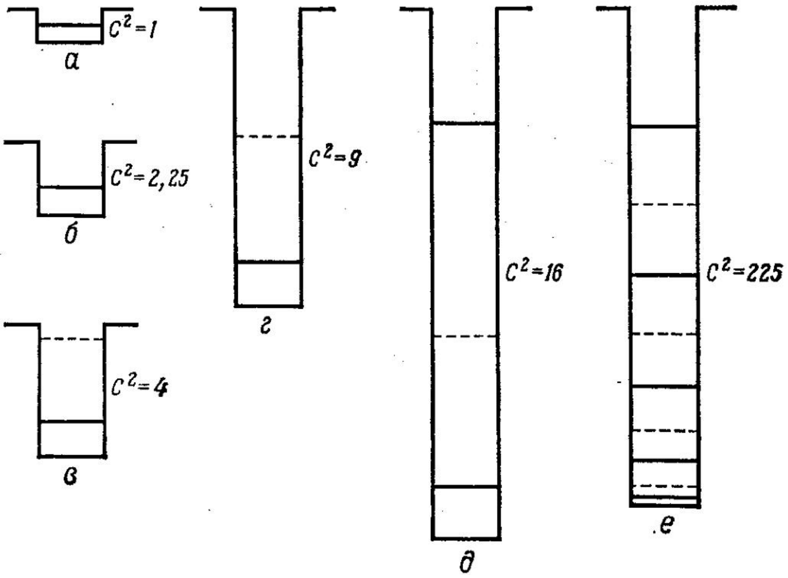
$$E = -U\left[1 - \left(\frac{ka}{C}\right)^2\right] \tag{25.}$$

мәнислерин анықлаўға мүмкиншилик береди.



7-сүўрет.
(25.7а) ҳәм (25.7б) теңлемелериниң графикалық шешими.
Сүўретте теңлемелердиң оң тәреплериниң C параметриниң ҳәр қандай мәнислериндеги иймекликлердиң тангенсоида $\operatorname{tg} ka$ менен кесилисиў ноқатлары көрсетилген. Оң ординаталарға ийе иймекликлер оң ҳалларға, ал терис ординаталарға ийе иймекликлер тақ ҳалларға тийисли.

7-сүўретте $\operatorname{tg} ka$, соның менен бирге (25.7а) ҳәм (25.7б) сүўреттиң оң бөлимлери ka шамасының функциясы сыпатында көрсетилген. Меншикли мәнислер соңғы еки иймекликтиң тангенсоида менен кесилисиў ноқатының абсциссасы сыпатында табылады. Бул иймекликлер шуқырдың өлшемлери тәрепинен анықланатуғын С параметринен ғәрезли. Мысалы С = 1 мәнисинен баслап биз жуп жағдайда α арқалы белгиленген бир кесилисиў ноқатын анықлаймыз. Тақ жағдайында болса биз бир де ноқатты ала алмаймыз. Демек бундай өлшемлерге ийе шуқырда оң жуплыққа ийе тек бир ғана байланысқан ҳал жүзеге келеди екен. Бул шуқыр сәйкес қәдди менен 8,а сүўретте келтирилген. Үлкен өлшемлерге ийе шуқыр ушын (С =1,5) 7-сүўреттеги иймекликлер β ноқатында кесилиседи. Тап бурынғыдай тек бир оң жуплыққа ийе ҳал болады (8,б сүўрет). Қала берсе–$(ka)_в > (ka)_\alpha$ теңсизлиги орынлағанлықтан $E_в < E_\alpha$ Егер шуқырдың өлшемин және де үлкейтсек (мысалы С = 2 шамасын алсақ), онда γ ноқатындағы кесилисиў оң жуплыққа ийе еле де төменирек ҳалды береди $(E_\gamma < E_в)$. Бирақ усы айтылғанлардан басқа оған α' ноқатындағы кесилисиўге сәйкес келетуғын тақ жуплыққа ийе ҳал қосылады (8-в сүўрет). Шуқырдың өлшемлериниң буннан былый өсиўи менен оның «сыйдырғышлығы» артады (8 *г—е сүўретлер*): С ның өсиўи менен оң ҳәм терис жуплыққа ийе гезеклесип жайласқан ҳаллардың сериясын пайда етип байланысқан ҳаллардың саны да сызықлы түрде өседи. Меншикли функциялар болса, олар улыўмалық қағыйдаға бағынады: оларда ноллер қаншама көп болса, онда олардың энергиялар шкаласындағы ийелеген орны соншама жоқары болады. Төрт төменги ҳаллардың толқын функциялары *C* = 5 болған жағдай ушын 9-сүўретте көрсетилген.

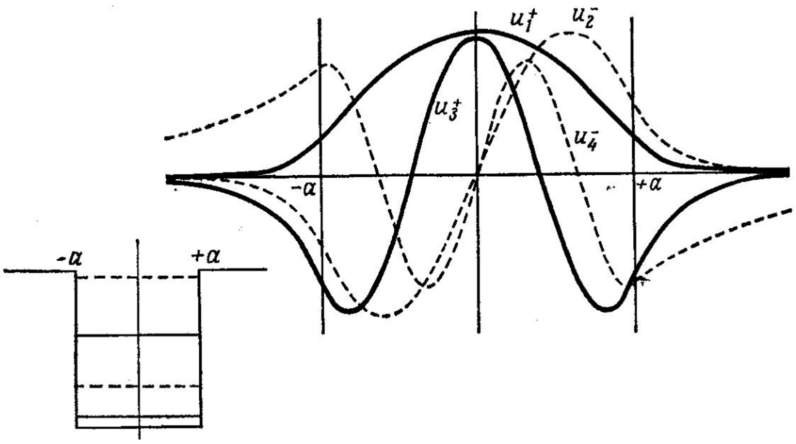


8-сүўрет. *C* характеристикалық параметриниң ҳәр қыйлы мәнислериндеги энергия қәддилери (*а* - *е*).
Тутас сызықлар – оң жуплыққа ийе ҳаллар, пунктир сызықлар – терис жуплыққа ийе ҳаллар.

Классикалық механикада бөлекше шуқырды шеклеп турған дийўаллар арасында ($x = \pm a$ ноқатлары арасында) энергияның қәлеген мәнисинде тербеле алған болар еди. Шуқырдың сыртында оның кинетикалық энергиясы терис мәниске ийе болған болар еди. Сонлықтан шуқырдан сырттағы область классикалық жақтан жетиўге болмайтуғын область болып табылады. Квантлық механиканда болса биз бундай қатаң түрде қойылған шеклеўге ийе болмаймыз. Шуқырдың сыртында бөлекшени табыўдың итималлығы P_i бирден (1 ден) киши болады:

$$P_i = \int_{-a}^{+a} |u|^2 \, dx = 1 - \frac{k^2}{k_0^2 (1 + \varkappa a)} \, . \qquad (25.9)$$

Солай етип бөлекшениң шуқырдың сыртында жайласыўының итималлығы нолге тең емес екен. Шуқырдан сырттағы шекли интервал ушын итималлық бөлекше менен шуқырдың арасындағы қашықлықтың үлкейиўи менен экспонециал түрде кемейеди.



9-сүўрет. C = 5 болған жағдай ушын энергия қәддилери ҳәм меншикли функциялар. Тутас сызықлар — оң жуплыққа ийе ҳаллар, пунктир сызықлар – тақ жуплыққа ийе ҳаллар.

26-мәселе. Еки шексиз дийўаллар арасындағы туўры мүйешли потенциал шуқыр

10-сүўретте келтирилген потенциал ушын Шредингер теңлемесиниң шешимлерин табыңыз. $l \to \infty$ шегиндеги оң мәнисли энергияға ийе ҳалларды айрықша түрде қараңыз.

Шешими. E < 0 болған «байланысқан» ҳалларды тезлик пенен қараўдан баслаймыз. (25.2)-теңлик пенен анықланған бурынғы k^2, k_0^2 ҳәм $\varkappa^2$ ларды ҳәм

$$\int_{-l}^{+l} |u|^2 dx = 1$$

нормировка шәртин пайдаланып толқын функцияларын төмендегидей етип жаза аламыз:

Жуп:

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ A_+ \dfrac{\cos ka \operatorname{sh} \varkappa (l-x)}{\operatorname{sh} \varkappa (l-a)}, & 0 \leqslant x \leqslant l, \end{cases} \tag{26.1а}$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k}\left[ka + \sin ka \cos ka\right] + \frac{\cos^2 ka}{\varkappa}\left[\operatorname{ctg} \varkappa (l-a) - \frac{\varkappa (l-a)}{\operatorname{sh}^2 \varkappa (l-a)}\right];$$

Тақ:

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ A_- \dfrac{\sin ka \operatorname{sh} \varkappa (l-x)}{\operatorname{sh} \varkappa (l-a)}, & a \leqslant x \leqslant l, \end{cases} \tag{26.1б}$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k}\left[ka - \sin ka \cos ka\right] + \frac{\sin^2 ka}{\varkappa}\left[\operatorname{cth} \varkappa (l-a) - \frac{\varkappa (l-a)}{\operatorname{sh}^2 \varkappa (l-a)}\right].$$

Бул жерде де 25-мәселедегидей $u(x)$ функциясының $x = a$ ноқатындағы үзликсизлигин есапқа алдық. Бирақ бул ноқаттағы $u'(x)$ туўындысының үзликсизлиги талабы бизге қосымша шәрт қояды:

Жуп

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\varkappa}{k} \operatorname{cth} \varkappa (l - a), \tag{26.2а}$$

тақ

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\varkappa} \operatorname{th} \varkappa (l - a). \tag{26.2б}$$

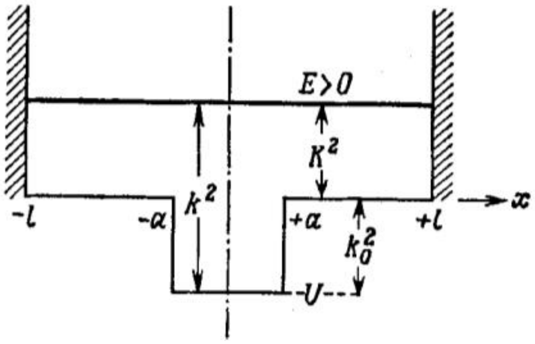
Бул аңлатпалар меншикли мәнислерди есаплауға мүмкиншилик береди. бирақ биз буннан былай майда-шүйделерине тереңлеспеймиз ҳәм

$$\varkappa (l - a) \gg 1$$

шәрти орынланғанда гиперболалық функцияның екеўиниң де 1 ге тезден умтылатуғынлығын аңғарамыз. Бундай жағдайда (26.2а) ҳәм (26.26) теңлемелери алдыңғы мәселениң меншикли мәнислер ушын жазылған (25.4а) ҳәм (25.46) аңлатпаларына, ал $1/A_{\pm}^2$ ушын (26.1а) ҳәм (26.16) нормировка қатнаслары сәйкес (25.3а) ҳәм (25.36) қатнасларына өтеди. Толқын функцияларының өзлери ушын жазылған (26.1а)- ҳәм (26.16)-аңлатпаларда $|x| < l$, бирақ $\varkappa(l - x) \gg 1$ шәрти орынланғанда, яғный тап солай етип (25.3а)- ҳәм (25.36)-толқын функцияларына және де қайтып келип

$$\frac{\operatorname{sh} \varkappa (l - x)}{\operatorname{sh} \varkappa (l - a)} \approx e^{\varkappa (a - x)}$$

деп алыўға болады.



10-сүўрет.

Оң мәнисли энергияларға ийе ҳаллар ҳаққындағы мәселе әдеўир кызық мәселе болып табылады. *l* диң шекли мәнислеринде, *l* диң өсиўи менен пайда болатуғын қәддилердиң тығыз системасын пайда ететуғын дискрет меншикли мәнислер бар болады. Бул система $l \to \infty$ шегинде континуумға өтеди. $E > 0$ ниң орнына жаңа

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}, \quad K^2 = -\varkappa^2 = k^2 - k_0^2 \tag{26.3}$$

өзгериўшисин киргизип биз толқын функцияларын мына түрде жазыўымыз мүмкин:

Жуп

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ A_+ \dfrac{\cos ka}{\sin K (l - a)} \sin K (l - x), & a \leqslant x \leqslant l, \end{cases} \tag{26.4а}$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] - \frac{\cos^2 ka}{K} \left[\operatorname{ctg} K (l - a) - \frac{K (l - a)}{\sin^2 K (l - a)} \right];$$

Тақ

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leqslant x \leqslant a, \\ A_- \dfrac{\sin ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leqslant x \leqslant l, \end{cases} \tag{26.4б}$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k}[ka - \sin ka \cos ka] - \frac{\sin^2 ka}{K}\left[\operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)}\right].$$

Бул аңлатпалар бойынша $u(x)$ функциясы енди үзликсиз, ал оның туўындысы $u'(x)$ болған функциясының үзликсизлиги және де шәрт береди:
жуп

$$\operatorname{tg} ka = \frac{K}{k} \operatorname{ctg} K(l-a), \tag{26.5а}$$

тақ

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{K} \operatorname{tg} K(l-a). \tag{26.5б}$$

Бул шәртлер меншикли мәнислерди есаплаўға мүмкиншилик береди. Бул шәртти пайдаланып биз $1/A_\pm^2$ шамалары ушын жазылған нормировкалаўшы аңлатпалардағы екинши қаўсырмалардағы $\operatorname{ctg} K(l-a)$ ны алмастыра аламыз. Нәтийжеде мына аңлатпаларды аламыз:

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k}[ka + \sin ka \cos ka] + \\ + (l-a)\left(\cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2}\sin^2 ka\right) - \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka \tag{26.6а}$$

ҳәм

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k}[ka - \sin ka \cos ka] + \\ + (l-a)\left(\sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2}\cos^2 ka\right) + \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka. \tag{26.6б}$$

Егер $l \to \infty$ шәрти орынланатуғын болса, онда бул аңлатпалардағы екинши ағза шексиз үлкейеди. Сонлықтан

$$\frac{1}{A_+^2} \approx l\left(\cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2}\sin^2 ka\right), \\ \frac{1}{A_-^2} \approx l\left(\sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2}\cos^2 ka\right). \tag{26.7}$$

Бирақ усы жағдайға қарамастан шуқырдың сыртындағы амплитуданы (26.4а) ҳәм (26.4б) аңлатпаларынан тиккелей алыўға болады:

$$\frac{\sin^2 K(l-a)}{A_+^2 \cos^2 ka} \longrightarrow l, \qquad \frac{\sin^2 K(l-a)}{A_-^2 \sin^2 ka} \longrightarrow l. \tag{26.8}$$

Сонлықтан $x > a$ шәрти орынланғанда толқын функциясы

$$u_\pm = \frac{1}{\sqrt{l}} \sin K(l-x) \tag{26.9}$$

түрине ийе болады. Бул жерде l шамасы елеге шекем толқын функциясының фазасына киреди. Бирақ оны меншикли мәнислерди анықлайтуғын (26.5а)- ҳәм (26.56)-теңлемелердиң жәрдеминде жоғалтыў мүмкин:

жуп

$$Kl = \operatorname{arctg}\left(\frac{\frac{K}{k} + \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka}{\operatorname{tg} ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} Ka}\right), \tag{26.9а}$$

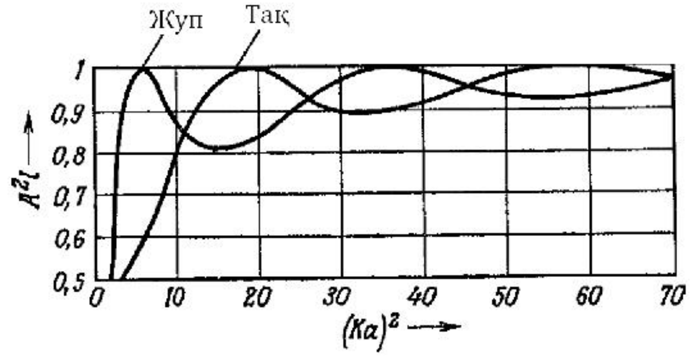
тақ

$$Kl = \operatorname{arctg}\left(\frac{\operatorname{tg} Ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka}\right). \tag{26.9б}$$

Бул толқын функциялар системасының ең көзге тасланатуғын айырмашылығы олардың энергия қәддилеринен ибарат. Энергия қәддилериниң тығызлығын l диң жүдә үлкен, бирақ шекли мәнислери ушын (26.5а) ҳәм (26.56) теңлемелерден табыў мүмкин. Kl өзгериўшиси кеңлиги π ге тең интервалда өзгергенде бул теңлемелердиң оң тәрепи ҳақыйқый көшер бойынша - ∞ тен + ∞ ке шекем өзгереди. Теңлемениң екеўиниң де бул интервалда тек бир шешими болады. Сонлықтан биз бир биринен орташа $\Delta K = \pi/(2l)$ шамасындағы қашықлықта жайласқан гезеклесип жайласқан жуп ҳәм тақ қәддилерге ийе боламыз (K өзгериўшиси шкаласында). (26.3)-аңлатпаға сәйкес энергия шкаласындағы қәддилер арасындағы орташа қашықлық

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{m} K \frac{\pi}{2l} = \frac{\pi}{l} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} E} \tag{26.10}$$

шамасына тең. Солай етип избе-из жайласқан қәддилер арасындағы орташа кашықлық тек $E^{1/2}$ шамасына пропорционал ҳәм нормировкалаўшы интервалдың узынлығына кери пропорционал өседи екен. Демек $l \to \infty$ шегинде дискрет энергия спектри үзликсиз спектрге айланады екен.



11-сүўрет.
Үзликсиз спектрдеги виртуаллық ҳаллар.

$k_0a \equiv C = 2$ болған жағдай ушын амплитуданың өзгериў өзгешелиги 11-сүўретте келтирилген. Өлшем бирлигине ийе емес A^2l шамасы шуқырдың сыртындағы барлық областта бирдей мәниске ийе, ал l шамасы үлкен болғанда шуқырдың ишиндеги амплитуданың квадратының өлшемин береди. Бул шаманың $(Ka)^2$ шамасынан ғәрезлигиниң графиги, яғный бирликсиз шамалардағы энергияның мәнисинен ғәрезлиги (26.7)-формуланың жәрдеминде қурылған. Энергияның избе-из мәнислериниң шексиз көп саны бар. Олар ушын A^2l шамасы 1 ге тең максималлық мәнисти қабыллайды. Максимумлар арасында энергия үлкен болған сайын ҳәлсиз көринетуғын амплитуданың минимумлары жатады (11-сүўреттеги ордината көшериниң төменги жартысының көрсетилмегенлигине итибар бериңиз). Амплитуданың максимумына сәйкес келетуғын энергияларда энергияның мәниси оң болса да биз қарап атырған ҳаллар байланысқан ҳаллардың базы бир белгилерин еле де сақлайды. Себеби бул ҳалларда шуқыр ийеленген областтағы мүмкин болған толқын функцияларының максималлық концентрациясы алынады. Усындай себепке байланыслы виртуаллық ҳаллар ҳаққында гәп етиледи (терис энергияға ийе «ҳақыйқый» байланысқан ҳалларға қарама-қарсы мәнисте).

28-мәселе. Дәўирли потенциал

Дәўирли потенциал бар болған жағдайдағы толқын функциялары менен энергия спектри арасындағы улыўмалық қатнасларды алыңыз.

Шешими. Егер $V(x)$ арқалы дәўири a шамасына тең дәўирли функция берилген болса, онда Шредингер теңлемеси a еселенген барлық трансляцияларға қарата инвариант болады:

$$V(x+a)=V(x), \quad x\longrightarrow x+na, \quad n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \ldots\ . \tag{28.1}$$

$u_1(x)$ ҳәм $u_2(x)$ арқалы Шредингер теңлемесиниң сызықлы ғәрезсиз шешимлери болсын. Бундай жағдайда $u_1(x+a)$ ҳәм $u_2(x+a)$ функциялары да сол теңлемениң шешимлери болады. Қәлеген шешимди $u_1(x)$ ҳәм $u_2(x)$ функцияларының сызықлы комбинациясы түринде қараўға болғанлықтан, бул жағдай $u_1(x+a)$ ҳәм $u_2(x+a)$ функциялары ушын да орынлы болады:

$$\begin{aligned} u_1(x+a) &= C_{11}u_1(x)+C_{12}u_2(x), \\ u_2(x+a) &= C_{21}u_1(x)+C_{22}u_2(x). \end{aligned} \tag{28.2}$$

Енди усы шешимлердиң ишинде бир бири менен

$$\psi(x+a)=\lambda\psi(x) \tag{28.3}$$

аңлатпасының жәрдеминде байланысқан ψ_1 ҳәм ψ_2 шешимлери де бар болатуғынлығын (Флоке теоремасы) дәлиллеўге болады. Бул аңлатпада λ арқалы турақлы көбейтиўши белгиленген. Бул жағдайда

$$\psi(x+na)=\lambda^n\psi(x), \quad n=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \ldots \tag{28.3a}$$

шәртиниң орынланатуғынлығы айқын. Биз излеген дәлиллеў мына түрге ийе болады:

$$\psi(x)=Au_1(x)+Bu_2(x) \tag{28.4}$$

ҳәм (28.2)-аңлатпаға сәйкес

$$\psi(x+a)=(AC_{11}+BC_{21})\,u_1(x)+(AC_{12}+BC_{22})\,u_2(x).$$

Егер

$$AC_{11} + BC_{21} = \lambda A, \quad AC_{12} + BC_{22} = \lambda B \tag{28.5}$$

теңликлери орынланатуғын болса, онда соңғы аңлатпа $\lambda\psi(x)$ шамасына тең болады.

A ҳәм *B* шамаларына қарата (28.5)- еки бир текли сызықлы алгебралық теңлемелер системасы тек ғана

$$\begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{28.6}$$

детерминанты нолге тең болғанда ғана қурамалы емес шешимлерге ийе болады. Бул λ шамасына қарата квадрат теңлеме болып, оның түбирлери λ_1 менен λ_2 ге еки ψ_1 ҳәм ψ_2 функциялары сәйкес келеди.

(28.3)-формуладан

$$D = \psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1'$$

Вронский детерминантының (Вронский детерминанты деп $\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1'$ түриндеги детерминантқа айтамыз)

$$D(x + a) = \lambda_1\lambda_2 D(x)$$

қантасын қанаатландыратуғынлығын көриуге болады. Грин теоремасы бойынша Вранский детерминанты x тан ғәрезли емес, сонлықтан

$$\lambda_1\lambda_2 = 1 \tag{28.7}$$

қатнасы келип шығады.

λ_1 менен λ_2 параматрлери ҳаққында толығырақ мағлыўматларды (28.3а) теңлигин қарап алыўға болады. Мейли $|\lambda| > 1$ болсын. Бундай жағдайда толқын функциясы ψ диң амплитудасы $x \longrightarrow \infty$ та шексиз үлкейеди ҳәм $x \longrightarrow -\infty$ де шексиз кемейеди. Егер $|\lambda| < 1$ теңсизлиги орынланса қарама-қарсы жағдай орын алады. Бундай шешимлер нормировкаланбайды. Сонлықтан физикалық мәнислерге ийе шешимлер тек $|\lambda| = 1$ теңлиги орынланған жағдайда ғана, яғный

$$\lambda_1 = e^{iKa} \text{ ҳәм } \lambda_2 = e^{-iKa} \tag{28.8}$$

орын алады. Бул аңлатпаларда *K* арқалы ҳақыйқый шама белгиленген. $e^{2\pi in} = 1$ болғанлықтан *K* шамасының

$$-\frac{\pi}{a} \leqslant K \leqslant \frac{\pi}{2} \tag{28.9}$$

интервалында жатқан мәнислери менен шеклениўге болады. Бул жағдай бизге мүмкин болған барлық толқын функцияларын береди. Солай етип $\psi(x)$ тың барлық шекленген шешимлери ушын

$$\psi(x + na) = e^{inKa}\psi(x) \tag{28.10}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул жағдай $\psi(x)$ функциясы тек

$$\psi(x)=e^{iKx}u_K(x) \tag{28.11}$$

түрге ийе болғанда ғана жүзеге келеди. Бул аңлатпада $u_K(x)$ арқалы дәўирли функция, яғный

$$u_K(x)=u_K(x+a) \tag{28.12}$$

түриндеги функция белгиленген. Бул нәтийже Блох теоремасының мазмунын қурайды.

Енди энергия спектри мәселесине келемиз. $0\leqslant x\leqslant a$ интервалында (28.4) аңлатпасы ушын исленгендей қандай да u_1 ҳәм u_2 шешимлеринен ψ ушын шешимди жазыўымыз керек. Дәўирлиликтиң қоңсы $a\leqslant x\leqslant 2a$ интервалы ушын (28.10)-формулаға сәйкес

$$\psi(x)=e^{iKa}\left[Au_1(x-a)+Bu_2(x-a)\right] \tag{28.13}$$

формуласын аламыз. Бунда аргументтиң $x-a$ мәниси алдыңғы интервалға түседи. Бул интерваллардың шегарасында, яғный $x=a$ ноқатында (28.4) ҳәм (28.13) аңлатпалардың өзлери де, олардың туўындылары да бир бирине сәйкес келиўи керек:

$$\begin{aligned} Au_1(a)+Bu_2(a)&=e^{iKa}\left[Au_1(0)+Bu_2(0)\right], \\ Au_1'(a)+Bu_2'(a)&=e^{iKa}\left[Au_1'(0)+Bu_2'(0)\right]. \end{aligned} \tag{28.14}$$

Бул *A* ҳәм *B* ға қарата бир текли теңлемелер системасы детерминанты нолге тең болған жағдайда ғана шешимге ийе болады:

$$\begin{vmatrix} u_1(a)-e^{iKa}u_1(0) & u_2(a)-e^{iKa}u_2(0) \\ u_1'(a)-e^{iKa}u_1'(0) & u_2'(a)-e^{iKa}u_2'(0) \end{vmatrix}=0.$$

Детерминантты ашып биз ең ақырында

$$\cos Ka=\frac{[u_1(0)\,u_2'(a)+u_1(a)\,u_2'(0)]-[u_2(0)\,u_1'(a)+u_2(a)\,u_1'(0)]}{2\,(u_1u_2'-u_2u_1')} \tag{28.15}$$

қатнасына келемиз. Бул аңлатпаның бөлиминде аргументтиң қәлеген мәнисинен алынған вронскиан тур (вронскиан константа болғанлықтан оның айқын мәнисин көрсетиў шәрт емес).

(28.15)-теңлеме меншикли мәнислердиң бар болыўы шәрти болып табылады. Егер теңлемениң оң тәрепиниң абсолют шамасы бирден артық болмаса бул теңлемениң жәрдеминде K шамасын есаплаўға болады. Бул шәртти қанаатландыратуғын энергияның мәнислериниң көп санлы интерваллары бар. Соның менен бирге бул шәрт қанаатландырылмайтуғын да энергияның көп санлы интерваллары бар. Солай етип энергия спектри айырым қәддилерден турмайды, ал руқсат етилген ҳәм қадаған етилген энергия зоналардың гезеклескен избе-излигинен турады. (28.15)-аңлатпаға сәйкес энергия зоналарының шегарасы $\cos Ka=\pm 1$ қатнасынан анықланады.

Ескертиў: u_1 ҳәм u_2 шешимлерин сызықлы ғәрезсиз болған қәлеген v_1 ҳәм v_2 сызықлы ғәрезсиз болған қәлеген шешимлери жубы менен алмастырыўға болатуғын болғанлықтан (28.15)-теңлемени тап сондай табыс пенен v

функциясы арқалы да жазыўға болады. Бирақ ол да тап сол энергия зоналарына алып келиўи керек. Бунның дурыслығына (28.15)-теңлемеге

$$u_1=c_{11}v_1+c_{12}v_2, \qquad u_2=c_{21}v_1+c_{22}v_2$$

аңлатпаларын қойып исениўге болады. Қурамалы емес есаплаўлар v функциясын пайдаланғанда егер $\|c_{ik}\|$ детерминанты нолге айланбайтуғын болғанда u функциясын пайдаланғанда алынған нәтийжелердиң алынатуғынлығын көрсетеди.

29-мәселе. Дирак потенциал тарағы

Дирактың δ-функциясының избе-излигинен туратуғын дәўирли потенциал берилген (қоңсылас айрықша ноқатлар арасындағы интервал турақлы ҳәм a шамасына тең):

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{m}\Omega\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x+na). \tag{29.1}$$

Энергияның руқсат етилген мәнислеринен туратуғын зоналарды анықлаңыз.

Шешими.

$$u_1(x)=e^{ikx} \text{ ҳәм } u_2(x)=e^{-ikx} \tag{29.2}$$

түриндеги фундаменталлық шешимлерден баслаймыз.

Егер $0\leqslant x\leqslant a$ интервалында шешим

$$u(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \tag{29.3}$$

түрине ийе болса, онда қоңсылас $a\leqslant x\leqslant 2a$ интервалында шешим (28-мәселеге қараңыз)

$$u(x)=e^{iKa}\left[Ae^{ik(x-a)}+Be^{-ik(x-a)}\right] \tag{29.4}$$

түринде болады. $x=a$ ноқатында

$$\begin{gathered} u(a+0)=u(a-0), \\ u'(a+0)=u'(a-0)+2\Omega u(a) \end{gathered} \tag{29.5}$$

шегаралық шәртлериниң орынланыўы керек. Сонлықтан

$$e^{iKa}(A+B)=Ae^{ika}+Be^{-ika} \tag{29.6а}$$

ҳәм

$$ike^{iKa}(A-B)=ik\left(Ae^{ika}-Be^{-ika}\right)+2\Omega\left(Ae^{ika}+Be^{-ika}\right). \tag{29.6б}$$

(29.6а) ҳәм (29.6б) теңлемелер A ҳәм B шамаларына қарата бир текли сызықлы теңлемелер системасы болып табылады. Оның детерминанты нолге айланыўы керек. Әпиўайы түрлендириўлер

$$\cos Ka = \cos ka + \frac{\Omega}{k}\sin ka \qquad (29.7)$$

теңлигин береди. Демек энергияның руқсат етилген зоналары

$$\left|\cos ka + \frac{\Omega}{k}\sin ka\right| \leqslant 1 \qquad (29.8)$$

ямаса

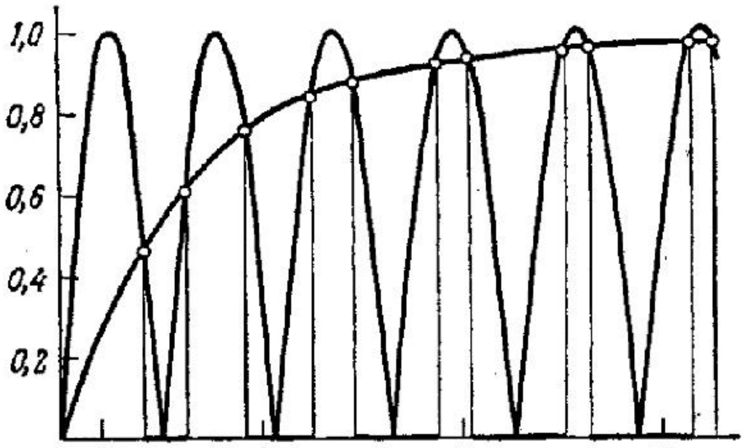
$$\left|\cos\left(ka - \operatorname{arctg}\frac{\Omega a}{ka}\right)\right| \leqslant \frac{1}{\sqrt{1+(\Omega a/ka)^2}} \qquad (29.9)$$

теңсизлигиниң жәрдеминде, ал энергияның меншикли мәнислери

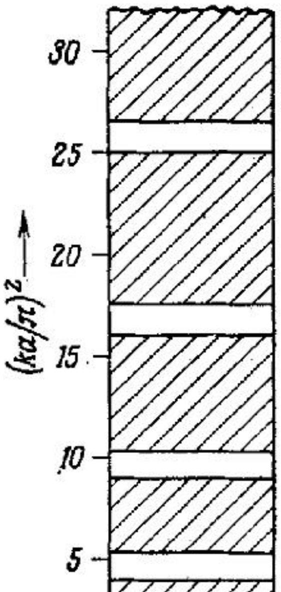
$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}(ka)^2 \qquad (29.10)$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

15—18 сүўретлерде $\Omega a = 4$ болған жағдай ушын орынланған есаплаўлардың нәтийжелери келтирилген. (29.9)-теңсизликтиң оң ҳәм шеп тәрепинде турған ka шамасының функциялары15-сүўретте көрсетилген.

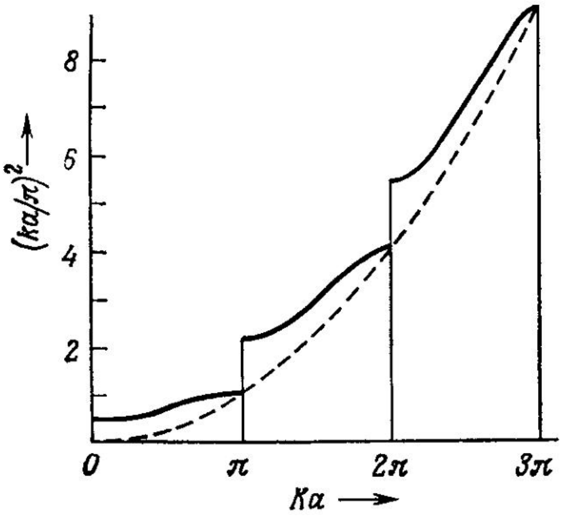


15-сүўрет. Зоналық структураны графикалық анықлаў

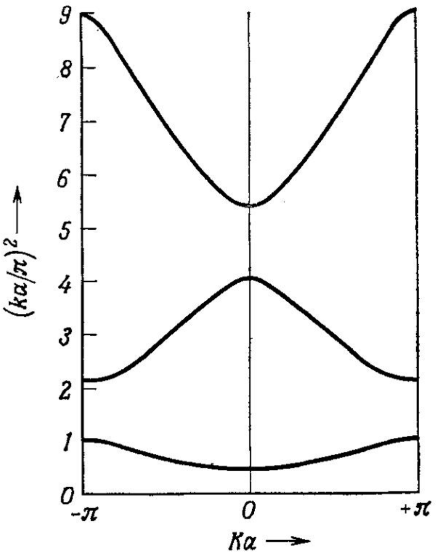


16-сүўрет. Дирак потенциал тарағы орын алғандағы зоналық структура.

Сәйкес иймекликлердиң кесилисиў ноқатлары киши дөңгелеклер менен аңлатылған, ал (29.9)-теңсизлик орынланатуғын интерваллар ka көшеринде жуўан сызықлар менен белгиленген.



17-сүўрет. Биринши үш зона ушын (Бриллюэнниң бир өлшемли зоналары) энергияның Ka шамасынан ғәрезлиги. Пунктир сызық пенен еркин бөлекшениң энергиясына жуўап беретуғын парабола белгиленген.



18-сүўрет. Энергияның Ka өзгериўшисинен ғәрезлиги.

Зоналардың жоқарғы шегарасында π еселенген ноқатлар сәйкес келеди. (29.7)-теңлемеге сәйкес бул ноқатларда $\cos Ka = \cos ka$. 15-фигураның жәрдеминде энергиялық шқалада табылған зоналардың ийелеген орынлары 16-сүўретте келтирилен. Бул сүўретте руқсат етилген энергия зоналары штрихланған. Энергияның артыўы менен руқсатетилген зоналар кеңейеди. Сонлықтан энергия спектри үзликсиз спектрге жақынласады. Бирақ сонда да руқсат етилген зоналар үзликсиз спектрге толығы менен айланбайды: ҳәтте ең жоқары энергияларда да барлық ўақытта жоқарыдан $ka = n\pi$ ноқатларына тийисетуғын қадаған етилген зоналар болады. 17- ҳәм 18-сүўретлерде биринши үш зона ушын энергияның (өлшеми жоқ бирликлердеги) Ka шамасынан ғәрезлиги көрсетилген. 17-сүўретте Ka өзгериўшиси бир зонадан екинши зонаға өткенде монотонлы түрде өседи, ал 18-сүўретте болса оның өзгериси $-\pi \leqslant Ka \leqslant \pi$ интервалы менен шекленген. 17-сүўреттеги пунктир сызық руқсат етилген зоналардың жоқарғы шегараларына сәйкес келетуғын ноқатынан өтетуғын $K = k$ параболасын көрсетеди.

Келтирилген сүўретлердиң барлығы да Ωα = 4 болған жағдайға тийисли. Сонлықтан сол сүўретлер бойынша дийўалдың өткизгишлигиниң энергия спектрине тәсири ҳаққында ҳеш нәрсе айтыўға болмайды. Ωα ның киши мәнислери ушын (29.9)теңсизликтиң оң тәрепи 1 ге тезирек жақынласады ҳәм 15-сүўреттеги сәйкес иймеклик косинусоиданы усы косинусоиданың максимумына жақын ноқатларда кеседи. Бул қадаған етилген зоналардың қалыңлығының кемейетуғынлығын көрсетеди. Руқсат етилген зоналардың жоқарғы шегарасының ийелейтуғын орны ($ka = n\pi$ ноқатлары) Ωa дан ғәрезсиз болғанлықтан усы шаманың киширейиўи менен 16-сүўретте бул зоналардың төменги шегараларының ғана төменге қарай жылжыйтуғынлығы көринип тур. $\Omega a = 0$ теңлиги орынланғанда қадаған етилген зоналар пүткиллей жоғалады. Усының менен бирге бизиң потенциалымыз да жоғалады. Бул жағдайда биз еркин қозғалысқа ҳәм соған сәйкес үзликсиз спектрге келемиз. Екинши тәрептен, егер $\Omega a \to \infty$ шәрти орынланатуғын болса руқсат етилген зоналар $ka = n\pi$ дискрет қәддилерге айланады. Бул жағдайда дийўаллар потенциал шуқырларды бир биринен толығы менен изоляциялайды ҳәм биз қарап атырған спектр 18-мәселениң спектрине айланады. Тек ғана биз ҳәзир қарап атырған мәселеде дийўаллар арасындағы қашықлық a шамасына тең, ал 18-мәселеде дийўаллар арасындағы кашықлық $2a$ ға тең еди.

30-мәселе. Гармоникалық осциллятор

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \tag{30.1}$$

осцилляторлық потенциалы бар жағдайдағы меншикли мәнислерди ҳәм меншикли функцияларды табыңыз.

Шешими.

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ ҳәм } \lambda = \frac{m\omega}{\hbar} \tag{30.2}$$

белгилеўлерин киргизиў арқалы Шредингер теңлемесин былайынша жазыўға болады

$$\frac{d^2u}{dx^2} + (k^2 - \lambda^2 x^2)\, u = 0. \tag{30.3}$$

Бул дифференциаллық теңлемениң шешимлери $|x| \gg k/\lambda$ шәрти орынланғанда $\exp(\pm{}^1/_2\lambda x^2)$ нызамы бойынша өзгереди. Егер

$$u(x) = e^{-{}^1/_2\lambda x^2}\, v(x) \tag{30.4}$$

деп есаплап экспонентаны $u(x)$ функциясынан айырып алатуғын болсақ, онда

$$v'' - 2\lambda x v' + (k^2 - \lambda)\, v = 0 \tag{30.5}$$

теңлемесин қанаатландыратуғын $v(x)$ функциясы полином болады ямаса $e^{\lambda x^2}$ функциясына пропорционал болады. (30.5)-теңлемени

$$v(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j \tag{30.6}$$

қатарға жайыўының жәрдеминде шешип

$$a_{j+2} = \frac{\lambda(2j+1) - k^2}{(j+2)(j+1)}\, a_j \tag{30.7}$$

рекуррентли қатнасын аламыз.

$j \to \infty$ шегинде $e^{\lambda x^2}$ функциясын дәреже бойынша қатарға жайыўға сәйкес келетуғын $a_{j+2} = (2\lambda/j)\, a_j$ асимптоталық қатнасы орын алады. Солай етип егер (30.6)-қатары ең ақырғы ағзада үзилиске түспейтуғын болса (30.4) шешимин нормировкалаўға болмайды екен. Ал (30.6)-қатардың ең ақырғы ағзада үзилиске түсиўи $a_{n+2} = 0$ болғанда, яғный

$$k^2 = \lambda(2n+1)$$

теңлиги орынланғнада орын алады. Бул жағдайда (30.2)-аңлатпаға сәйкес

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots \tag{30.8}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

$u_n(x)$ меншикли функцияларын (30.7)-қатнастың жәрдеминде алыўға ҳәм

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^2(x)\,dx = 1 \tag{30.9}$$

шәрти менен нормировкалаў мүмкин.

Дәслепки меншикли функциялардың бир қаншасы төменде келтирилген:

$$\begin{aligned}
u_0 &= C_0 e^{-1/_2\lambda x^2}, \\
u_1 &= C_1 x e^{-1/_2\lambda x^2}, \\
u_2 &= C_2\left(1 - 2\lambda x^2\right) e^{-1/_2\lambda x^2}, \\
u_3 &= C_3\left(x - \frac{2}{3}\lambda x^3\right) e^{-1/_2\lambda x^2}, \\
u_4 &= C_4\left(1 - 4\lambda x^2 + \frac{4}{3}\lambda^2 x^4\right) e^{-1/_2\lambda x^2}, \\
u_5 &= C_5\left(x - \frac{4}{3}\lambda x^3 + \frac{4}{15}\lambda^2 x^5\right) e^{-1/_2\lambda x^2},
\end{aligned} \tag{30.10}$$

ал сәйкес нормировкалаў коэффициентлери төменде келтирилген:

$$\begin{gathered}
C_n = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{1/4} c_n, \quad c_0 = 1, \quad c_1 = \sqrt{2\lambda}, \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\
c_3 = \sqrt{3\lambda}, \quad c_4 = \sqrt{\frac{3}{8}}, \quad c_5 = \sqrt{\frac{15\lambda}{4}}.
\end{gathered} \tag{30.11}$$

Ең дәслепки үш меншикли функциялар 19-сүўретте көрсетилген.

Меншикли функциялардың анық жуплыққа ийе болатуғынлығын аңсат көриўге болады. Потенциалдың симметрияға ийе болыўының себебинен $V(-x) = V(x)$ шәрти орыналанады, ал $u_n(-x)$ функциясы $u_n(x)$ функциясы менен бир қатарда дифференциал теңлемениң тап сол (30.8)-меншикли мәниске сәйкес келетуғын шешими болып табылады. Айныў (вырождение) болмағанлықтан сол еки шешим бир биринен тек турақлы f көбейтиўши менен ғана айрылады. Усының менен бирге нормировка шәртинен $|f|^2 = 1$ теңлигине ийемиз. x тың белгисин және бир рет өзгертсек биз дәслепки шешимге қайтып келемиз, сонлықтан $f^2 = 1$ ямаса $f = \pm 1$. Демек қәлеген меншикли функция я жуп, я тақ болады деген сөз.

Егер (30.5)-теңлемеге x тың орнына

$$y = \lambda x^2 \tag{30.12}$$

жаңа өзгериўшисин киргизсек бул факттиң дурыслығын тиккелей тексерип көриўге болады. Бул жағдайда $v(y)$ функциясы

$$yv'' + \left(\frac{1}{2} - y\right)v' + \left(\frac{k^2}{4\lambda} - \frac{1}{4}\right)v = 0$$

түриндеги айныған гипергеометриялық функция ушын дифференциал теңлемени қанаатландырады. Егер

$$a=\frac{1}{4}-\frac{k^2}{4\lambda}=\frac{1}{4}-\frac{E}{2\hbar\omega} \tag{30.13}$$

түриндеги белгилеўди қабыл етсек бул теңлемениң улыўмалық шешими

$$v=A\,{}_1F_1\left(a,\ \frac{1}{2};\ y\right)+By^{1/2}\,{}_1F_1\left(a+\frac{1}{2},\ \frac{3}{2};\ y\right) \tag{30.14}$$

түринде болады. Айныған геометриялық қатар (вырожденный геометрический ряд) ${}_1F_1$ пүтин функция болғанлықтан (30.14)-шешимдеги x өзгериўшисине қатнасы бойынша биринши қосылыўшы жуп, ал екинши қосылыўшы тақ. $y\to\infty$ шегинде еки қосылыўшыда $e^y y^{a-1/2}$ сыяқлы тарқалады ҳәм егер қатарлар жоғалмаса ҳәм үзилиске түспесе шешимди нормировкалаўға болмайды. Биринши аргументи пүтин терис санға тең болса гипергеометриялық қатар үзиледи. Сонлықтан бизде еле де еки мүмкиншилик бар. Егер

$$a=-n \quad \text{ямаса} \quad E_{2n}=\hbar\omega\left(2n+\frac{1}{2}\right) \tag{30.15а}$$

болса биринши қатар үзиледи ҳәм меншикли функциялар ушын

$$u_{2n}(x)=A\,{}_1F_1\left(-n,\ \frac{1}{2};\ \lambda x^2\right)e^{-1/2\lambda x^2} \tag{30.16а}$$

функциясын аламыз.

Егер

$$a+\frac{1}{2}=-n \quad \text{ямаса} \quad E_{2n+1}=\hbar\omega\left(2n+\frac{3}{2}\right) \tag{30.15б}$$

болса, онда екинши қатар үзиледи ҳәм меншикли функция мынаған тең болады:

$$u_{2n+1}(x)=Bx\,{}_1F_1\left(-n,\ \frac{3}{2};\ \lambda x^2\right)e^{-1/2\lambda x^2}. \tag{30.16б}$$

Бул нәтийжелер меншикли мәнислер ушын алынған (30.8)- ҳәм меншикли функциялар ушын алынған (30.10)-формула менен толық сәйкесликке ийе.

(30.16а)- ҳәм (30.16б)-теңликлер менен алынған көп ағзалыларды *Эрмит полиномлары деп атайды*. Айныған гипергеометриялық функция менен олар

$$\begin{gathered}H_{2n}(\xi)=(-1)^n\frac{(2n)!}{n!}\,{}_1F_1\left(-n,\ \frac{1}{2};\ \xi^2\right),\\ H_{2n+1}(\xi)=(-1)^n\frac{(2n+1)!}{n!}\,2\xi\,{}_1F_1\left(-n,\ \frac{3}{2};\ \xi^2\right)\end{gathered} \tag{30.17}$$

қатнаслары менен байланысқан. Усының менен бир қатарда және

$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \tag{30.18}$$

формуласы орын алады.

Солай етип улыўма жағдайда нормировкаланған меншикли функциялар [(30.9)-аңлатпаға қараңыз]

$$u_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\right)^{1/2} H_n(\sqrt{\lambda}\,x)\,e^{-1/2\lambda x^2} \qquad (30.19)$$

түрине ийе болады.

(30.19)-формула бойынша нормировканы есаплаў ушын төмендегидей қағыйдадан пайдаланамыз. Меншикли функцияны

$$u_n = C_n e^{-1/2\xi^2} H_n(\xi); \quad \xi = \sqrt{\lambda}\,x$$

түринде жазамыз. Бундай жағдайда (30.9)-шәртке байланыслы

$$C_n^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}[H_n(\xi)]^2\,d\xi = \sqrt{\lambda}$$

теңлигиниң орынланыўы керек. Енди $H_n(\xi)$ полиномларының бирин оның (30.18)-аңлатпасы менен алмастырамыз. Буннан кейин алынған

$$(-1)^n C_n^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)\,\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}\,d\xi = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасын бөлеклерге бөлип *n* рет интегралласақ ең ақырында

$$C_n^2 \int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}\,\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n}\,d\xi = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасын аламыз. $H_n(\xi)$ шамасы ξ ге қарата n-дәрежели көп ағзалы болғанлықтан *n* рет интеграллағаннан кейин ξ диң тек ең жоқарғы дәрежесиниң үлеси сақланып қалады:

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n + \ldots,$$

яғный

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!$$

ҳәм (30.19)-формула менен толық сәйкес келетуғын

$$C_n^2 \cdot 2^n n!\,\sqrt{\pi} = \sqrt{\lambda}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

37-мәселе. Потенциал текше (потенциальная ступенька)

$$V(x) = \frac{1}{2} V_0 \left(1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a}\right) \tag{37.1}$$

потенциал текшесиниң майданындағы шағылыстырыў коэффициентин анықлаңыз.

Шешими. Биз қарап атырған потенциал $x = -\infty$ ноқатында $V = 0$ ден $x = +\infty$ ноқатында $V = V_0$ ге шекем өседи. Усындай өсиўдиң барысында потенциалдың ең күшли өсиўи $-2a < x < 2a$ интервалында жүзеге келеди:

$$V(-2a) = 0{,}119 V_0 \text{ ҳәм } V(+2a) = 0{,}881 V_0. \tag{37.2}$$

Шеп тәрептен келип түсиўши толқынды тәрийиплейтуғын толқын функциясы

$$x \longrightarrow -\infty \text{ шегинде } u = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \tag{37.3}$$
$$u = \begin{cases} Ce^{-Kx}, \text{ егер } x \longrightarrow +\infty \text{ шегинде } E < V_0, \\ Ce^{ik'x}, \text{ егер } x \longrightarrow +\infty \text{ шегинде } E > V_0 \end{cases}$$

асимптоталық түрге ийе болыўы керек.

$|R|^2$ шамасы биз излеп атырған шағылыстырыў коэффициенти болып табылады. Потенциал (37.1) болған

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(x)\right] u = 0 \tag{37.4}$$

Шредингер теңлемесин шешиў ушын x өзгериўшисиниң орнына жаңа

$$y = (1 + e^{x/a})^{-1} \tag{37.5}$$

өзгериўшисин пайдаланамыз. Буннан кейин

$$\varkappa^2 = k^2 a^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E, \quad \lambda^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 \tag{37.6}$$

белгилеўлерин пайдаланып ҳәм

$$\frac{d}{dx} = -\frac{1}{a} y(1-y) \frac{d}{dy}, \quad 1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a} = 2(1-y)$$

екенлигин есапқа алып

$$y(1-y) \frac{d^2u}{dy^2} + (1-2y) \frac{du}{dy} + \left[\frac{\varkappa^2}{y(1-y)} - \frac{\lambda^2}{y}\right] u = 0 \tag{37.6}$$

теңлемесин аламыз.

Ескертиў: (37.6) түриндеги теңлемени ҳәзирги заман программаластырыў тиллеринде аналитикалық жоллар менен аңсат шешиў мүмкин. Мысалы Mathematica 7 for students тилин пайдаланғанда шегаралық шәртлерди бермей теңлемени шешиў ушын

$$\mathrm{DSolve}[y*(1-y)*u''[y]+(1-2y)*u'[y]+(\frac{k^2}{y*(1-y)}-\frac{\lambda^2}{y})*u[y]==0,u[y],y]$$

түриндеги аңлатпа жазылады. Ал компьютер мынадай шешимди береди:

$$\begin{gathered}u[y]\to\ -1^{\ -2\ \overline{-k^2+\lambda^2}}e^{\frac{1}{2}\ -\mathrm{Log}\ -1+y\ -\mathrm{Log}\ y}\quad -1+y^{\ \frac{1}{2}\ 1-2ik}\ y^{1+\frac{1}{2}\ -1-2\ \overline{-k^2+\lambda^2}}\ C\ 2\\ \mathrm{Hypergeometric2F1}\ -ik-\ \overline{-k^2+\lambda^2},1-ik-\ \overline{-k^2+\lambda^2},1-2\ \overline{-k^2+\lambda^2},y\ +\\ e^{\frac{1}{2}(-\mathrm{Log}[-1+y]-\mathrm{Log}[y])}(-1+y)^{\frac{1}{2}(1-2ik)}y^{\frac{1}{2}(1+2\ \overline{-k^2+\lambda^2})}C[1]\\ \mathrm{Hypergeometric2F1}[-ik+\ \overline{-k^2+\lambda^2},1-ik+\ \overline{-k^2+\lambda^2},1+2\ \overline{-k^2+\lambda^2},y]\end{gathered}$$

Жоқарыда (37.6) түриндеги теңлемениң шешиминде Hypergeometric функцияның пайда болатуғынлығы көринип тур. Екиншиден ҳәзирги заман компьютерлерин қолланғанда квантлық механиканың мәселелериниң аңсат ҳәм тез шешилетуғынлығы айқын көринеди.

(37.6)-дифференциаллық теңлеме үш айрықша ноқатқа ийе болады: y = 0, 1, ∞ ҳәм сонлықтан оның шешими гипергеометриялық функция арқалы аңлатылады.

$$u\,(y)=y^{\nu}\,(1-y)^{\mu}\,f\,(y) \tag{37.7}$$

подстановкасының жәрдеминде, бул подстановкада

$$\nu^2=\lambda^2-\varkappa^2,\quad \mu^2=-\varkappa^2, \tag{37.8}$$

(37.6)-теңлеме қурамалы емес түрлендириўлерден кейин стандарт формадағы Гаустың гипергеометриялық теңлемесине алып келинеди:

$$\begin{gathered}y\,(1-y)\,f''+[(2\nu+1)-(2\mu+2\nu+2)\,y]\,f'-\\ -(\mu+\nu)\,(\mu+\nu+1)\,f=0.\end{gathered} \tag{37.9}$$

Биз ҳәзир бул теңлемениң

$$f\,(y)=C\,{}_2F_1\,(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\nu+1;\ y) \tag{37.10}$$

дара шешиминиң C коэффициентин сәйкес түрде сайлап алғанда (37.2)-шегаралық шәртти қанаатландыратуғынлығын көрсетемиз.

$x\longrightarrow+\infty$ шегинен баслаймыз. Бундай шекте $y\approx e^{-x/a}\longrightarrow 0$ ҳәм усыған сәйкес (37.10)-шешими $f\,(0)=C$ теңлигине умтылады. Сонлықтан

$$u\,(y)\longrightarrow Cy^{\nu}\approx Ce^{-\nu x/a}. \tag{37.11}$$

Енди еки мүмкиншиликти бир биринен айырыў керек.

а) $\lambda>\varkappa$, ν—ҳақыйқый сан ҳәм нолден үлкен. Бул жағдайда (37.11)-аңлатпа экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди ($E<V_0$ теңсизлиги орынланғанда усындай болыўы керек). Солай етип

$$u\longrightarrow Ce^{-Kx}\ \text{ҳәм}\ K^2=\frac{\nu^2}{a^2}=\frac{2m}{\hbar^2}\,(V_0-E) \tag{37.12а}$$

екенлигине ийе боламыз.

б) $\lambda < \varkappa,\ \nu = -ik'a$ — таза жормал сан. Бундай жағдайда

$$u \to Ce^{ik'x} \text{ ҳәм } k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0). \tag{37.12б}$$

Екинши тәрептен $y \to 1$ шегинде $x \longrightarrow -\infty$ ҳәм $1 - y \approx e^{x/a} \to 0$ екенлигин есапқа алғанда y аргументине ийе гипергеометриялық функцияны $1 - y$ аргументине ийе гипергеометриялық функцияға түрлендириўдиң жақсы белгили болған қағыйдасын пайдаланыўға болады:

$$
\begin{aligned}
&{}_2F_1(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\nu+1;\ y) = \\
&\quad = \frac{\Gamma(2\nu+1)\,\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu)\,\Gamma(\nu-\mu+1)}\,{}_2F_1(\mu+\nu,\ \mu+\nu+1,\ 2\mu+1;\ 1-y) + \\
&+ (1-y)^{-2\mu}\frac{\Gamma(2\nu+1)\,\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+\nu)\,\Gamma(\mu+\nu+1)}\,{}_2F_1(\nu-\mu,\ \nu-\mu+1,\ -2\mu+1;\ 1-y).
\end{aligned}
$$

$1 - y = e^{x/a}$ теңлигин есапқа алсақ бул

$$u \to C\left\{\frac{\Gamma(2\nu+1)\,\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu)\,\Gamma(\nu-\mu+1)}e^{\mu x/a} + \frac{\Gamma(2\nu+1)\,\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+\nu)\,\Gamma(\nu+\mu+1)}e^{-\mu x/a}\right\}$$

аңлатпасын береди.

$$\mu = i\varkappa, \qquad \frac{\mu}{a} = ik \tag{37.13}$$

орнына қойыўынан кейин

$$C = \frac{\Gamma(\nu-\mu)\ \Gamma(\nu-\mu+1)}{\Gamma(2\nu+1)\ \Gamma(-2\mu)} \tag{37.14}$$

ҳәм

$$R = \frac{\Gamma(+2\mu)\,\Gamma(\nu-\mu)\,\Gamma(\nu-\mu+1)}{\Gamma(-2\mu)\,\Gamma(\nu+\mu)\,\Gamma(\nu+\mu+1)} \tag{37.15}$$

деп қабыл етсек бизиң шешимимиздиң формасы бойынша (37.2)-аңлатпа менен сәйкес келетуғынлығын көриўге болады.

Енди және де еки мүмкиншиликти бир биринен айырыў керек болады:

$$E > V_0 \text{ ҳәм } E < V_0.$$

а) $E < V_0,\ \mu = i\varkappa$ — таза жормал сан, ν ҳақыйқый сан ҳәм нолден үлкен. (37.15) бөлшегиниң алымы да, бөлими де комплексли түйинлес шамалардан ибарат. Сонлықтан

$$|R|^2 = 1,$$

яғный толық шағылысыў орын алады.

б) $E > V_0,\ \mu = i\varkappa$ ҳәм $\nu = -i\sigma$ шамалары таза жормал шамалар. Енди $\Gamma(\pm 2\mu)$ көбейтиўшилери ғана комплексли түйинлес шамалар болады, олар шағылысыў (шағылыстырыў) коэффициенти $|R|^2$ шамасына үлес қоспайды. Буннан кейин

$$\Gamma(z)=\frac{1}{z}\Gamma(z+1)$$

болғанлықтан

$$|R|^2=\left|\frac{(\nu+\mu)\,\Gamma^2(\nu-\mu+1)}{(\nu-\mu)\,\Gamma^2(\nu+\mu+1)}\right|^2=\left(\frac{\varkappa-\sigma}{\varkappa+\sigma}\right)^2\left[\left|\frac{\Gamma(1-i(\varkappa+\sigma))}{\Gamma(1+i(\varkappa-\sigma))}\right|^2\right]^2.$$

Енди

$$|\Gamma(1+i\eta)|^2=\frac{\pi\eta}{\operatorname{sh}\pi\eta}$$

элементар формуласынан пайдаланыў мүмкин. Шағылыстырыў (шағылысыў) коэффициенти ушын ең ақырында мынадай формуланы аламыз:

$$|R|^2=\left[\frac{\operatorname{sh}\pi(\varkappa-\sigma)}{\operatorname{sh}\pi(\varkappa+\sigma)}\right]^2 \qquad (37.16)$$

ямаса

$$|R|^2=\left[\frac{\operatorname{sh}\pi(k-k')\,a}{\operatorname{sh}\pi(k+k')\,a}\right]^2. \qquad (37.17)$$

Бул аңлатпаларда $\boldsymbol{k}$ ҳәм $\boldsymbol{k'}$ арқалы потенциал текшениң сәйкес шеп ҳәм оң тәреплериндеги толқынлық санлар белгиленген.

Қосымша мәселелер

Сызықлы оператор деп төмендегидей қәсийетлерге ийе операторларға айтамыз:

$$1.\quad \hat{F}(\psi+\varphi)=\hat{F}\psi+\hat{F}\varphi, \qquad (1.1)$$

$$2.\quad \hat{F}(\alpha\psi)=\alpha\hat{F}\psi.$$

Мүмкин болған операторлардың айырымларын қараймыз. Квадратқа көтериў операторы:

$$\hat{Q}\psi=\psi^2. \qquad (1.2)$$

Дифференциаллаў операторы $\hat{D}=\frac{d}{dx}$:

$$\hat{D}\psi(x)=\frac{d}{dx}\psi(x)=\psi'(x). \qquad (1.3)$$

Инверсия операторы $\hat{I}$

$$\hat{I}\psi(x)=\psi(-x). \qquad (1.4)$$

Бөлекшениң радиус-векторы операторы $\hat{\mathbf{r}}$

$$\hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}), \tag{1.5}$$

ал бөлекшениң улыўмаласқан импульси $\mathbf{p}$ ға $\hat{\mathbf{p}}$ операторы

$$\hat{\mathbf{p}}\,\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}), \tag{1.6}$$

бул аңлатпада i арқалы жормал бирлик, $\hbar$ арқалы Планк турақлысы, ∇ арқалы Гамильтонның «набла» деп аталатуғын дифференциаллық операторы белгиленген:

$$\nabla\psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial x}\mathbf{e}_x + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial y}\mathbf{e}_y + \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial z}\mathbf{e}_z.$$

Бул жерде x, y, z арқалы декарт координаталары, ал $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ арқалы сәйкес x, y, z көшерлериниң ортлары белгиленген.

1.1-**мәселе**. (1.1)-(1.6) операторларының сызықлы екенлигин тексерип көриңиз. Шешими: Оператордың сызықлы ямаса сызықлы емес екенлигин анықлаў ушын

$$1.\quad \hat{F}(\psi+\varphi) = \hat{F}\psi + \hat{F}\varphi,$$
$$2.\quad \hat{F}(\alpha\psi) = \alpha\hat{F}\psi.$$

шәртлерин қанаатландыратуғынлығын ямаса қанаатландырмайтуғынлығын тексерип көриў зәрүр. Квадратқа көтериў операторының сызықлы екенлигин тексерип көриў ушын $\hat{Q}$ операторы менен ψ ҳәм φ функцияларына тәсир етемиз:

$$\hat{Q}(\psi+\varphi) = (\psi+\varphi)^2 = \psi^2 + \varphi^2 + 2\psi\varphi \neq \psi^2 + \varphi^2 = \hat{Q}\psi + \hat{Q}\varphi.$$

Соның ушын бул оператор сызықлы оператор болып табылады.

Басқа операторлардың барлығы да сызықлы. Ҳақыйқатында да

$$\hat{D}(\psi+\varphi) = \frac{d}{dx}\psi + \frac{d}{dx}\varphi = \hat{D}\psi + \hat{D}\varphi, \quad \hat{D}\alpha\psi = \frac{d}{dx}(\alpha\psi) = \alpha\frac{d}{dx}\psi = \alpha\hat{D}\psi;$$
$$\hat{I}(\psi(x)+\varphi(x)) = \psi(-x) + \varphi(-x) = \hat{I}\psi(x) + \hat{I}\varphi(x), \quad \hat{I}\alpha\psi(x) = \alpha\psi(-x) = \alpha\hat{I}\psi(x);$$
$$\hat{\mathbf{r}}(\psi+\varphi) = \mathbf{r}(\psi+\varphi) = \mathbf{r}\psi + \mathbf{r}\varphi = \hat{\mathbf{r}}\psi + \hat{\mathbf{r}}\varphi, \quad \hat{\mathbf{r}}(\alpha\psi) = \alpha\mathbf{r}\psi = \alpha\hat{\mathbf{r}}\psi;$$
$$\hat{\mathbf{p}}(\psi+\varphi) = -i\hbar\nabla(\psi+\varphi) = -i\hbar\nabla\,\psi - i\hbar\nabla\,\varphi = \hat{\mathbf{p}}\,\psi + \hat{\mathbf{p}}\,\varphi,$$
$$\hat{\mathbf{p}}(\alpha\psi) = -i\hbar\nabla(\alpha\psi) = \alpha(-i\hbar\nabla\,\psi) = \alpha\hat{\mathbf{p}}\psi.$$

1.2-**мәселе**. $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$ теңлигиниң дурыс екенлигин дәлиллеңиз.

Шешими: $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ операторларының $\hat{F} + \hat{G}$ суммасы деп ψ функциясына

$$\left(\hat{F} + \hat{G}\right)\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi$$

қағыйдасы бойынша тәсир ететуғын операторға айтамыз. Сонлықтан

$$\left(\hat{F} + \hat{G}\right)\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi = \hat{G}\psi + \hat{F}\psi = \left(\hat{G} + \hat{F}\right)\psi$$

теңликлерин аламыз. Буннан $\hat{F} + \hat{G} = \hat{G} + \hat{F}$ екенлигин аламыз.

1.3-**мәселе**. Координата операторларының бир бири менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими: $\left[\hat{x},\hat{y}\right]$ коомутаторының ψ функциясына тәсирин көремиз.

$$\left[\hat{x},\hat{y}\right]\psi=\hat{x}\hat{y}\psi-\hat{y}\hat{x}\psi=xy\psi-yx\psi=0$$

ҳәм буннан $\left[\hat{x},\hat{y}\right]=0$ екенлиги табамыз.

1.4-**мәселе**. Импульс қураўшылары операторларының бир бири менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими: Мысал ушын $\hat{p}_x$ ҳәм $\hat{p}_y$ операторларын алайық. Бундай жағдайда

$$\left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]\psi=\left(\hat{p}_x\hat{p}_y-\hat{p}_y\hat{p}_x\right)\psi=-\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right)=$$
$$=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}-\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}\right).$$

Аралас $\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}$ ҳәм $\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}$ туўындылары өз-ара тең болғанлықтан $\left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]=0$.

1.5-**мәселе**. Координата операторы менен басқа координатаға түсирилген проекцияның импульси операторы менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими: Мысал ретинде мына жағдайды қараймыз:

$$\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]\psi=\hat{x}\hat{p}_y\psi-\hat{p}_y\hat{x}\psi=-ih\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}(x\psi)\right)=-ih\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y}-x\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)=0,$$

демек $\left[\hat{x},\hat{p}_y\right]=0$ екен.

1.6-**мәселе**. $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]$ коммутаторын табыңыз.

Шешими: $\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]$ операторы менен ψ функциясына тәсир етип мынаны табамыз:

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]\psi=\hat{x}\hat{p}_x\psi-\hat{p}_x\hat{x}\psi=-i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right)=-i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}-x\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\right)=i\hbar\psi$$

ямаса

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar.$$

1.7-**мәселе**. $\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}$ теңлигиниң дурыс екенлигин дәлиллеңиз.

Шешими:

$$=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}.$$

$$\left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right]=\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}+\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}=\hat{B}\left(\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\right)+\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)\hat{C}=$$
$$=\hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C}.$$

Пайдаланылған әдебиятлар дизими

Тийкарғы әдебият

Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Курс теоретический физики. III том. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е издание. Физматлит. Москва. 2004. 800 с.

А.А.Соколов, И.М.Тернов, В.Ч.Жуковский. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1979. 528 с.

А.С.Давыдов. Квантовая механика. 2-е издание. Издательство «Наука». Москва. 1973. 702 с.

Д.И.Блохинцев. Основы квантовой механики. Издательство «Наука». Москва. 1983. 664 с.

В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. Часть 1. Едиториал УРСС. Москва. 2001. 304 с.

В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. Часть 2. Едиториал УРСС. Москва. 2001. 304 с.

З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 1. Издательство «Мир». Москва. 1974. 342 с.

З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 2. Издательство «Мир». Москва. 1974. 316 с.

А.Қ.Ахметов. Квнаттық механикаға кириспе. Алматы. Ғылым баспасы. 2003.

Қосымша әдебият

Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Краткий курс теоретической физики. Книга 2. Квантовая механика. Издательство «Наука». Москва. 1972.

В.А.Фок. Начала квантовой механики. Издательство «Наука» Москва. 1976. 376 с.

Л.А.Головань, Е.А.Константинова, П.А.Форш. Задачи по квантовой механике для химиков. Москва. Физический факультет МГУ. 154 с.

Л.К.Мартинсон, Е.В.Смирнов. Квантовая физика. Москва. Издательство МГТУ имени Н.Э.Баумана. 2004. 496 с.

Қ.Қ.Қайырбаев. Кванттық механика негиздери. Павлодар. 2005.