

**ЎЗБЕКСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ЖОҚАРЫ ҲӘМ ОРТА
АРНАЎЛЫ БИЛИМ МИНИСТРЛИГИ**

**БЕРДАҚ АТЫНДАҒЫ ҚАРАҚАЛПАҚ МӘМЛЕКЕТЛИК
УНИВЕРСИТЕТИ**

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАКУЛЬТЕТИ

УЛЫЎМА ФИЗИКА КАФЕДРАСЫ

Физика-математика факультетиниң IV курс студенти Халметова
Гулмира Одилбековнаның питкерий қәнигелик жумысы

**КВАНТ МЕХАНИКАСЫНЫҢ БИР ҚАТАР МӘСЕЛЕРИН
МАТЕМАТИКА КОМПЬЮТЕРЛИК АЛГЕБРА СИСТЕМАСЫНЫҢ
ЖӘРДЕМИНДЕ ШЕШИЎ**

Илимий басшысы профессор Б.А.Абдикамалов

(қолы)

Кафедра баслығы физика-математика
илимлериниң кандидаты Ж.О.Акимова

(қолы)

Мазмуну

Кирисиў хәм мәселениң қойылыўы.	3
1-§. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси.	12
2-§. Өткермейтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.	15
3-§. Потенциал табалдырық хәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы.	24
4-§. Шекли тереңликке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше.	36
5-§. Питкериў қәнигелик жумысында келтирилген квант механикасының мәселелерин Mathematica компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде шеший.	45
Питкериў қәнигелик жумысы бойынша улыўмалық жуўмақлар.	53
Пайдаланылған әдебиятлар дизими.	54

Кирисиў хәм мәселениң қойылыўы

Биз дәслеп классикалық теорияның өзине тән өзгешеликлерин атап өтемиз. Классикалық электродинамиканың раўажланыўының ең ақырғы жуўмағын Максвелл-Лоренц теориясының пайда болыўы, ал классикалық механиканың раўажланыўының жуўмағы релятивистлик эффектлерди есапқа алатуғын классикалық механиканың өзи болып табылады.

Классикалық теория бойынша жақтылық қәсийетлери

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \nabla^2 \varphi = 0 \quad (\text{к1})$$

түриндеги толқын теңлемеси жәрдеминде тәрийипленетуғын электромагнит толқынлар болып табылады. Бул теңлемени жақтылық тезлиги c менен тарқалатуғын электр хәм магнит майданы векторларының қураўшылары қанаатландырыўы керек.

Классикалық теория бойынша электронлар механиканың нызамлары тийкарында Лоренц күшиниң тәсиринде қозғалатуғын ноқатлық бөлекшелер болып табылады. Оның қозғалысы Ньютон, Лагранж, Гамильтон ямаса Гамильтон-Якоби теңлемелериниң жәрдеминде сыпатланыўы керек.

Бул теңлемелердиң барлығы да бир нәтийжеге алып келиўи хәм релятивистлик жағдайлар ушын да улыўмаластырылыўы керек. Себеби бул теңлемелердиң барлығы да шын мәнисинде Ньютон теңлемелериниң хәр қыйлы түрлерде жазылыўлары болып табылады.

Толқынлық процесс жийилик ν хәм толқын узынлығы λ менен характерленеди. Бул шамалар $\nu\lambda = c$ қатнасы арқалы бир бири менен байланысқан. Сонлықтан x көшери бағытында тарқалатуғын ең әпиўайы жағдай ушын (к1) теңлемесиниң шешими

$$\varphi = A e^{-2\pi i(vt - \frac{x}{\lambda})} \quad (\text{к2})$$

түрінде жазылады. Әдетте әпийәйи жийилик v диң орнына цикллық жийилик $\omega = 2\pi v$ ди, ал толқын узынлығы λ ниң орнына толқын векторы \mathbf{k} ны пайдаланады. Бундай жағдайда \mathbf{k} бағытында тарқалыўшы тегис толқын ушын

$$\varphi = A e^{-i(\omega t - \mathbf{k}r)} \quad (\text{к3})$$

аңлатпасына ийе боламыз. (к3) аңлатпасын (к1) аңлатпасына қойсақ

$$\omega = ck \quad (\text{к4})$$

екенлигине ийе боламыз. Яғный толқын векторының модули толқын узынлығы λ менен

$$\frac{2\pi}{\lambda} = k \quad (\text{к5})$$

аңлатпасы арқалы байланысқан екен.

Биз еркин электрон ушын кинетикалық энергияны релятивистлик емес жағдайлар ушын былайынша жазамыз:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{к6})$$

Егер релятивистлик эффектлерди есапқа алатуғын болсақ (яғный релятивистлик жағдайлар – үлкен тезликлер ушын) энергия менен импульс ушын

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (\text{к7})$$

$$\mathbf{p} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (\text{к8})$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

Жақтылықтың квант теориясы. Жақтылықтың корпускулалық қәсийетлери ең дәслеп тең салмақлық жыллылық нурланыўы қубылысын изертлеў барысында табылды. Тең салмақлық жыллылық нурланыўының базы бир турақлы температураға шекем қыздырылған дийўаллар менен қоршалған қуўислықтың ишинде пайда болады. Бундай нурланыўды абсолют қара денениң нурланыўы деп те атайды.

Тең салмақлық нурланыўдың спектраллық тығызлығы болған $\rho(\omega)$ шамасын анықлаймыз. Бул шама электромагнит энергияның тығызлығы $u_{\text{нурл.}} = \frac{1}{8\pi} (\mathcal{E}^2 + \mathcal{H}^2)$ шамасы менен былайынша байланысқан:

$$u_{\text{нурл.}} = \int_0^{\infty} \rho \omega d\omega \quad (\text{к9})$$

Бул аңлатпада \mathcal{E} хәм \mathcal{H} арқалы сәйкес электр хәм магнит майданларының кернеўликлери белгиленген.

Спектраллық тығызлық қуўислықтың дийўалларының материалынан ғәрезли емес хәм тек оның температурасына ғәрезли болғанлықтан $\rho \omega$ функциясын анықлағанда оны гармоникалық осцилляторлардың жыйнағы менен

аппроксимациялап дийўаллардың ең әпиўайы моделин сайлап алыў мүмкин. Бирақ классикалық теорияның шеклеринде тең салмақлық нурланыўдың ақылға сәйкес келетуғын теориясын дөретиўдің мүмкин емес екенлиги айқын болды.

Тәжірийбе нәтийжелери менен сәйкес келетуғын теорияны дөретиў мақсетинде Макс Планк 1900-жылы пүткиллей жаңа гипотезаны усынды. Бул гипотеза классикалық физиканың бир қатар фундаменталлық көз-қарасларын түпкиликли түрде өзгертти. Планк гипотезасы бойынша микроскопиялық объектлердің энергиясы (атомлар менен молекулалар микрскопиялық объектлер болып есапланады) қәлеген үзликсиз өзгеретуғын мәниске емес, ал тек белгили бир мәнислерге ийе болады. Бундай мәнислерди физика илиминде дискрет мәнислер деп атайды. Мысалы осциллятор ушын энергияның мәниси базы бир минималлық болған энергияның $\hbar\omega$ шамасынан пүтин сан есе үлкен бола алады. Бул жерде ω арқалы осциллятордың тербелис энергиясы, ал \hbar арқалы базы бир турақлы шама белгиленген. Солай етип осциллятордың энергиясы ушын

$$E_n = n\hbar\omega \quad (\text{к10})$$

формуласын жазамыз. Бул аңлатпада $n = 1, 2, 3, \dots$

Планктың өзи (к10)-аңлатпаны басқашарақ етип жазды:

$$E_n = nh\nu \quad (\text{к11})$$

Егер әдеттеги жийилик ν менен цикллық жийилик ω арасында $\omega = 2\pi\nu$ қатнасының бар хәм $h = 2\pi\hbar$ екенлигин есапқа алсақ, онда соңғы аңлатпаның (к13)-аңлатпаға эквивалент екенлигин көремиз. Кейинирек ν менен h шамаларына салыстырғанда ω менен \hbar шамаларды пайдаланыўдың бир қанша қолайлы екенлиги анық болды.

(к11)-аңлатпадан келип шығып М.Планк тең салмақлық нурланыўдың спектраллық тығызлығы ушын

$$\rho_{\omega} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (\text{к12})$$

формуласын алды. Бул аңлатпада k_B шамасы Больцман турақлысын аңлатады.

Планк формуласынан нурланыўдың әдеттеги тығызлығы ушын формуланы алыў мүмкин

$$u_{\text{нурл.}} = \int_0^{\infty} \rho_{\omega} d\omega = \frac{\pi^2 k_B^4}{15c^3 \hbar^3} T^4 = \frac{4\sigma}{c} T^4. \quad (\text{к13})$$

Бул формуланы Стефан-Больцман нызамы деп атайды. Бул нызам тәжірийбелерде Планк формуласы пайда болмастан бұрын ашылған еди.

Планк формуласынан Виннің аўысыў нызамы деп аталатуғын нызамды да алыў мүмкин:

$$\lambda_{\text{макс.}} T = \frac{2\pi c \hbar}{4,965 k_B} = b. \quad (\text{к14})$$

Виннің аўысыў нызамынан нурланыўдың максимумына сәйкес келиўши толқын узынлығын $\lambda_{\text{макс.}}$ шамасын анықлаў мүмкин (буның ушын $\rho(\omega)$ тығызлығынан $\rho(\lambda)$ тығызлығына өтиў керек болады).

Стефан-Больцман нызамының турақлысының мәнісі де ($\sigma = 5,67 \cdot 10^{-5}$ г·сек³·град⁴), Вин турақлысының мәнісі де ($b = 0,29$ см·град) эмперикалық мағлыұматлардан белгили болғанлықтан Планк h шамасының хәм Больцман турақлысы болған k_B турақлысының сан мәніслерин тапты. Олардың мәніслери $h = 6,626 \cdot 10^{-27}$ эрг·сек, $k_B = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг·град⁻¹. Планк тәрeпинен оның турақлысының физика илимине ендирилген күнин (1900-жыл) хәзирги заман квант теориясының туўылған күни деп атайды.

Квант теориясынан классикалық теорияға өткенде $\hbar = 0$ деп есаплаў керек. Бундай жағдайда Планк формуласы Рэлей-Джинс формуласына өтеди

$$\rho \omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} k_B T. \quad (\text{к15})$$

Бул формула бойынша

$$u_{\text{нурл.}} = \int_0^{\infty} \rho \omega d\omega = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega = \infty.$$

Биз алған жағдайдан қыздырылған дене менен оның нурланыўы арасындағы термодинамикалық тең салмақлық халының пайда болыўын классикалық теорияда түсиндириўге болмайтуғынлығы келип шығады.

Рэлей-Джинстинң классикалық формуласы спектраллық тарқалыў иймеклигин тек киши жийиликлерде (яғный $\hbar\omega \ll k_B T$ болған жағдайларда) ғана дурыс анықлайды. Ал үлкен жийиликлерде ($\hbar\omega \gg k_B T$ болған жағдайлар) пүткиллей ақылға муўапық келмейтуғын нәтийжени береди. Бул жағдайда Эренфест "ультрафиолетлик катастрофа" деп атады. Тек Планктың квант теориясы пайда болғаннан кейин ғана "ультрафиолет катастрофа" толық сапластырылды.

Өзиниң формуласын келтирип шығарарда М.Планк осциллятордың энергиясы тек дискрет мәніслерге ийе болады деп болжады. Бирақ осциллятордың бул жаңа қәсийети теорияның дәслепки вариантында физикалық жақтан тийкарсыз қабыл етилди (дурысырағы бул "айрықша қәсийетти" Планк тек қыздырылған денеге, яғный осцилляторға тийисли, ал электромагнит нурланыўға тийисли емес деп түсиндириўге тырысты).

Альберт Эйнштейн "квантлар" теориясының раўажланыўында екінши үлкен қәдемди қойды. Ол осцилляторлардың энергияларының дискретлиги электромагнит нурлардың өзиниң корпускулалар – $\hbar\omega$ энергиясын алып жүриўши фотонлардан туратуғынлығы менен тығыз байланыслы деген гипотезаны усынды.

Эйнштейн бойынша электромагнит майдан массасы нолге тең энергиясы

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (\text{к16})$$

шамасына тең болған бөлекшелерден турады. Бундай бөлекшелерди фотонлар деп атайды. Бундай жағдайда фотонның импульси ушын

$$\mathbf{p} = \mathbf{k}^0 \frac{\hbar\omega}{c} = \mathbf{k}^0 \frac{h}{\lambda} = \hbar \mathbf{k} \quad (\text{к17})$$

аңлатпасы алынады. Бул аңлатпада $\mathbf{k} = \frac{2\pi \mathbf{k}^0}{\lambda}$ арқалы толқын векторы, ал \mathbf{k}^0 арқалы фотонның импульси бағытындағы бирлик вектор белгиленген. $k = \frac{1}{\lambda}$ шамасын толқынлық саны деп атаймыз.

Усындай көз-қараслар тийкарында 1905-жылы А.Эйнштейн фотоэффект кубылысының санлық теориясын дөретти. 1887-жылы Г.Герц тәрeпинен ашылған

фотоэффект құбылысы кейинирек А.Г.Столетов тәрәпинен толық изертленди. Фотоэффекттиң ең әпиұайы көриниўлериниң бири төмендегилерден ибарат: егер жеткиликли үлкенликтеги жийиликке ийе жақтылық пенен жақтыландырылса зарядланған еки шарик арасындағы ушқын олар арасындағы жақтылық болмаған жағдайдағы потенциалдан әдеўир киши потенциалда-ақ пайда болады. Бул құбылысты түсиндириў ушын Эйнштейн әпиұайы теңлемесин усынды:

$$\frac{mv^2}{2} = \hbar\omega + W.$$

Бул формула бойынша ушып шыққан электронның кинетикалық энергиясы $\frac{mv^2}{2}$ жутылған фотонның энергиясы $\hbar\omega$ менен металдан электронның шығыў жумысы W шамаларының айырмасынан турады. Егер $\hbar\omega < W$ теңсизлиги орынланған жағдайда электронлардың металдан шыға алмайтуғынлығы өз-өзинен түсиникли. Келип түсиўши фотонлардың энергиясы W шамасынан үлкен болғанда ғана электронлар металдан шығарылады (суўырып шығарылады).

Эйнштейнниң фотоэффект теориясын экспериментлерде тексерип көриў металдан ушып шығыўшы электронлардың кинетикалық энергиясының келип түсиўши жақтылықтың жийилигине байланыслы екенлигин айқын түрде тастыйықлады. Жақтылықтың жийилиги $\omega > W/\hbar$ теңсизлиги орынланған жағдайда ғана фотоэлектронлар металдан шыға баслайды.

Фотонлар теориясының жуўмақларының еркин электронлардағы рентген нурларының шашыраўын изертлеўлерде тастыйықланыўы оғада әҳмийетли физикалық ашылыўлардың бири болып табылады. 1923-жылы Комптон тәрәпинен ашылған бул құбылысты Комптон эффекти деп атайды. Бул теорияда энергияның сақланыў нызамы менен бирге импульстиң сақланыў нызамы да тексерилип көриледи.

Электронлардың толқынлық қәсийетлери. Де Бройлдиң гипотезасына сәйкес (к7)- хәм (к8)-аңлатпалар арқалы бир бири менен байланысқан энергия менен импульске ийе еркин электронлардың ағысы толқынлық қәсийетлерге де ийе болыўы керек.

Сәйкес жийилик пенен толқын узынлығы

$$E = \hbar\omega, \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{к18})$$

формулаларының жәрдемінде анықланады. Электронлар дәстеси ушын λ толқын узынлығы де Бройль толқын узынлығы деген атамаға ийе болды. Солай етип фотонлар ушын Эйнштейн тәрәпинен табылған формула электронлар ушын улыўмаластырылды. Солай етип толқынлық-корпускулалық дуализм улыўмалық универсаллық характерге ийе болып шықты. Фотонлар ушын да, электронлар ушын да бул формулаларды

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k \quad (\text{к19})$$

түринде жазыў мүмкин.

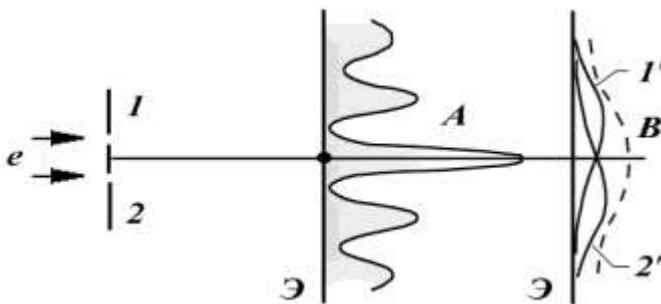
Микробөлекшелердиң қәсийетлери. Микробөлекшелердиң толқынлық қәсийетлериниң ашылыўы бизиң принципиаллық жақтан пүткиллей жаңа типтеги объектлер менен жумыс ислесе баслағанымызды көрсетеди. Бир қатар экспериментлерде микробөлекшелер корпускулалық қәсийетти көрсетеди, ал екинши бир экспериментлерде бизлер оларды толқын түринде көремиз. Бирақ хақыйқатында олар толқын да, бөлекше де емес. Усы жерде микробөлекшелердиң

қәсийетлерин тәриплеу үшін классикалық усыллардың иске аспайтуғынлығы анық көринеди.

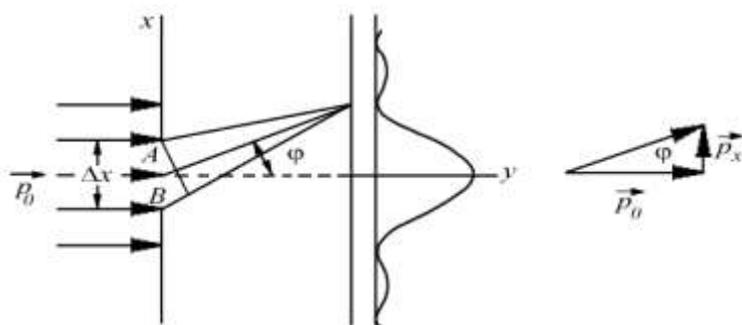
Микробөлекшениң толқыннан айырмасын көп санлы мысаллардың жәрдеминде көрсетиу мүмкин. Мысалы ярым мөлдір айнаны пайдаланып қәлеген толқынды екиге бөлип, олардың хәр қайсысын өз алдына изертлеу мүмкин. Микробөлекше болған электронды ямаса нейтронды бөлеклерге бөлиуге болмайды. Усы ўақытқа шекем хеш ким ярым электронды, бир ярым протонды ямаса шерек нейтронды көрген жоқ.

Микробөлекшениң классикалық нызамларға бағынатуғын макробөлекшелерден тийкарғы айырмасының бири соннан ибарат, микробөлекшениң қозғалысын сыпатлау үшін траектория түсинигин қолланыуға болмайды. Бул жағдайды еки саңлақта алынатуғын электронлардың дифракциясы мысалында көрсетемиз. Көп оқыу қолланбаларында бул экспериментти ойымызда өткерилетуғын эксперимент деп атайды. Бирақ еки саңлақтағы электронлардың дифракциясын 1961-жылы Йенсен бақлады.

Мейли моноэнергиялы (бирдей энергияға ийе) электронлардың параллель дәстеси еки саңлағы бар диафрагмаға келип түсетуғын болсын (1-сүүрет). Электронлар толқынлық қәсийетке ийе болғанлықтан диафрагманың артына қойылған Э экранында интерференциялық сүүрет пайда болады. Интерференциялық сүүреттиң максимумлар менен минимумлардың избеизлигинен туратуғынлығын билемиз. (А иймеклиги). Енди 1-саңлақ ашық хәм 2-саңлақ жабық болған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда экрандағы электронлардың тарқалыуы тек бир саңлақтың үлеси менен анықланады (1' иймеклиги). Тап сол сыяқлы 1-саңлақты жапсақ хәм 2-саңлақты ашсақ, онда 2' иймеклиги менен сыпатланатуғын тарқалыуды аламыз. Егер хәр бир электрон белгили бир саңлақ арқалы өтетуғын болса (1- ямаса 2-саңлақтан), онда электронлардың тарқалыуы еки саңлақ та ашық турғандағы (яғный В иймеклиги) жағдайдағыдай болып тарқалған болар еди (1-сүүретте келтирилген 1' хәм 2' иймекликлериниң қосындысы пунктир сызық пенен көрсетилген). В иймеклигиниң экспериментте алынған иймекликтен тиккелей айырмасы электрон диафрагма арқалы өткенде еки саңлақты да "көреді" деген жуўмақтың шығарылыуына алып келеди. Электрон диафрагма арқалы өткенде экранда пайда болатуғын интерференциялық сүүрет еки саңлақтың қатнасыуы менен ғана пайда болады деп түсиндириледі. Электрон қандай да бир саңлақ арқалы өтти хәм соның салдарынан интерференциялық сүүрет пайда болды деп түсиндиретуғын қәлеген тырысыу интерференциялық сүүреттиң бузылыуына алып келеди. Солай етип интерференциялық сүүретти бузбай электронның саңлақлардың қайсысынан өткенлигин көрсетиу мүмкин емес болып шығады. Демек электронға ямаса қәлеген басқа микробөлекшеге қандай да бир айқын траектория сәйкес келеди деп айтыу мүмкин емес.



1-сүүрет.
Моноэнергиялы электронлардың параллель дәстеси еки саңлағы бар диафрагмаға келип түсетуғын эксперименттиң схемасы.



2-сүрет.
Саңлақтағы электронның
дифракциясы.

Микробөлекшениң толқынлық қәсийетке ийе екенлиги классикалық физиканың әхмийетли түсиниклериниң бири болған траектория түсинигинен бас тартыўға алып келеди. Классикалық көз-қараслар бойынша бөлекше ўақыттың хәр бир моментинде кеңисликтiң белгили бир ноқатында жайласады хәм бул ноқатта белгили муғдардағы импульске ийе болады. Демек бир ноқатта жайласқан электронның тап сол ўақыт моментинде екинши ноқатта да жайласыўы мүмкин емес. Квантлық көз қараслар бойынша толқынлық қәсийетлерге ийе болғанлығы себепли бир ўақыт моментинде микробөлекше кеңисликтiң хәр қыйлы ноқатларында жайласа алады. Сонлықтан микробөлекшелердиң қозғалысын тәриплеў ушын траектория түсинигинен пайдаланыў пүткиллей мүмкин емес болып табылады.

Классикалық бөлекшелердиң қандай қәсийетлери микродүнья областларында сақланады? Сақланатуғын шамалар қатарына бөлекшениң массасы хәм энергия киреди. Қандай да бир микробөлекше басқа денелердиң бөлекшелери менен тәсир етискенде оның энергиясы бөлекше бир ноқатта турған жағдайдағыдай болып сарыпланады.

Анықсызлық қатнастары. Микробөлекшелердиң корпускулалық-толқынлық тәбияты усы бөлекшениң ҳалын характерлеўши физикалық шамалардың мәнислерин дәл анықлаўға шек қояды. Бул шеклердиң экспериментлердеги өлшеўлердиң дәллиги менен ҳеш қандай байланысы жоқ. Сонлықтан биз айтып атырған айырым физикалық шамалардың мәнислерин дәл анықлаў мүмкиншиликлериниң жоқлығы принципаллық әхмийетке ийе. Мысал ретинде электронның саңлақтағы дифракциясын қараймыз.

Мейли электронлар мөлдир емес Э экранына нормал бағытта түсетуғын болсын. Экранда кеңлиги Δx шамасына тең саңлақ болсын (2-сүрет).

Интерференциялық сүрет экраннан соң жайласқан Ф фотопластинкасында регистрацияланатуғын болсын. Экран тегислигиндеги x көшерин саңлаққа перпендикуляр бағытқа қарай бағытлаймыз, ал y көшерин болса келип түсиўши электронлар дәстесиниң қозғалыс бағытында аламыз. Мейли келип түсиўши электронлар p_0 муғдарындағы импульске ийе болсын. Бундай жағдайда квант-механикалық көз-қараслар бойынша бундай электронлар (к18)-де Бройль теңлемеси тәрепинен анықланатуғын толқын векторы k болған тегис толқын түринде сыпатланады

$$k = \frac{p_0}{\hbar}.$$

Толқын барлық кеңислик бойынша тарқалған болғанлықтан хәр бир электрон саңлақ арқалы өтемен дегенше дәл p_0 муғдарындағы импульске ($p_x = 0$, $p_y = p_0$, $p_z = 0$) хәм мәниси пүткиллей белгисиз болған x координатасына ийе болады.

Электрон саңлақ арқалы өткенде ситуация пүткиллей өзгериске ушырайды. x координатасындағы анықсызлық саңлақтың кеңлиги Δx қа тең болады. Бирақ бул жағдайда электронлардың саңлақтағы дифракциясының салдарынан импульстиң

мәнісінде Δp_x шамасына тең болған анықсызлық пайда болады. Мәселе соннан ибарат, саңлақ арқалы өткен электронлар экранда енди тегис толқын түрінде емес, ал шашыраушы толқын түрінде тәриплениди. Бундай шашыраушы толқынның интенсивлиги дифракция нызамларына сәйкес дифракция мүйеши φ ге байланыслы болады. Дифракциялық сүүреттиң сапалық түри 2-сүүретте келтирилген.

Саңлақ арқалы өтиўдиң барысында импульстиң x көшерине түсирилген проекциясы p_x та үлкен емес өзгериске ушырайды. Электронлардың дифракциясына муўапық p_x тың қандай шамаға өзгеретуғынлығын баҳалайық.

Саңлақ арқалы өткен электронлардың басым көпшилиги орайлық дифракциялық максимумға барып түседи. Бул максимумның шегаралары φ_1 дифракция мүйешиниң мәніси бойынша табылады. φ_1 мүйеши дифракциялық сүүреттеги интенсивликтиң биринши минимумын береди. Дифракция теориясына сәйкес бул мүйеш

$$\Delta x \sin \varphi_1 = \lambda_{db}$$

шәртинен табылады. Биз барлық ўақытта λ_{db} арқалы электронның де Бройль толқынының толқын узынлығын белгилеп келдик. φ_1 мүйешиниң киши екенлигине байланыслы $\varphi_1 \sin \varphi_1 \approx \text{tg} \varphi_1$. Демек

$$\frac{\lambda_{db}}{\Delta x} = \sin \varphi_1 \approx \text{tg} \varphi_1. \quad (\text{к20})$$

Екинши тәрептен φ_1 мүйешиниң мәнісин электронның p_x хәм p_y қураушылары арқалы да анықлаўға болады:

$$\text{tg} \varphi_1 = \frac{p_x}{p_y}$$

x көшериниң бағытында импульстиң проекциясындағы анықсызлық Δp_x шамасының мәніси p_x тың өзиниң мәніси менен барабар деп есаплап

$$\text{tg} \varphi_1 = \frac{\Delta p_x}{p_y}. \quad (\text{к21})$$

аңлатпасын аламыз. (к20) пенен (к21) аңлатпаларын бир бири менен салыстырып

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx \lambda_{db} p_y$$

қатнасына ийе боламыз.

$$\lambda_{db} = \frac{2\pi \hbar}{p_y}$$

екенлигин итибарға алып ең ақырғы нәтийжени аламыз

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\hbar. \quad (\text{к22})$$

(к22)-аңлатпаны келтирип шығарыўды базы бир әпиўайыластырыўшы болжаўлар пайдаланылған еди. Сонлықтан $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\hbar$ формуласы жуўық формула болып табылады. Анық жуўмақлар

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{к23})$$

формуласын береди.

(к23)-формула 1927-жылы немис физиги В.Гейзенберг тәрепинен алынды хәм сонлықтан Гейзенбергтиң анықсызлық қатнастары деп аталады. Бул қатнастар бойынша биз бөлекшениң координаталарын қаншама дәл тапсақ (яғный Δx шамасының мәніси қаншама киши болса), онда усы координатаға түсирилген импульстиң проекциясының мәнісин тапқанда жиберилетуғын анықсызлықтың

мәнісі Δp_x соншама үлкен болады (яғный Δx киши болса Δp_x үлкен хәм Δx үлкен болса Δp_x киши мәніске ийе болады деген сөз).

Анықсызлық қатнастары анықсызлық принципниң математикалық аңлатпасы болып табылады. Бул принцип бойынша координата менен импульстиң усы координатаға түсірилген проекциясы дәл мәніслерге ийе болатуғын хал тәбиятта бола алмайды.

(к23)-аңлатпаның материяның корпускулалық-толқынлық дуализминиң салдары екенлигин және бир рет атап өтемиз. Бул дуализм бойынша бөлекше бир ұақытта толқынлық қәсийетке де, бөлешелик қәсийетке де ийе болады. Бул анықсызлық анаў ямаса мынаў экспериментте пайдаланылатуғын айқын физикалық әсбаптың шаманы өлшегенде жиберетуғын қәтелиги менен хеш қандай байланысқа ийе емес. Бул қатнас микробөлекшениң характеристикаларын өлшеўдиң дәллигиниң теориялық шегин береді.

Гейзенбергтиң анықсызлық қатнастары бөлекшениң координатасының анықсызлығы менен импульсиниң усы координатаға түсірилген проекциясының анықсызлығын байланыстырады. Биз жоқарыда қарап өткен жағдайда x көшери хеш бир себеп пенен айырып алынған жоқ еді. Сонлықтан (к23)-қатнас басқа координата көшерлери ушын да орынлы

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Жоқарыда айтылғанлар менен бир қатарда координатаны хәм импульстиң басқа координаталарға түсірилген проекцияларын анықлаўға хеш қандай шек қойылмайды. Мысалы Δx пенен Δp_y ямаса Δp_z шамаларын анықлаў дәлликлерине хеш қандай шек қойылмайды.

Квант механикасында анықсызлық қатнастары фундаменталлық әхмийетке ийе. Бул қатнастар оғада әхмийетли физикалық нәтийжелерди алыўға мүмкиншилик береді. Соның менен бирге бул қатнастар квант-механикалық мәселелерди шешкенде қурамалы болған дәл математикалық есаплаўларды жүргизбей-ақ көп шамалардың мәніслерин жеткиликли дәрежедеги дәлликте алыўға имканят жаратып береді. Мысалы не себепли атомдағы электрон ядроға қулап түспейди, неликтен атом ядросының ишинде электрон жоқ хәм басқа да әхмийетли сораўларға аңсат жуўап бериўге мүмкиншилик береді. Анықсызлық қатнастары жәрдемінде атомның өлшемлериниң шамасы, атомдағы электронның ең минималлық энергиясы хәққындағы мәселелерге айқын жуўап алыўға болады.

Анықсызлық қатнастарының атомның орнықтылығы хәққында қалай жуўмақ шығаратуғынлығын көрсетемиз. Водород атомын аламыз хәм ондағы электрон ядроның (протонның) дөгерегинде радиусы r болған дөңгелек орбитада v тезлиги менен қозғалады деп есаплаймыз. Электронның орбита бойынша қозғалысы Кулон күшиниң тәсиринде жүзеге келетуғын болғанлықтан Ньютонның екінши ызамамы бойынша

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad (\text{к24})$$

аңлатпасын жаза аламыз. Енди анықсызлық қатнастарынан пайдаланамыз. Электронның координатасындағы анықсызлық орбитаның радиусы r ге тең. Ал импульстиң анықсызлығы Δp ның шамасы импульс p ның шамасынан артық емес, яғный $\Delta p \approx p = mv$. Бул жағдайда (к23)-аңлатпа мына түрге енеді:

$$rmv \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (\text{к25})$$

(к24) менен (к25) ди бириктирип

$$r > \frac{\pi \varepsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0,13 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

шамасын аламыз. Демек электронның орбитасының радиусы, яғный водород атомының радиусы биз тапқан шамадан киши бола алмайды екен. Бул өз гезегинде электронның ядроға қулап түсе алмайтуғынлығын аңлатады. Сонлықтан атом орнықты система болып табылады.

Анықсызлық қатнастары классикалық механиканың қолланылыу шеклерин де сызып бере алады. Бул жағдайды демонстрациялау үшін (к23)-аңлатпаны оған масса m киретуғын етип көширип жазамыз. (к23) ға $\Delta p_x = m\Delta v_x$ теңлигин қойып

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \quad (\text{к26})$$

теңсизлигин аламыз. $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$ Дж·сек жүдә киши шама болғанлықтан тезликтің анықсызлығы Δv_x тек массасы жүдә киши хәм жүдә киши Δx өлшемлеринде ғана сезилерликтей мәниске ийе болыуы мүмкин.

Мысал ретинде массасы $m = 10^{-6}$ кг болған шаңның бөлекшесин аламыз. Бундай бөлекшениң координатасын анықлауда жиберилетуғын қәтеликтің шамасы $\Delta x = 10^{-6}$ метрден артық емес. Бундай жағдайда шаң бөлекшесинің тезлиги үшін алынатуғын анықсызлықтың шамасы $\Delta v_x \sim 10^{-22}$ м/сек шамасынан артпайды. Бул шама ең жақсы эксперименталлық дүзиліслердің өлшеулеринде жиберилетуғын қәтеликтің шамасынан оғада көп есе киши. Солай етип шаң бөлекшеси үшін, сондай-ақ барлық макроскопиялық денелер үшін анықсызлық қатнастары хеш қандай әхмийетке ийе емес. Олардың қозғалысын изертлегенде квант механикасын емес, ал классикалық механиканы қолланыу керек.

Енди атомдағы электрон үшін анықсызлық қатнастарының қандай нәтижелерди беретуғынын көрип өтеміз. Электронның массасы $m = 0,91 \cdot 10^{-30}$ кг, оның координатасындағы анықсызлықты $\Delta x \approx 10^{-10}$ м ге тең дейик. Бул жағдайда $\Delta v_x \sim 10^6$ м/сек.

Бул шаманы атомдағы электронның тезлиги менен салыстырайық. Водород атомындағы электронның энергиясы шама менен 10 эВ шамасында. Бундай энергияға $v = 10^6$ м/сек шамасындағы тезлик сәйкес келеди. Солай етип электронның тезлигиндегі анықсызлық Δv_x тың шамасы электронның өзинің тезлиги v ға барабар екен деген жуумақ келип шығады. Сонлықтан атомдағы электронның қәсийетин тәриплеу үшін квант механикасының ызымларын пайдаланыу керек болады.

Биз төменде координата менен импульстің проекциясы менен бир қатарда бир ұақытта дәл мәнислерге ийе бола алмайтуғын басқада физикалық шамалардың жупларының бар екенлигин көреміз. Олар үшін да (к23)-аңлатпаға ұқсас анықсызлық қатнастары орын алады. Сондай қатнастардың ишинде энергияның анықсызлығы ΔE менен ұақыттың анықсызлығы Δt шамасын байланыстыратуғын анықсызлық қатнастары үлкен әхмийетке ийе. Бул қатнас мынадай түрге ийе

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (\text{к27})$$

Бирақ бул жерде базы бир корректировка менен түсиник бериу керек болады. Бул қатнасты толығырақ таллаймыз. Экспериментлерде квант халының толық

энергиясы өлшенбейди, ал оның орнына әдетте система бір ғалдан екінші ғалға өткенде хәр ғалға сәйкес келетуғын энергиялардың айырмасы өлшенеди. Бул айырма $\Delta E = \Delta E_1 - E_2 = \Delta E_1 - \Delta E_2$ шамасына тең. Бул аңлатпада E_1 менен E_2 арқалы системаның дәслепки хәм ақырғы ғалларына сәйкес келетуғын энергияның муғдарлары белгиленген. Соның менен бирге ΔE_1 хәм ΔE_2 шамаларының белгилери хәр қыйлы болыуы мүмкин. Соның ушын (к27)-аңлатпаның оң тәрәпин екиге көбейтиўге туўры келеди. Нәтийжеде энергия менен ўақыт ушын анықсызлық қатнасы мынадай түрге ийе болады:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar. \quad (\text{к28})$$

Бул анықсызлық қатнасында ўақыттың анықсызлығы Δt шамасын системаның энергиясы E_1 болған қозған ғалдағы өмириниң узақлығы деп түсиниў керек. Бундай жағдайда ΔE шамасы система энергиясы E_1 болған ғалдан энергиясы E_2 болған ғалға өткендеги энергияның мәнисиндеги шашаўлық (разброс) деп есаплаўға болады.

Биз жоқарыда квант механикасының тийкарларын үстиртин түрде баянлап шықтық. Усының менен бир қатарда квант механикасының теориялық физиканың бир тараўы екенлигин, сонлықтан оның сәйкес математикалық аппаратының бир екенлигин атап өтемиз. Бул математикалық аппарат әдеўир қурамалы аппарат болып, мәселелерди шешиў әдеўир қурамалы математикалық операцияларды орынлаўды талап етеди. Сонлықтан бундай математикалық операцияларды хәзирги заман компьютерлик программалаў тиллеринде орынланғанда мәселелерди шешиўдиң аңлатласыўын, квант механикасындағы көплеген қубылыслардың көргизбелигиниң жақсыланыўын күтиўге болады.

Жоқарыда айтылғанларға байланыслы бул питкерий қәнигелик жумысы квант механикасының айырым мәселелерин Mathematica универсаллық системасының жәрдеминде көргизбели етип шешиў мәселелерин өз ишине қамтыйды. Дүзилген программалар питкерий қәнигелик жумысының ең кейинги параграфында берилген.

1-§. Стационар ғаллар ушын Шредингер теңлемеси

Ўақытқа ийе Шредингер теңлемеси

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (1)$$

релятивистлик емес квант механикасының тийкарғы теңлемеси болып табылады. Бул аңлатпада $H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x, y, z, t)$ арқалы бөлекшениң толық энергиясының операторы болған Гамильтон операторы белгиленген. Бул теңleme координаталар менен ўақыттың функциясы болған $\Psi(x, y, z, t)$ функциясын табыўға мүмкиншилик береді. Нәтийжеде бөлекшени кеңисликтиң қәлеген ноқатында қәлеген ўақыт моментинде табыўдың итималлығының тығызлығы есапланады. Нәтийжеде күш майданында қозғалыўшы бөлекшениң квант ғалын тәрийиплеў мүмкиншилиги туўылады.

Квант механикасында күш майданындағы қозғалыс хәққиндағы мәселелердиң пүтин классы бар болып, бундай мәселелерде $\Psi(x, y, z, t)$ толқын функциясы ўақыттан ғәрезли емес болады. Сонлықтан $\Psi(x, y, z, t) \equiv \Psi(x, y, z)$ теңлиги

орынланады. Бундай күш майданларын стационар күш майданлары деп атаймыз хәм бундай ўақытлары $U(x, y, z)$ күш функциясы бөлешениң потенциал энергиясы мағанасына ийе болады. Стационар майданларда квант системасы энергия E ниң белгили бир мәнисине ийе ҳалларда тура алады. Бундай ҳалларды стационар ҳаллар деп атаймыз. Ал усындай ҳалларда туратуғын бөлешелердиң қозғалысы ҳаққындағы мәселелерди квант механикасының стационар мәселелери деп атайды. Квант системаларының стационар ҳалларын таллаўға усы бап арналған.

Стационар ҳалға сәйкес келиўши толқын функциясының улыўмалық түрин табамыз. (1)-теңледеги H операторы анық ўақыттан ғәрезсиз болғанлықтан $\Psi(x, y, z, t)$ толқын функциясын еки функцияның көбеймеси түринде жазыўға болады

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)\varphi(t). \quad (2)$$

Бул функциялардың бири $\psi(x, y, z)$ тек координатадан, ал екиншиси $\varphi(t)$ тек ўақыттан ғәрезли. (2) функциясын (1)-теңледеге қойып хәм буннан кейин теңлеменің еки бөлимин де $\psi(x, y, z)\varphi(t)$ көбеймесине бөлсек

$$\frac{i\hbar d\varphi}{\varphi dt} = \frac{1}{\psi}H\psi \quad (3)$$

теңлемесин аламыз. (3)-теңлеменің шеп тәрәпи тек ўақыттан, ал оң тәрәпи тек координаталардан ғәрезли. Егер теңлеменің оң хәм шеп тәрәплери турақлы шамаға тең болса бундай теңликтиң орынланыўы мүмкин. Бул турақлы шаманы E арқалы белгилеймиз. Усындай жоллар менен (3)-теңледеден еки теңледе аламыз. Олардың биреўи $\psi(x, y, z)$ функциясы, ал екиншиси тек $\varphi(t)$ функциясы ушын. Оларды былайынша жазамыз:

$$H\psi = E\psi, \quad (4a)$$

$$i\hbar \frac{d\varphi}{dt} = E\varphi. \quad (4b)$$

(4a) теңлемеси толық энергия операторының (яғный H гамильтонианның) меншикли функцияларын хәм меншикли мәнислерин анықлайды. Сонлықтан E шамасы квант механикалық системаның толық энергиясы болып табылады. (4a) теңлемесин H операторының түрин есапқа алған ҳалда көширип жазамыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi. \quad (5)$$

Бул теңледеде $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ арқалы Лаплас операторы белгиленген. (5)-теңлемеси стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси деп аталады. Оның шешимлери болған $\psi(x, y, z)$ функциялары хәм энергия E ниң сәйкес мәнислери бөлешениң потенциал энергиясы болған $U(x, y, z)$ функциясының айқын түринен ғәрезли. Стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемесин

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \quad (6)$$

формада жийи жазады.

Енди ўақытлық функция φt ны таллаўға өтемиз. (4b) функциясының шешими

$$\varphi t = \varphi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad (7)$$

түрине ийе болады. Бул жерде φ_0 арқалы базы бир константа белгиленген. Улыўмалықты жойтпастан $\varphi_0 = 1$ деп есаплаў мүмкин. Себеби $\varphi(t)$ функциясы барлық аңлатпаларға тек $\psi(x, y, z)$ функциясы менен көбейме түрінде қатнасады. Соның менен бирге $\psi(x, y, z)$ функциясының өзи турақлы көбейтиўши дәллигинде анықланады. Соның ушын $\varphi(t)$ функциясы ушын және де бир ықтыярлы алынған турақлыны киргизип отырыўдың зәрүрлиги жоқ.

Солай етип стационар квант ҳалында турған бөлекше ушын толқын функциясы төмендегидей түрге ийе болады

$$\Psi x, y, z, t = \psi x, y, z e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x, y, z)e^{-i\omega t} \quad (8)$$

(8)-аңлатпадан стационар ҳалдың толқын функциясының жийилик пенен ўақыттан ғәрезли екенлиги көринип тур

$$\omega = \frac{E}{\hbar}.$$

Бул нәтийже дәслеп еркин бөлекше ушын қолланылған де Бройлдің $E = \omega\hbar$ формуласының бөлекше стационар күш майданында қозғалғанында да дурыс екенлигин көрсетеди.

Стационар ҳаллар ушын бөлекшениң турған орнын табыўдың итималлығының тығызлығының ўақыттан ғәрезсиз екенлигин атап өтемиз. Ҳақыйқатында да

$$\begin{aligned} \omega &= \Psi(x, y, z, t)^2 = \psi(x, y, z)^2 e^{-i\frac{E}{\hbar}t}^2 = \\ &= \psi(x, y, z)^2 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x, y, z)^2. \end{aligned} \quad (9)$$

Стационар ҳалларда итималлықлар ағысының тығызлығы векторының да, физикалық шамалардың орташа мәнислериниң де ўақыттан ғәрезсиз екенлигин көрсетиўге болады.

(9)-формуланы есапқа алғанда толқын функциясының нормировка шәрти

$$\int_{\mathbb{R}^N} \Psi(x, y, z, t)^2 dV = 1$$

мынадай түрге енеди

$$\int_{\mathbb{R}^N} \psi(x, y, z)^2 dV = 1. \quad (10)$$

Стационар мәселелердегі толқын функцияларының координаталық бөлімі болған $\psi(x, y, z)$ функциясын әдетте толқын функциясы деп атайды. Усының менен бірге уақытқа байланыстылық (8)-аңдатпа менен берилетуғынлығын есапқа алыу керек.

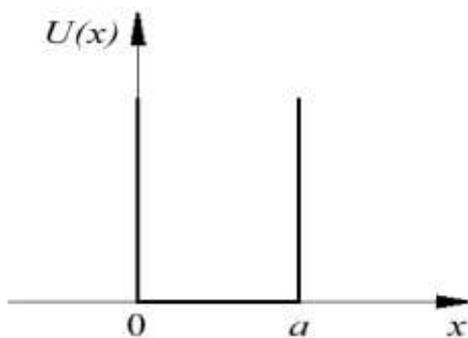
2-§. Өткермейтуғын дийуалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше

Квант механикасының стационар мәселелерін қарауды таллау үшін ең әпийуайы болған мәселеден баслаймыз. Бул мәселе өткермейтуғын дийуалларға ийе (яғный дийуаллары шексиз бийик болған) потенциал шуқырдағы бөлекшенің қозғалысы болып табылады. Үш өлшемлі мәселелер қаралғанда бундай шуқырларды потенциал қуты деп те атайды. Бундай жағдайдағы қозғалыстың өзине тән өзгешеліктері [энергияның квантланыуы, энергия қаддилеринің азғыныуы (вырождение энергетических уровней) хәм басқалар]] шеклі тереңлікке ийе потенциал шуқыр үшін да қарап өтиледі

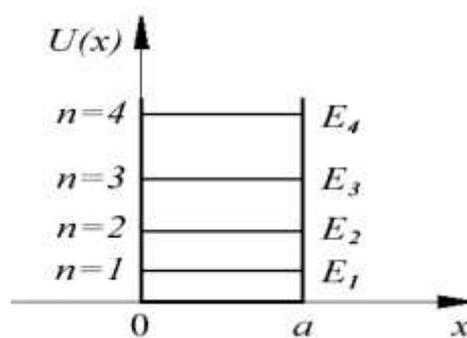
Бир өлшемлі потенциал шуқыр. Бир өлшемлі дийуалларының бийиклігі шексиз тууры мүйешлі потенциал қутыдағы бөлекшени қараймыз. Бул жағдайда бөлекшенің энергиясы $U(x)$

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

шамаларына тең болады. Шуқырдың ишінде $U(x)$ тың шамасы турақлы хәм нолге тең, ал шуқырдың сыртларында шексизлікке айланады. (3-сүүрет).



3-сүүрет.



4-сүүрет.

Бөлекшенің x көшери бағытындағы бир өлшемлі қозғалысы үшін Шредингер теңлемесі былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \psi = 0. \quad (11)$$

Потенциал шуқырдың сыртында потенциал энергия шексизлікке айланатуғын болғанлықтан (11)-теңлеменің орынланыуы үшін $\psi(x)$ функциясының нолге айланыуы керек, яғный $\psi(x) \equiv 0$. Бул жағдай дийуаллары шексиз бийик болған шуқырдан бөлекшенің шыға алмайтуғынлығын аңғартады (демек бундай шуқырдың дийуаллары арқалы бөлекше өте алмайды деген сөз). Үзліксизлік шәрті шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең

болатуғынлығын аңғартады, яғный $\psi(x)$ функциясы $x = 0$ хәм $x = a$ ноқатларында нолге айланады.

Солай етип шуқырдағы бөлекшениң қозғалысы мәселеси

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0, \quad 0 < x < a \quad (12)$$

теңлемесин шешиўге алып келинеди. Шегаралық шәртлери

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0.$$

Жаңа белгилеў киргиземиз

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}. \quad (13)$$

Бундай жағдайда (12)-теңлеме тербелислер теориясынан белгили болған теңлемеге айланады

$$\psi' + k^2\psi = 0.$$

Бул теңлемениң шешими

$$\psi(x) = A \sin kx + a \quad (14)$$

түринде жазылады.

$\psi(0) = 0$ шегаралық шәртин пайдалансақ

$$A \sin \alpha = 0$$

аңлатпасын аламыз. Буннан $\alpha = \pm\pi m$ екенлиги келип шығады. $m = 1, 2, \dots$ m ниң жуп мәнислеринде $\psi(x) = A \sin kx$, ал тақ мәнислеринде $\psi(x) = A \cos kx$ функцияларын алатуғынымызды атап өтемиз. Бирақ физикалық мәниске $\psi(x)$ толқын функциясының өзи емес, ал оның модулиниң квадраты $\psi(x)^2$ ийе. Модульдиң квадраты m шамасын сайлап алыўдан, яғный $\psi(x)$ функциясының белгисинен ғәрезли емес. Сонлықтан $\alpha = 0$ деп есаплаўымызға болады.

Екинши шегаралық шәрт $\psi(a) = 0$

$$A \sin ka = 0$$

теңлигине алып келеди. Бул теңлик $A \neq 0$ болған жағдайлар ушын

$$ka = \pm\pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

(14)-шешимге кириўши $n = 0$ болған жағдайдың мәселениң шәртин қанаатландырмайтуғынлығын атап өтемиз. Себеби $n = 0$ болғанда $\psi \equiv 0$ шәртиниң орынланыўы керек, ал бул жағдай бөлекшениң шуқырда жоқ екенлигине сәйкес

келеді. Сонлықтан n шамасының нолге тең болуыын мәселеден шығарып таслау керек.

(13)-аңлатпаны (15)-аңлатпаға қойып дийуаллары өткермейтуғын потенциал шуқырдың ишинде қозғалыушы бөлекшениң E_n толық энергиясы ушын аңлатпа аламыз

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

Алынған энергия спектри (16) ның әхмийетли өзгешелиги оның дискретлиги болып табылады. Потенциал шуқырдың ишиндеги бөлекше (16)-аңлатпа жәрдеминде анықланған энергияның тек дискрет, квантланған мәнисине ийе болады (2-сүүрет). Шредингер теңлемесиниң шешиминиң өзинен өзи энергияның квантланыуына алып келмейтуғынлығын атап өтеміз. Квантланыу толқын функциясы ушын жазылған шегаралық шәртлерден, яғный потенциал шуқырдың шегараларында толқын функциясының нолге тең екенлигинен келип шығады.

(16)-аңлатпадағы шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясын анықлайтуғын n санын квант саны, ал сол n ге сәйкес келиуши энергияның мәниси болған E_n шамасын энергияның қәдди деп атайды. Бөлекшениң ең киши энергияға ийе қалын (бундай қалда $n = 1$) оның тийкарғы қалы деп атаймыз. Басқа барлық қаллар қозған қаллар болып табылады. $n = 2$ шамасы биринши қозған қалға, $n = 3$ шамасы екінши қозған қалға сәйкес келеді (қәм тағы басқалар).

Тийкарғы қалда турған бөлекшениң энергиясының мәниси нолден өзгеше екенлигин атап өтеміз. Бул нәтийже анықсызлық қатнастарына сәйкес келеді қәм квант механикасының барлық мәселелери ушын улыуымалық болып табылады. Классикалық физикада болса нолге тең болған минималлық энергияға шуқырдың ишиндеги тынышлықта турған бөлекше ийе болады. Квант механикасында бундай тынышлықтағы қал пүткіллей орын алмайды.

Энергия спектриниң дискретлигин толығырақ таллаймыз. $n -$ қәм $n + 1 -$ қәддилер арасындағы энергия қәддилериниң айырмасы ΔE_n шамасын табамыз

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n + 1) .$$

ΔE_n шамасының мәнисин айқын жағдайлар ушын бақалаймыз.

1-жағдай. Массасы $m \approx 10^{-27}$ кг қәм өлшеми $a \approx 0,1$ м болған ыдыстағы газдың молекуласын қараймыз. Бундай жағдайда

$$\Delta E_n \approx 6,8 \cdot 10^{-20} \cdot n \text{ эВ}$$

шамасына ийе боламыз. Қоңсылас энергия қәддилери арасындағы айырма молекулалардың жыллылық қозғалысларының энергиясы болған kT шамасынан жүдә киши болып шықты (өжире температураларында $kT \approx 2,6 \cdot 10^{-2}$ эВ). Бундай жағдайда қозғалыушы молекулалардың тутас энергия спектри қаққында айта аламыз.

2-жағдай. Металлдағы еркин электронды қараймыз ($m = 0,9 \cdot 10^{-30}$ кг, $a \approx 0,01$ м). Бул жағдайда

$$\Delta E_n \approx 7,5 \cdot 10^{-15} \cdot n \text{ эВ}$$

хәм бул жағдайда да қәддилер арасындағы энергияның айырмасы металдағы электронлардың энергиясына салыстырғанда (энергиясының шамасы ~ 1 эВ ке тең) жүдә киши. Бирақ (бул VI бапта көрсетиледи) макроскопиялық өлшемлердеги потенциал шуқырдағы электрон ушын дискрет қәддилердің болыуы принципаллық әхмийетке ийе.

3-жағдай. Атомдағы еркин электронды қараймыз ($a \approx 10^{-10}$ м). Бундай жағдайда қоңсылас қәддилер арасындағы айырма

$$\Delta E_n \approx 0,75 \cdot 10^2 \cdot n \text{ эВ.}$$

Бул атомдағы электронның байланыс энергиясына ($E_{\text{байл.}} \sim 10$ эВ) салыстырғанда әдеуір сезилерликтей шама болып табылады. Сонлықтан бул жағдайдағы энергия спектринің дискретлигин есапқа алмауға болмайды.

Потенциаллық шуқырдағы бөлекшениң энергиясының спектрин таллауды жуумақлау алдында оның және бир қәсийетин қараймыз. ΔE_n шамасының E_n шамасына қатнасын есаплаймыз.

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n + 1}{n^2}.$$

n квант санының үлкейиуи менен бул қатнастың мәниси кемейеди $\frac{\Delta E_n}{E_n} \approx \frac{2}{n}$. Сонлықтан энергиялық спектрдің дискретлиги n ниң өсиуи менен кемейеди. Бул нәтийже сәйкЕгерк принципи деп аталатуғын әхмийетли болған физикалық принциптиң көриниуи болып табылады. Бул сәйкЕгерк принципи бойынша n квант санының үлкен мәнислеринде, яғный $n \rightarrow \infty$ шеклеринде квант механикасы классикалық механикаға өтеди.

Бир өлшемли шуқырдағы бөлекшениң толқын функциялары. Енди бир өлшемли потенциал шуқырда жайласқан бөлекшениң толқын функцияларын талқылауға өтемиз. (15)-аңлатпаны есапқа алып (14)-аңлатпадан мынаған ийе боламыз

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

A көбейтиушиси (10)-толқын функциясының нормировка шәртинен табылады

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(x) dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx = A^2 \frac{a}{2} = 1.$$

Солай етип A ушын

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

аңлатпасына ийе боламыз хәм сонлықтан дийуалларының бийиклиги шексиз болған бир өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекше ушын

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n x}{a} \quad (17)$$

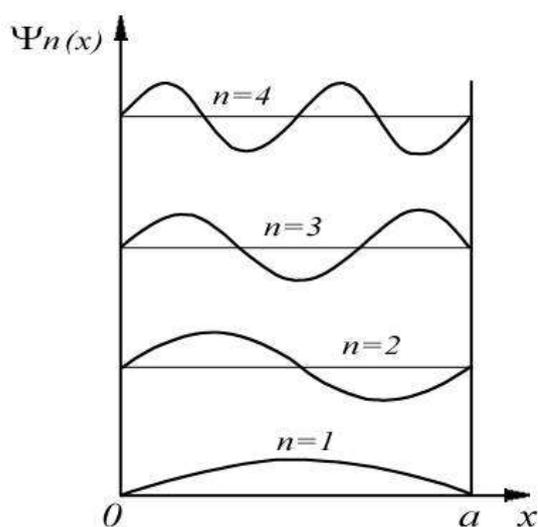
түрдегі толқын функцияларын аламыз. Бул аңлатпада $0 < x < a$, $n = 1, 2, 3, \dots$ Улыұмалық теорияға сәйкес (3.5 ти қарау керек) бул функциялар ортонормировкаланған функциялар болып табылады. Яғный

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}.$$

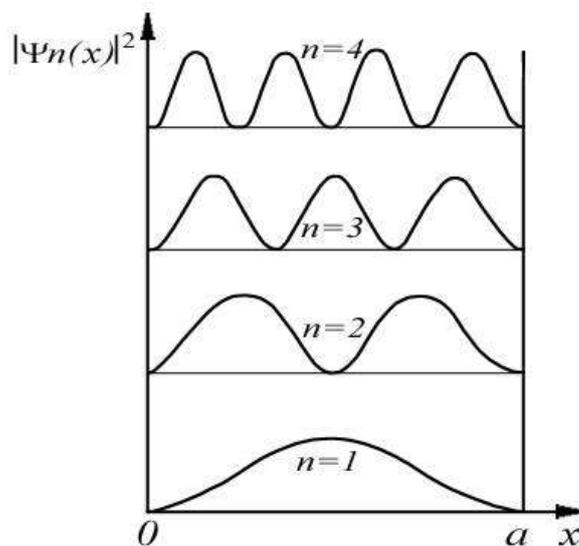
Бул аңлатпада δ_{mn} арқалы 1 хәм 0 мәнислерине ийе болатуғын Кронекер символы белгиленген

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{(егер } m = n \text{ болса)} \\ 0 & \text{егер } m \neq n \text{ болса.} \end{cases} \quad (18)$$

n квант санының төрт мәнисине сәйкес келетуғын $\psi_n(x)$ толқын функциялары 5-сүүретте келтирилген. n квант санының хәр қыйлы мәнислерине сәйкес келиуши толқын функциялары бир биринен үлкен айырмаға ийе болады. Егер координата басын шуқырдың ортасына көширсек n квант санының тақ мәнисине сәйкес келиуши толқын функцияларының координаталардың жуп функциясы, ал n квант санының жуп мәнисине сәйкес келиуши толқын функцияларының координаталардың тақ функциясы болатуғынлығын көремиз. n квант санының мәниси бир шамасына өзгерсе толқын функциясының x көшерин кесип өтетуғын ноқатларының саны да 1 ге артады.



5-сүүрет.



6-сүүрет.

Табылған толқын функцияларының өзлерине тән қәсийетлериниң бири шуқырдың шегарасындағы тууындының үзилiske түсиуинде (секириуе ушырауында) көринеди. Бул секириу бөлекшениң потенциал энергиясы болған $U(x)$ шамасының шексизликке айланыуы менен байланысly. Шекли тереңликке ийе болған шуқырда (бул жағдай 4-параграфта талланады) толқын функциясының тууындысы шуқырдың шегарасында секириуе ушырамайды, яғный толқын функциясы бир қәлипте өзгереди.

6-сүүретте толқын функциясының модулиниң квадратының (яғный $\psi_n(x)^2$ шамасының) графиги көрсетилген. $\psi_n(x)^2$ шамасының бөлекшени шуқырдың

ишинде табыўдың итималлығының тығызлығын беретұғынлығын еске салып өтемиз.

Хәр қыйлы n лер ушын бөлекшелердің хәр қыйлы халлары ушын итималлықтың тығызлықлары хәр қыйлы болатұғынлығы көринип тур. Мысалы тийкарғы халда турған бөлекшени (яғный $n = 1$ болған жағдайда) шуқырдың орайында табыўдың итималлығы ең үлкен мәниске ийе болады. Ал биринши қозған халда (яғный $n = 2$ болғанда) бөлекшени шуқырдың орайында табыўдың итималлығы нолге тең. Соның менен бирге бөлекшени шуқырдың орайының оң хәм шеп тәреплеринде бирдей итималлық пенен табыў мүмкин. Бул жағдай классикалық бөлекшениң шуқырда жайласыўынан пүткиллей басқа. Классикалық бөлекшени шуқырдың қәлеген ноқатында табыўдың итималлығы бирдей.

Шуқырдың ишиндеги $x_1 \leq x \leq x_2$ областта бөлекшени табыўдың итималлығы

$$P = \int_{x_1}^{x_2} \psi_n^2 dx \quad (19)$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады.

Математикалық көз-қарастан өткізбейтуғын дийўалларға ийе бир өлшемли потенциал қутыдағы бөлекшениң қозғалысы хәққындағы мәселе ушлары бекитилген тардың (струнаның) тербелиси хәққындағы мәселеге усайды. Еки жағдайда да шуқырдың кеңлигинде (тардың узынлығында) пүтин сан еселенген ярым толқын узынлығы жайласыўы керек ($a = n \frac{\lambda}{2}$). Биз қарап атырған жағдайда λ хәққында гәп етилгенде шуқырдың ишиндеги бөлекшениң де Бройль толқын узынлығы болған ψ_{db} шамасын түсинемиз.

Еки өлшемли потенциал шуқыр. Дийўалларының бийиклиги шексиз болған (дийўаллары шексиз бийик, сонлықтан бөлекшени өткермейтуғын) еки өлшемли туўры мүйешли потенциал шуқырды қараймыз. Бундай жағдайда бөлекшениң потенциал энергиясы $U(x, y)$ төмендегидей түрге ийе болады

$$U(x, y) = \begin{cases} 0, & \text{егер } x, y \in \Omega \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } x, y \notin \Omega \text{ болса.} \end{cases}$$

Бул аңлатпада $\Omega = \{x, y : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2\}$ арқалы x, y тегислигиндеги туўры мүйешли область белгиленген (7-сүўрет). Бир өлшемли жағдайдағыдай потенциал шуқырдың сыртында $\psi(x, y) \equiv 0$. Шуқырдың ишинде x хәм y көшерлери бағытындағы қозғалыслар бир биринен ғәрезсиз болғанлықтан $\psi(x, y)$ функциясын

$$\psi(x, y) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \quad (20)$$

көбеймеси түринде излеймиз. Бул аңлатпада $\psi_1(x)$ арқалы тек x координатасына ғәрезли болған толқын функциясы, ал $\psi_2(y)$ арқалы тек y координатасынан ғәрезли болған толқын функциясы белгиленген. (20) толқын функциясын (6) Шредингер теңлемесине қойсақ

$$\Delta \psi(x, y) + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x, y) = 0$$

ямаса

$$\psi_2 y \frac{d^2 \psi_1 x}{dx^2} + \psi_1 x \frac{d^2 \psi_2 y}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi_1 x \psi_2 y$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпасын еки тәрәпин де $\psi_1 x \psi_2 y$ көбеймесине бөлсек

$$\frac{1}{\psi_1 x} \frac{d^2 \psi_1 x}{dx^2} + \frac{1}{\psi_2 y} \frac{d^2 \psi_2 y}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \quad (21)$$

аңлатпасына өтеміз. (21) диң шеп тәрәпиндеги биринши қосылыўшы тек x координатасынан, ал екинши қосылыўшы тек y координатасынан ғәрезли. Олардың қосындысы турақлы шамаға тең болғанлықтан қосылыўшылардың өзлери де турақлы шамаға тең болады, яғный

$$\begin{aligned} \frac{1}{\psi_1 x} \frac{d^2 \psi_1 x}{dx^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_1, \\ \frac{1}{\psi_2 y} \frac{d^2 \psi_2 y}{dy^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} E_2. \end{aligned}$$

Бул аңлатпаларда E_1 хәм E_2 арқалы бирликлери энергияның бирлигиндей болған шамалар белгиленген. Қала берсе $E_1 + E_2 = E$. Солай етип еки өлшемли мәселе ушын Шредингер теңлемеси еки бир өлшемли теңлемеге айрылады екен

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \psi_1 x}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_1 \psi_1 x &= 0, \\ \frac{d^2 \psi_2 y}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_2 \psi_2 y &= 0. \end{aligned} \quad (22)$$

Бундай теңлемелердиң шешимлерин биз жоқарыда алған едик. Демек $\psi_1 x$ хәм $\psi_2 y$ функциялары

$$\begin{aligned} \psi_{1,n_1} x &= \frac{2}{a_1} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1}, \\ \psi_{1,n_2} y &= \frac{2}{a_2} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2}. \end{aligned}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпалардағы n_1 хәм n_2 квант санлары $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$ мәнислерин қабыл етеди. Демек еки өлшемли туўры мүйешли шексиз бийик дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекшениң толқын функциясы былайынша жазылады екен:

$$\psi_{n_1, n_2} x, y = \frac{4}{a_1 a_2} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2}. \quad (23)$$

Бул аңлатпада $0 < x < a_1$, $0 < y < a_2$ хәм $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$ Еки өлшемли шуқырда жайласқан бөлекшениң энергиясы

$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{n_1^2}{a_1} + \frac{n_2^2}{a_2} \quad (24)$$

аңлатпасының жәрдеминде есапланады. Бул аңлатпада да $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$

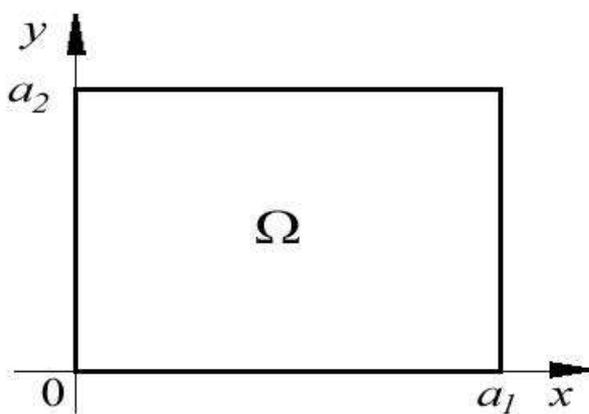
Бөлекшениң энергиясының спектри (24) дискрет болып табылады хәм n_1 және n_2 квант санларынан гәрезли.

Енди квадрат потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда $a_1 = a_2 = a$. Бундай жағдайда бөлекшениң энергия спектри

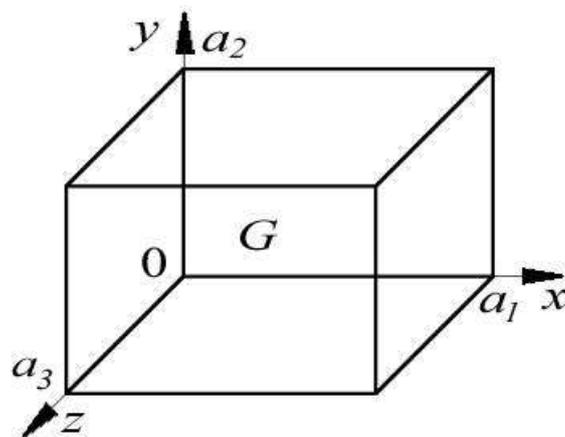
$$E_{n_1, n_2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n_1^2 + n_2^2 \quad (25)$$

түрине ийе. Бул аңлатпада да $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$

(25)-аңлатпадан энергия қәддилериниң айныўы ҳаққындағы дәслепки түсиниклерге ийе бола аламыз. Бул аңлатпада n_1 хәм n_2 квант санларына байланыслы болған бир E_{n_1, n_2} энергия қәддине $n_1 \neq n_2$ болған жағдайда бөлекшениң хәр қыйлы еки ҳалының (бул еки ҳал ψ_{n_1, n_2} хәм ψ_{n_2, n_1} толқын функциялары менен тәрийипленеди) сәйкес келетуғынлығын көрсетеди. Бөлекшениң бир неше ҳаллары сәйкес келетуғын энергия қәддин айныған ҳал (вырожденный уровень), ал бир қәддиге сәйкес келетуғын ҳаллардың санын айныў саны (кратность вырождения) деп атайды. Еки өлшемли квадрат потенциал шуқырда $n_1 \neq n_2$ болған шәрти орынланатуғын энергия қәддиниң айныў саны екиге тең. Бөлекшениң тек бир ҳалы сәйкес келетуғын энергияның қәддине айнымаған деп атаймыз. Еки өлшемли квадратлық потенциал шуқырда $n_1 = n_2$ болған энергия қәдилери айнымаған қәддилер болып табылады.



7-сүүрет.



8-сүүрет.

Үш өлшемли потенциал шуқыр. Дийўаллары шексиз бийик болған үш өлшемли потенциал шуқырдағы (потенциал қутыдағы) бөлекшени қараймыз. Туўры мүйешли параллелопипедтиң ишки областын $G = x, y, z : 0 < x < a_1, 0 < y < a_2, 0 < z < a_3$ арқалы белгилеймиз (8-сүүрет). Бул мәселеде $U(x, y, z)$ потенциалы

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{егер } (x, y, z) \in G \text{ болса} \\ \infty, & \text{егер } (x, y, z) \notin G \text{ болса.} \end{cases}$$

түрине ийе болады. Потенциал шуқырдың сыртында бөлекшениң толқын функциясы $U(x, y, z) \equiv 0$. Еки өлшемлі жағдайды қараған жағдайдағыдай бул жағдайда да толқын функциясын

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) + \psi_2(y) + \psi_3(z)$$

түрінде ізлейміз. Бул аңлатпада $\psi_1(x)$ функциясы тек x координатасынан, $\psi_2(y)$ функциясы тек y координатасынан, ал $\psi_3(z)$ функциясы тек z координатасынан ғәрезли.

Еки өлшемлі шуқырдағы мәселени шешіудің усылындағыдай үш өлшемлі жағдайда үш бир өлшемлі теңлеме аламыз

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_1 \psi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_2(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_2 \psi_2(y) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_3(z)}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_3 \psi_3(z) &= 0. \end{aligned}$$

Бул аңлатпада $E_1 + E_2 + E_3 = E$. G областының шегараларында (ямаса потенциал ящиктиң өткермейтуғын дийўалларында) бул теңлемелердің шешимлери нолге айланады. Усы жағдайдың жәрдемінде (яғный потенциал қутының өткізбейтуғын дийўалларында) бөлекшениң толқын функциясының түри

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \frac{8}{a_1 a_2 a_3} \sin \frac{\pi n_1 x}{a_1} \sin \frac{\pi n_2 y}{a_2} \sin \frac{\pi n_3 z}{a_3} \quad (26)$$

хәм онын энергиялық спектри

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} + \frac{n_3^2}{a_3^2} \right) \quad (27)$$

анықланады. Бул аңлатпаларда n_1, n_2 хәм n_3 квант санлары $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$ мәнислерин қабыл етеди. Үш өлшемлі потенциал шуқырда бөлекшениң толқын функциясы да, энергиясы да үш квант санынан ғәрезли болатуғынлығын атап өтеміз.

Енди бөлекшениң кублық потенциал шуқырдың ишиндеги қозғалысын қараймыз. Бул жағдайда $a_1 = a_2 = a_3 = a$. Усыған сәйкес энергия спектри

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (28)$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада да $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$

Кублық шуқырда $n_1 = n_2 = n_3$ болған жағдайда энергия қәддилери айнымаған болады. Энергияның басқа қәддилериниң барлығы да айныған болып шығады. Кублық шуқырдағы энергия қәддилериниң айныў саны хәққындағы мәселе 4-мәселеде шешиледи.

3-§. Потенциал табалдырық хәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы

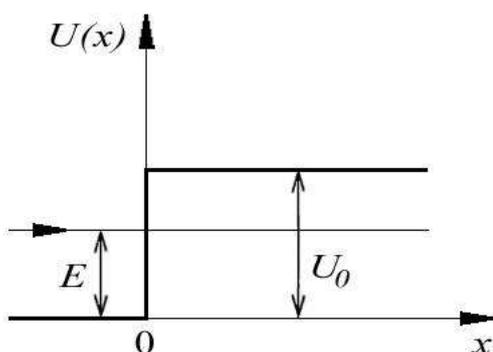
Жоқарыдағы параграфта кеңисликтің шекленген областындағы бөлекшениң қозғалысы қарап өтилди. Бундай қозғалысты финитлик қозғалыс деп атаймыз. Енди күш майданында жайласқан бөлекшениң шексизликке кете алатуғын қәбилетликке ийе болатуғын жағдайды қараймыз. Басқа сөз бенен айтқанда енди бөлекшениң инфинитлик қозғалысын үйренемиз.

Потенциал табалдырық областындағы бөлекшениң қозғалысы. Потенциал энергиясы

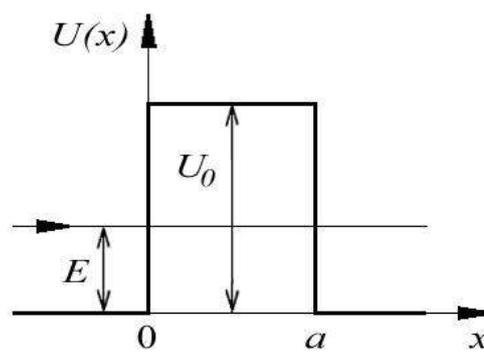
$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{егер } x < 0 \text{ болса} \\ U_0, & \text{егер } x > 0 \text{ болса.} \end{cases}$$

түрине ийе күш майданындағы бөлекшениң қозғалысын қараймыз.

Бундай жағдайда бөлекше потенциал табалдырық областында жайласқан деп атайды. Табалдырықтың шегарасында, яғный $x = 0$ болған жағдайда, бөлекшениң потенциал энергиясын шекли болған U_0 шамасына бирден өзгереді (секирмели түрде өзгереді) (7-сүўрет).



7-сүўрет.



8-сүўрет.

Табалдырықтың шеп тәрепин I саны менен белгилеймиз ($x \leq 0$). Соның менен бирге усы область ушын алынған барлық шешимлерди де 1 индекси жәрдемінде айырып көрсетемиз. Табалдырықтың оң тәрепин ($x \geq 0$) II саны менен, ал сәйкес шешимлерди айырып көрсетиў ушын 2 индексин пайдаланамыз.

Бундай күш майданында Шредингер теңлемеси төмендегидей түрлерге ийе болады:

I областта

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi_1 = 0.$$

II областта

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)\psi_2 = 0.$$

Мейли бөлекшениң энергиясы E потенциал табалдырықтың бийиклиги U_0 шамасынан киши болсын (яғный $E < U_0$). Бундай жағдайды бийик потенциал табалдырық жағдайы деп атайды.

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad \text{жәм} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (29)$$

белгилеулерин пайдаланып I жәм II областлары ушын Шредингер теңлемелерин аламыз

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \quad (30a)$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0. \quad (30b)$$

(30)-теңлемелердің шешимлери

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad (31a)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \quad (31b)$$

функциялары болып табылады.

Жоқары потенциал табалдырық бар болған жағдайда I жәм II областларындағы бөлекшениң қалларын тәрийиплейши ψ_1 жәм ψ_2 функцияларының пүткіллей хәр қыйлы түрге ийе болатуғынлығын атап өтемиз. ψ_1 толқын функциясындағы биринши қосылыўшыға x көшериниң бойы менен $-\infty$ тен табалдырық областына, яғный шеп тәрәптен оң тәрәпке тарқалатуғын тегис де Бройль толқыны сәйкес келеди. ψ_1 толқын функциясындағы екінши қосылыўшы x көшериниң бойы кери тәрәпке (оң тәрәптен шеп тәрәпке) тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди.

Тап сол аңлатпадағы e^{ikx} аңлатпасының ҳақыйқатында да тегис толқынды тәрийиплейтуғынына исениў ушын стационар қалдағы (8) толқын функциясы ушын жазылған ўақытқа байланыслы болған $e^{-i\omega t}$ көбейтиўшисин еске түсириў керек. e^{ikx} ны $e^{-i\omega t}$ ға көбейтсек $e^{-i(kx-\omega t)}$ аңлатпасын аламыз. Бул x көшери бойлап оң бағытта тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди. Тап сол сыяқлы e^{-ikx} аңлатпасы x көшери бойлап кери тәрәпке қарай тарқалатуғын тегис де Бройль толқынына сәйкес келеди.

Солай етип (31a) аңлатпасындағы $\psi_1(x)$ толқын функциясы табалдырыққа келип түсиўши жәм табалдырықта шағылысқан тегис де Бройль толқынларының қосындысынан турады екен. Ал $\psi_2(x)$ толқын функциясы болса (бул толқын функциясының бөлекшениң II областтағы қозғалысын тәрийиплейтуғынын еске түсиремиз) дәреже көрсеткишлери ҳақыйқый сан болған (31b) еки экспонентаның қосындысынан турады.

Енди толқын функцияларына қойылатуғын шәртлерди пайдаланамыз. Толқын функциясының мәниси шекли болыўы керек. Ал x тың мәниси шексизликке умтылғанда $\psi_2(x)$ толқын функциясының мәниси де шексизликке умтылады. Сонлықтан бул қосылыўшының алдында турған коэффицент A_2 ниң мәнисиниң нолге тең болыўы талап етиледі. Табалдырықтың бийиклиги U_0 шекли болғанлықтан I жәм II областларды бөлип турған шегарада толқын функциясы тек ғана үзликсиз болып қалмастан, тегис те болыўы шәрт (яғный үзликсиз туўындыға ийе болыўы керек). Сонлықтан еки областты бир биринен айырып турған шегараның еки тәрәпинде толқын функцияларының хәр қыйлы түрлерге ийе

болатуғынлығын көрдик. Ал еки орталықты бир биринен ажыратып турған шегарадағы толқын функцияларының хәм олардың туўындыларының мәнислерин бир бирине теңлестириў толқын функцияларын хәм олардың туўындыларын бир бирине жалғастырыў атамасын (сшивка волновых функций хәм их производных) алды. Бул жағдайда жалғастырыў шәрти

$$\begin{aligned}\psi_1 0 &= \psi_2 0, \\ \psi_1' 0 &= \psi_2' 0\end{aligned}$$

ямаса

$$\begin{aligned}A_1 + B_1 &= B_2, \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 &= -k_2 A_2.\end{aligned}\quad (32)$$

түрлерине ийе болады. (32)-теңлемелер системасы B_1 хәм B_2 коэффициентлерин A_1 коэффициентин арқалы аңлатыўға, яғный табалдырыққа келип түсетуғын де Бройль толқынының амплитудасы арқалы аңлатыўға мүмкиншилик береді. Бундай мәселелерде физикалық мәниске ийе барлық шамалар (бундай шамалар қатарына бөлекшениң табалдырықтан шашыраў коэффициентин, өтиў коэффициентин хәм басқалар киреди) B_1 хәм B_2 коэффициентлериниң A_1 коэффициентине қатнасы түринде көрсетиле алады. Сонлықтан улыўмалықты жоғалтпай $A_1 = 1$ деп ала аламыз. Бундай жағдайда (32)-аңлатпадан B_1 хәм B_2 ушын

$$B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}, \quad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}\quad (33)$$

аңлатпаларын аламыз.

Солай етип бийик табалдырық жағдайында бөлекшениң толқын функциялары төмендегидей түрге ийе болады екен

$$\psi_1 x = e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \quad (34a)$$

$$\psi_2 x = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-ik_2 x}, \quad x > 0. \quad (34b)$$

(32)-теңлемелер системасының k_1 менен k_2 коэффициентлериниң қәлеген мәнисинде, яғный энергия E ниң қәлеген мәнислеринде ($E < U_0$ екенлигин еске саламыз) шешимге ийе болатуғынлығын атап өтемиз. Бул бөлекшениң үзликсиз энергия спектрине ийе болатуғынлығын аңғартады.

Бөлекшениң бийик табалдырықта кери қарай шағылысыўының итималлығын анықлаўшы шағылысыў коэффициентин анықлаймыз. Өзиниң физикалық мәнисин бойынша шағылысыў коэффициентин R былайынша есапланады:

$$R = \frac{J_{\text{шағ}}}{J_{\text{к.т.}}}\quad (35)$$

Бул аңлатпада $J_{\text{шағ}}$ (шағылысыўшы) хәм $J_{\text{к.т.}}$ (келип түсиўши) арқалы итималлық ағысы тығызлығы белгиленген. Олар сәйкес табалдырыққа түсиўши [(34a) аңлатпадағы биринши қосылыўшы] хәм табалдырықта шашыраўшы [(34a)

аңлатпадағы екінші қосылыўшы] толқынларға тийисли. Итималлық ағысының тығызлығы векторының толқын функциясының жәрдемінде қалай анықланатуғынлығын еске саламыз [(3.19)-аңлатпаға қараңыз]

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \psi \text{grad} \psi^* - \psi^* \text{grad} \psi . \quad (36)$$

(34a) хәм (36)-аңлатпаларды есапқа алып

$$J_{\text{к.т.}} = \frac{\hbar k_1}{m},$$

$$J_{\text{шағ}} = \frac{\hbar k_1}{m} \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}^2$$

аңлатпаларына ийе боламыз. Бул аңлатпаларды (35)-аңлатпаға қойып

$$R = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}^2 = 1$$

формуласын аламыз.

Бөлекшениң II областқа өтиўиниң итималлығын анықлаўшы табалдырық арқалы өтиў коэффициентини D

$$D = \frac{J_{\text{өтиўши}}}{J_{\text{к.т.}}}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада $J_{\text{өтиўши}}$ арқалы табалдырық арқалы өтиўши (34b) $\psi_2 x$ толқын ушын итималлықтың ағысының тығызлығы векторы белгиленген. $\psi_2 x$ толқын функциясын (36)-аңлатпаға қойсақ $J_{\text{өтиўши}} = 0$, хәм усы жағдайға сәйкес $D = 0$ болып шығады.

Солай етип бийик табалдырық ушын $R = 1$ хәм $D = 0$ хәм $R + D = 1$ шәрти орынланады.

Енди бийик потенциал табалдырықтың II областындағы бөлекшениң қәсийетлерин көремиз. Бөлекшениң толқын функциясы $\psi_2 x$ [(34b) аңлатпасына қараңыз] нолге тең емес хәм x пенен бирликте экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди. Ал бул жағдай бөлекшениң табалдырық астында болыў (бул жағдайда бөлекшениң энергиясы E оның U_0 потенциал энергиясынан кем болады) итималлығының нолге тең емес екенлигин билдиреди. Классикалық механиканың көз-қараслары бойынша бөлекше ушын бул область қадаған етилген болады. Себеби $E < U_0$ шәрти кинетикалық энергияның мәнисиниң терис мәниске ийе болатуғынлығын аңғартады. Бирақ квант механикасының көз-қараслары бойынша бул жерде ҳеш қандай қарама-қарсылық жоқ. Кинетикалық энергия p импульстиң функциясы, ал потенциал энергия оның x координатасының функциясы болып табылады. Ал анықсызлық принципи бойынша координата менен импульсти бир ўақытта дәл анықлаў мүмкин емес. Сонлықтан квант механикасында бөлекшениң толық энергиясын бир ўақытта дәл анықланған кинетикалық хәм потенциал энергиялардың қосындысы деп қараўға болмайды (бул ҳаққында 2.3-параграфта айтылып өтилген еди).

Алынған нәтийже макроскопиялық бөлекшелер ушын өтиў қадаған етилген областларға микробөлекшелердиң өте алатуғынлығын көрсетеди. II областта бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы

$$\begin{aligned}
 w_2 x &= \frac{dP}{dx} = \psi_2(x)^2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-2k_2 x} = \\
 &= \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} x}
 \end{aligned} \tag{37}$$

аңлатпасының жәрдемінде анықланады хәм оның шамасы бөлекшениң m массасынан, энергиялардың $U_0 - E$ айырмасынан хәм табалдырықтың шегарасынан қашықтық x тан ғәрезли.

(37)-аңлатпадағы экспоненциаллық көбейтиўшениң мәнисин электрон ушын баҳалаймыз. $U_0 - E = 1$ деп алайық, $x = 10^{-10}$ м болғанда (яғный табалдырықтан қашықтық атомның өлшемінде болғанда)

$$e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} x} \approx 0,29$$

шамасына ийе боламыз. Демек бул жағдайда экспоненциаллық көбейтиўши сезилерликтей мәниске ийе болады екен хәм бул өз гезегінде II областта бийик потенциал табалдырықтан тап сондай аралықта электронды табыўдың итималлығының мәнисиниң жеткиликли дәрежеде үлкен екенлигин көрсетеди. $x = 10^{-9}$ м болғанда

$$e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} x} \approx 4,54 \cdot 10^{-8}.$$

Бул жағдайда табалдырықтан $x = 10^{-9}$ м қашықтықта электронның болыўының итималлығының оғада киши екенлигин билдиреди. Алынған баҳалар электронның табалдырық арқалы II областқа атомның өлшемлери менен барабар болған ($x = 10^{-10}$ м) қашықтыққа шекем кире алатуғынлығын көрсетеди.

Солай етип бийик табалдырықтан бөлекшениң шағылысыў коэффициенти $R = 1$ болса да, яғный шағылысыў толық болса да, шағылысыўдың табалдырықтың өзінде (яғный I хәм II областлар арасындағы шегарада) жүзеге келиўиниң шәрт емес екенлигин көрсетеди. Базы бир шамаға тең итималлық пенен бөлекше II областқа кирип, кейин қайтып шыға алады.

Биз қарап атырған қубылыстың классикалық физикада да аналогының бар екенлигин атап өтиў қызықты. Бул толқын оптикасындағы толық ишки шағылысыў қубылысы болып табылады. Толық ишки шағылысыў қубылысы жақтылық оптикалық жақтан тығызырақ областтан оптикалық жақтан кем тығызлыққа ийе орталыққа өткенде бақланады. Усы қубылыста жақтылық оптикалық тығызлығы кем орталыққа өте алады. Бирақ бундай жағдайда оның амплитудасы $\psi_2(x)$ сыяқлы экспоненциаллық нызам бойынша кемейеди.

Енди табалдырыққа келип түсиўши бөлекшениң энергиясы E потенциал табалдырықтың бийиклиги U_0 ден жоқары болған, яғный $E > U_0$ болған жағдайды қараймыз. Бундай табалдырықты пәс потенциал табалдырық деп атайды хәм I менен II областлар ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, \tag{38a}$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_2^2\psi_2 = 0. \quad (38b)$$

Бул аңлатпалардағы k_1 менен k_2

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \quad \text{хәм} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)} \quad (39)$$

формулалары менен анықланады. (38)-формулаларды шешип

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < 0, \quad (40a)$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad x > 0 \quad (40b)$$

функцияларына ийе боламыз. Табалдырыққа бөлекше x тың терис мәнисли тәрәпинен жақынлайды деп есаплаймыз (яғный шеп тәрәптен оң тәрәпке қарай қозғалады). Бундай жағдайда $\psi_1(x)$ функциясының биринши қосылыўшысы табалдырыққа келип түсиўши де Бройль толқынын, ал $\psi_1(x)$ функциясының екинши қосылыўшысы табалдырықтан шағылысқан де Бройль толқынын береді. Тап сол сыяқлы $\psi_2(x)$ функциясының биринши қосылыўшысы табалдырық арқалы өткен де Бройль толқынына сәйкес келеді. II областта шағылысқан толқын болмағанлықтан (40b) аңлатпасындағы B_2 коэффициентин нолге тең етип алыў керек болады, яғный $B_2 = 0$.

Шегарадағы толқын функцияларын хәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәрти A_1, B_1 хәм A_2 коэффициентлери ушын төмендегидей теңлемелерге алып келеді

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2, \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2. \end{aligned} \quad (41)$$

Биз жоқарыда қарап өткен жағдайдағыдай $A_1 = 1$ деп есапласақ, онда B_1 хәм A_2 ушын

$$B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad A_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

аңлатпаларын аламыз. Солай етип пәс потенциал табалдырық областында қозғалыўшы бөлекшениң толқын функциялары ушын

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= e^{ik_1 x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1 x}, \\ \psi_2(x) &= \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2 x} \end{aligned} \quad (42)$$

аңлатпаларын алады екенбиз. Бул аңлатпалардағы k_1 менен k_2 (39)-аңлатпаларда берилген.

Табалдырықта шағылысыў (R) хәм табалдырықтан өтиў (D) коэффициентлерин табыў ушын келип түсиўши, шағылысқан хәм табалдырықтан өткен (сынған) де Бройль толқынлары ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. Биз тапқан толқын функцияларын (36)-аңлатпаға қойсақ

$$\begin{aligned}
J_{\text{к.т.}} &= \frac{\hbar k_1}{m}, \\
J_{\text{шағылысыўшы}} &= \frac{\hbar k_1}{m} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}^2, \\
J_{\text{өтиўши}} &= \frac{\hbar k_1}{m} \frac{2k_1}{k_1 + k_2}
\end{aligned} \tag{43}$$

формуларын аламыз. (35) пенен (43) лерди есапқа алғанда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыў коэффициентини ушын мына формуланы аламыз:

$$R = \frac{J_{\text{шағылысыўшы}}}{J_{\text{к.т.}}} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}}^2. \tag{44}$$

(44)-формуладан $E > U_0$ болған жағдайда пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыўының итималлығының нолге тең емес екенлиги көринеди. Яғный бундай жағдайда дийўал үстиндеги шағылысыў (надбарьерное отражение) деп аталатуғын шағылысыўдың жүзеге келиўи мүмкин. Бул нәтийже квант механикасының нәтийжеси болып табылады хәм бөлекшелерде толқынлық қәсийеттиң бар екенлиги менен түсиндириледі. Классикалық механика нызамларына бағынатуғын макроскопиялық бөлекше пәс потенциал табалдырық арқалы өткенде шағылыспайды, ал табалдырық арқалы өткенде оның кинетикалық энергиясының шамасы кемейеди.

Қызықлы жағдайды атап өтеміз. Егер I областтағы потенциалды $U(x) = U_0$, ал II областтағы потенциалды $U(x) = 0$ деп алсақ, онда берилген энергияға ийе бөлекше ушын шағылысыў коэффициентиниң мәниси R өзгермейди. Бундай жағдайда келип түсиўши хәм шағылысыўшы де Бройль толқынлары арасындағы фазалар айырмасы ғана өзгериске ушырайды. (42)-аңлатпада $\psi_1(x)$ функциясының биринши e^{ik_1x} хәм екінши $\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{ik_1x}$ қосылыўшыларының мәнислери бирдей. Сонлықтан k_1 менен k_2 лердиң орынларын алмастырған менен нәтийже өзгериске ушырамайды, яғный шағылыстырыў коэффициентиниң мәниси өзгермейди. Бул нәтийжени басқа сөз бенен де айтыў мүмкин: пәс потенциал табалдырықтан бөлекшениң шағылысыў коэффициентини бөлекшениң қозғалыс бағытына ғәрезли емес.

"Төңкерилип қойылған" табалдырықта келип түсиўши хәм шағылысқан толқынлардың амплитудаларының белгилери хәр қыйлы. Бул фазалар айырмасы π ге тең болған жағдайға сәйкес келеди. Яғный "Төңкерилип қойылған" табалдырықта шағылысқанда толқынның фазасы секирмели түрде π шамасына өзгереді. Оптика менен салыстырыўды даўам етип де Бройль толқыны ушын I область II областқа салысырғанда тығызырақ орталық болып табылады.

(37)- хәм (44)-аңлатпаларға сәйкес бөлекшениң табалдырық арқалы өтиў коэффициентини

$$D = \frac{J_{\text{өтиўши}}}{J_{\text{к.т.}}} = \frac{4k_1k_2}{k_1 + k_2}^2 = 4 \frac{\sqrt{1 - U_0/E}}{1 + \sqrt{1 - U_0/E}}^2 \tag{45}$$

шамасы болып табылады. Солай етип пәс потенциал табалдырық жағдайында да $R + D = 1$. Бундай нәтийжени итималлықларды қосыу көз-қарасы бойынша күтиу тәбийий. Себеби келип түсиуши бөлекше табалдырықтан шашырайды ямаса II областқа өтеди.

Бөлекшениң табалдырық областында қозғалысын тәрийиплейтуғын де Бройль толқынының I хәм II областлар шегарасында сынатуғынлығын атап өтиу керек. Бул сыныу бөлекшениң тезлигиниң өзгериуи хәм де Бройль толқынының узынлығы λ_{db} шамасының өзгериуи менен байланыслы. Сыныу көрсеткиши n мынадай түрге ийе болады:

$$n = \frac{\lambda_{db}^{(1)}}{\lambda_{db}^{(2)}} = \frac{v_1}{v_2}.$$

Бул аңлатпада $\lambda_{db}^{(1)}$ хәм $\lambda_{db}^{(2)}$ арқалы I хәм II областлардағы де Бройль толқынларының узынлықлары, ал v_1 хәм v_2 арқалы сол областлардағы де Бройль толқынларының тезликлери белгиленген. v_1 хәм v_2 шамаларынан бөлекшелердиң кинетикалық энергияларына өтсек

$$n = \frac{\sqrt{E - U_0}}{E} = 1 - \frac{U_0}{E}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Биз қарап атырған пәс табалдырық жағдайында ($E > U_0$) сыныу көрсеткиши $n < 1$. Бул жағдай бөлекше ушын I областтың II областқа салыстырғанда оптикалық жақтан тығызырақ екенлигин және бир рет дәлиллейди. "Төңкерилген" табалдырық жағдайында сыныу көрсеткиши

$$n' = \frac{1}{n} = \frac{1}{1 - \frac{U_0}{E}}$$

шамасына хәм бул шама бирден үлкен болады.

Бөлекшениң потенциал барьер арқалы өтиуи. Биз бул бөлимде рус тилиндеги "потенциальный барьер" сөзин қарақалпақ тилине "потенциал дийуал" ямаса "потенциал тосқынлық" деп аудармаймыз хәм "потенциал барьер" сөзин толығы менен қабыл етемиз.

Бөлекшениң потенциал энергиясын U арқалы белгилеймиз. Егер кеңисликтің бир областында U шамасының мәниси басқа областлардағы потенциал энергияның шамасынан үлкен болса, онда сол областты потенциал барьер деп атаймыз. Потенциал барьер областындағы бөлекшениң қозғалысын изертлеуді бир бир өлшемли тууры мүйешли потенциал шуқырды қарау менен баслаймыз (8-сүүрет).

Мейли, бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \text{ болғанда,} \\ U_0, & 0 < x < a \text{ болғанда,} \\ 0, & x > a \text{ болғанда.} \end{cases}$$

I арқалы барьердиң шеп тәрәпиндеги областты II арқалы $0 < x < a$ областын хәм III арқалы барьердиң оң тәрәпин белгилейик. Бөлекше барьерге x тың терис

мәніслери тәрәпинен жақынлайды, яғный шептен оң тәрәпке қарай қозғалады деп есаплаймыз. Бөлекшениң энергиясы E барьердиң бийиклиги U_0 шамасынан киши болған жағдайды, яғный $E < U_0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдайды үйренемиз. ($E > U_0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдай усы параграфтың 7-мәселесинде шешилген).

I, II хәм III областлар ушын Шредингер теңлемелери былайынша жазылады

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_3(x) &= 0.\end{aligned}\tag{47}$$

Бул аңлатпаларда $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ хәм $k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$.

Толқын функциялары (47)-теңлемелердиң шешимлери болады

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}, \\ \psi_2(x) &= A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}, \\ \psi_3(x) &= A_3e^{ik_1x} + B_3e^{-ik_1x}\end{aligned}\tag{48}$$

Әдеттегидей барьерге келип түсийши толқынның амплитудасы $A_1 = 1$ хәм $B_3 = 0$ деп есаплаймыз. Себеби бөлекшениң қозғалысында III областта шептен оң тәрәпке қарай тек өтиүйши толқын тарқалады.

Барьердиң шегараларында (яғный $x = 0$ хәм $x = a$ ноқатларында) толқын функцияларын хәм олардың туўындыларын жалғастырыў шәрти

$$\begin{aligned}1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ ik_1 - ik_1B_1 &= k_2A_2 - k_2B_2, \\ A_2e^{k_2a} + B_2e^{-k_2a} &= A_3e^{k_1a}, \\ k_2A_2e^{k_2a} + k_2B_2e^{-k_2a} &= ik_1A_3e^{k_1a}\end{aligned}\tag{49}$$

теңлемелери системасының пайда болыўына алып келеди. (49)-теңлемелер системасы төрт B_1, A_2, B_2, A_3 белгисизлерге ийе төрт теңлемеден турады. Бул система k_1 менен k_2 шамаларының, яғный энергия E ниң қәлеген мәніслеринде шешимлерге ийе болады. Демек энергия спектри үзликсиз спектр болып табылады деген сөз.

Бул мәселеде тийкарғы дыққатты бөлекшениң барьер арқалы өтиүйине аўдарамыз. (49)-системаны барьер арқалы өткен толқынның амплитудасы A_3 ушын шешип

$$A_3 = \frac{4ik_1k_2e^{ik_1a}}{k_1 - ik_2 e^{k_2a} - k_1 - ik_2 e^{-k_2a}}$$

аңлатпасын аламыз. Барьерге келип түсетуғын хәм барьер арқалы өтетуғын толқын ушын итималлықтың ағысының тығызлығын табамыз. (36)- хәм (48)-аңлатпаларды есапқа алған ҳалда

$$J_{\text{к.т.}} = \frac{\hbar k_1}{m},$$

$$J_{\text{өтиуші}} = \frac{\hbar k_1}{m} A_3^2.$$

формулаларына ийе болмыз. $J_{\text{к.т.}}$ және $J_{\text{өтиуші}}$ шамаларының мәнісін (37)-аңдатпаға қойсақ барьер арқалы өту коэффициентін табамыз

$$D = \frac{J_{\text{өтиуші}}}{J_{\text{к.т.}}} = A_3^2 = 1 + \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \operatorname{sh}^2 k_2 a. \quad (50)$$

Бұл аңдатпадағы гиперболалық синус

$$\operatorname{sh}(k_2 a) = \frac{1}{2} (e^{k_2 a} - e^{-k_2 a}).$$

Егер барьердің кеңлігі a үшін $k_2 a \gg 1$ шәрти орынланатуғын болса (жоқарыда келтирилген есаплаулар бұл шәрттің a ның мәнісі бір неше атомлық қатламның қалыңлығындай болған жағдайларда орынланатуғынлығын көрсетеді) $e^{-k_2 a} \ll 1$ және сонлықтан гиперболалық синусты экспонента менен алмастыру мүмкін

$$\operatorname{sh}(k_2 a) \approx \frac{1}{2} e^{k_2 a}.$$

Бұл жағдайда барьер арқалы өту коэффициенті төмендегіше анықланады:

$$D \approx \frac{16k_1^2 k_2^2}{k_1^2 + k_2^2} e^{-k_2 a}.$$

Бұл аңдатпаға k_1 менен k_2 ның мәнісін қойып

$$D \approx D_0 \exp \left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right]$$

формуласын аламыз. Бұл формуладағы

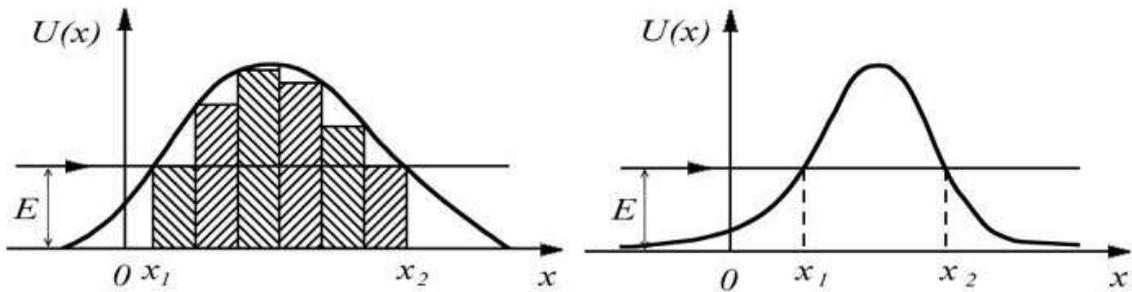
$$D_0 = 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0} \right)$$

шамасы $\frac{E}{U_0}$ ге қарата әстелик пенен өзгеретуғын функция болып табылады. Оның (D_0 дың) сан мәнісі 1 ге жақын. D шамасының мәселенің параметрлеринен тийкарғы ғәрезлігін экспонента береді. Сонлықтан потенциал барьер арқалы өту коэффициентінің мәнісін есаплағанда $D_0 \approx 1$ мәнісі қабыл етиледі. Бундай жағдайда D үшін жазылған аңдатпа

$$D \approx \exp \left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \right] \quad (51)$$

түрине енеді. (51)-формуладан D өтіу коэффициентінің барьердің кеңлігі a дан, бөлекшениң массасы m нен хәм энергиялар айырмасы $U_0 - E$ шамасынан күшли экспоненциаллық байланысқа ийе екенлігін көреміз.

Алынған нәтижелерди ықтыярлы формаға ийе потенциал барьер үшін улыўмаластырамыз. Буның үшін потенциал барьерди биринен соң бири жайласқан көп сандағы енсиз туўры мүйешли потенциал барьерлерден турады деп есаплаймыз (9а сүүрет). Барьердің формасы жеткиликли дәрежеде бир тегис өзгереді деп есаплаймыз (яғный барьердің бийиклігі де Бройль толқын узынлығындай қашықлықларда көп өзгериске ушырамайды деп есаплаймыз). Бундай жағдайда туўры мүйешли барьерлердің бийиклігі жоқарылайтуғын участкалардағы толқынлардың шағылысыўын есапқа алмаўға хәм толқынның әззилеўин тек жутылыўдың есабынан жүзеге келеди деп есаплаўға болады.



9-сүүрет. Ықтыярлы формадағы потенциал барьердің схемалық сүүрети.

i -туўры мүйешли барьер арқалы өтиўши де Бройль толқынын $i + 1$ барьерге келип түсиўши толқын деп қараймыз. Бөлекшениң избе-из жайласқан барьерлер арқалы өтиўиниң итималлығы хәр бир барьер арқалы өтиўдин итималлықларының көбеймесине тең. Сонлықтан өтиў коэффициенті D хәр бир барьер арқалы өтиў коэффициентлери D_i шамаларының көбеймесине тең

$$D = \prod_i D_i \approx \prod_i \exp \left[-\frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(U(x_i) - E)} \right] = \exp \left[-\sum_i \frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m(U(x_i) - E)} \right]. \quad (52)$$

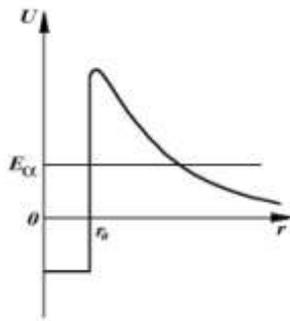
Бул аңлатпада Δx_i хәм $U(x_i)$ арқалы i - барьердің кеңлігі менен бийиклігі белгиленген. (52)-аңлатпада суммалаўдан интеграллаўға өтсек

$$D \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right] \quad (53)$$

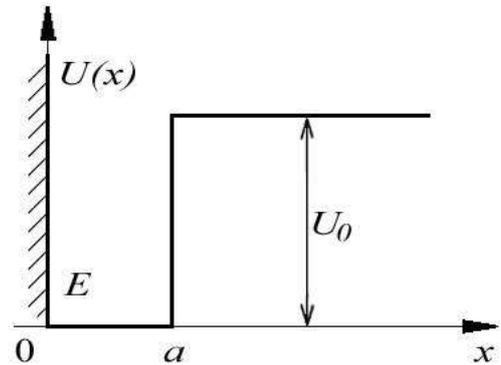
формуласына ийе боламыз. Бул аңлатпада x_1 менен x_2 арқалы $U(x) = E$ шәрти орынланатуғын координаталардың мәнислери белгиленген (9b сүүрет).

Радиоактивли α -ыдыраў. Бөлекшелердің потенциал барьер арқалы өтиўине және бир мысал радиоактивли ядролардың α -ыдыраўы болып табылады. Бундай ыдыраўда радиоактивли ядро өзинен α -бөлекшелерин шығарады. α -бөлекшеси гелий атомының ядросы болып табылады хәм ол еки протоннан хәм еки нейтроннан турады. α -бөлекшесин шығаратуғын ядроны ана ядро деп атайды. α -

бөлекшесин шығарған ядроның майданындағы усы α -бөлекшесиниң потенциал энергиясы 11-сүүретте келтирилген.



10-сүүрет.



11-сүүрет.

α -бөлекше менен ядро арасындағы қашықтық үлкен болғанда олар арасында Кулон ийтерисийүши күши тәсир етеди хәм бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze \cdot 2e}{r}$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада Ze арқалы α -бөлекше шығарған ядроның заряды, $2e$ арқалы α -бөлекшесиниң заряды белгиленген. α -бөлекшеси менен оны шығарған ядро арасындағы Кулон күши ядроның өлшемлери менен салыстырарлықтай қашықтықларға шекем тәсир етеди (яғный $r_0 \sim 10^{-14} - 10^{-15}$ м аралыққа шекем). $r \leq r_0$ қашықтықларында α -бөлекшелери менен ядро арасында күшлирек болған ядролық тартысыу күшлери тәсир етеди. Ядроның ишинде α -бөлекшеси потенциал шуқырдың ишинде жайласқан болады хәм ол ядродан тек туннель эффекти есабынан шыға алады. Туннелеудиң итималлығын есаплаулардың нәтийжелери шуқырдың формасынан күшли фәрезли емес. Сонлықтан шуқырды туұры мүйешли деп есаплауға хәм оның кеңлиги ядроның радиусы r_0 арқалы анықланады деп есаплауға болады.

Эксперименталлық изертлеулердиң нәтийжелери α -ыдыраудағы потенциал шуқырдың бийиклиги шама менен 20-30 МэВ шамасына тең екенлигин, ал нурландырылған α -бөлекшелериниң энергияларының мәнислери 5-6 МэВ шамасында екенлигин көрсетеди. Бул шама барьердиң бийиклигинен әдеуір киши хәм сонлықтан α -бөлекшелери ядро тәренинен тек туннель эффектиниң салдарынан шығарылады.

Ядро физикасында радиоактивли ыдырау нызамы белгили. Бул нызам эле ыдырамаған ядролардың санының уақытқа байланыслы өзгериуин сыпатлайды хәм

$$N t = N_0 e^{-\lambda t}. \quad (55)$$

түринде жазылады. Бул формулада N_0 арқалы дәслепки уақыт моментиндеги (яғный $t = 0$ уақыт моментиндеги) эле ыдырамаған (эле α -бөлекшелерин шығармаған) ядролардың саны белгиленген. Ал эле ыдырамаған ядроларды биз жоқарыда ана ядролар деп атаған едик. λ шамасы ыдырау турақлысы деп аталады хәм ядролардың ыдырау тезлигин сыпатлайды.

Ыдырау турақлысы λ менен α -бөлекшесиниң потенциал барьер арқалы D өтиу коэффициентин арасындағы байланысты табамыз. Мейли ядроның радиусы r_0 шамасына тең, ал α -бөлекшесиниң тезлиги v болсын. Бундай жағдайда α -

бөлекшесинің потенциал барьердің дийўалына ўақыт бирлигиндеги соқлығысыўларының саны $\frac{v}{2r_0}$ шамасына тең болады. Хәр бир соққыдағы туннеллениў итималлығы D шамасына, ал ядролардың улыўмалық саны N t болғанлықтан, t дан $t + dt$ ўақыт моментлерине шекемги α -бөлекшелерин шығарған ядролардың саны dN шамасына тең болады хәм оның мәнисин

$$dN = -N(t) \frac{v}{2r_0} D dt$$

формуласының жәрдемінде анықлаймыз. Бул формуладағы (-) белгиси dN ядролар санының еле ыдырамаған ядролардың есабынан қуралатуғынлығы менен байланыслы.

Екинши тәрәптән (55)-аңлатпаны дифференциаллап

$$dN = -\lambda N(t) dt$$

аңлатпасын аламыз. Бул еки аңлатпаны бир бири менен салыстырып

$$\lambda = \frac{v}{2r_0} D$$

формуласына ийе боламыз.

Демек ыдыраў турақлысының мәниси потенциал барьер арқалы өтиў коэффициентине (D шамасына) туўры пропорционал екен.

4-§. Шекли тереңликке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше

2-параграфта биз бөлекшениң дийўалларының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырдағы қозғалысын талқыладық. Тереңлиги шекли болған потенциал шуқырдағы бөлекшениң қозғалысын таллаўды биз басқышпа-басқыш алып барамыз хәм дәслеп тек бир дийўалының бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырды қараймыз (12-сүўрет). Бундай мәселе әмелий жақтан әхмийетке ийе. Себеби арасында тартылыс күшлери тәсир ететуғын еки бөлекше (буған мысал ретінде молекуланы пайда етиўши еки атомды қараўға болады) өзиниң түри бойынша биз қарайын деп атырған моделге жақын.

Тек бир шексиз бийик дийўалға ийе бир өлшемли шуқыр.

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_0, & x > a. \end{cases}$$

түриндеги бир өлшемли потенциал шуқырда қозғалыўшы бөлекшени қараймыз.

$x < 0$ болған жағдайда бөлекшениң потенциал энергиясы шексиз үлкен хәм сонлықтан оның толқын функциясы $\psi(x)$ нолге айланады. Сонлықтан бул мәселени шешкенде тийкарғы дыққатты $x > 0$ областтағы бөлекшениң қозғалысын үйрениўге қаратамыз.

$0 < x < a$ болған областты I, ал $x > a$ болған областты II арқалы белгилеймиз. Дәслеп бөлекшениң толық энергиясы $E < U_0$ болған жағдайды изертлеймиз (яғный

бөлекшени потенциал шуқырда жайласқан деп есаплаймыз). I область үшін Шредингер теңлемеси (6)

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0, \quad (56)$$

ал II область үшін

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)\psi_2(x) = 0 \quad (57)$$

түрине енеди. Белгилеулер киргиземиз:

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \quad \text{хәм} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}. \quad (58)$$

Усы аңлатпаларды пайдаланып (56)- хәм (57)-аңлатпаларды

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0, \quad (59a)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) = 0 \quad (59b)$$

түрине келтиремиз. (59)-теңлемелерди шешип $\psi_1(x)$ хәм $\psi_2(x)$ функцияларын табамыз

$$\psi_1(x) = A \sin k_1x + \alpha, \quad (60a)$$

$$\psi_2(x) = B e^{k_2x} + C e^{-k_2x}. \quad (60b)$$

Толқын функциялары үшін қойылатуғын шәртлерди пайдаланамыз. Толқын функциясы барлық ұақытта да шекли болыуы керек. Ал (60b)-аңлатпадағы биринши қосылыушы $x \rightarrow \infty$ шегинде шексиз өседі. Сонлықтан B коэффициентиниң нолге тең болыуын талап етиу керек болады. Буннан $\psi_2(x) = C e^{-k_2x}$ теңлемесине ийе боламыз.

Енди шегаралық шәртлерди таллауға өтемиз. Шуқырдың шеп шегарасындағы $\psi_1(x)$ толқын функциясының үзликсизлиги жоқарыда биз көрип өткендей $\psi_1(x) = 0$ теңлигин тәмийинлейди. Буннан $\alpha = 0$ екенлигине ийе боламыз. $x = a$ ноқатындағы толқын функцияларын хәм оның тууындыларын жалғастыруу шәрти

$$\begin{aligned} A \sin k_1a &= C e^{-k_2a}, \\ k_1A \cos k_1a &= -k_2 C e^{-k_2a} \end{aligned} \quad (61)$$

теңлемелер системасын береді. (61)-теңлемелердеги биринши теңлемени екінчисине бөлсек

$$\frac{1}{k_1} \operatorname{tg} k_1a = -\frac{1}{k_2} \quad (62)$$

қатнасына өтеміз. Бул қатнас болса шуқырдағы бөлекшениң энергия спектрин анықлайды.

(62)-теңleme трансцендент теңleme болып табылады. Сонлықтан E энергиясының мәнісін анық түрде есаплаудың мүмкіншилиги жоқ. Усы жағдайға байланысly (58)-аңлатпаны есапқа алған (62)-аңлатпа жәрдемінде бөлекшениң энергиясының спектриниң дискрет екенлигин, яғный шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланатуғынлығын көрсетиўге болады.

(62)- трансцендент теңleme

$$\sin k_1 a = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} k_1 a \quad (63)$$

түрине аңсат алып келинеди. (63)-теңлемениң оң хәм шеп тәреплерин $k_1 a$ көбеймесиниң функциялары деп есаплап олардың графиклерин сызамыз (13-сүүрет). Синусоида менен туўрының кесилисиў ноқатлары биз излеп атырған толық энергия E ниң мәніслерине сәйкес келетуғын (63)-теңлемениң коренлерин бередиди. (62)-аңлатпаға сәйкес $\operatorname{tg} k_1 a < 0$ болғанлықтан биз $k_1 a$ көбейтиўшисиниң тек

$$\frac{\pi}{2} + \pi m < k_1 a < \pi + \pi m$$

шәртин қанаатландыратуғын мәніслерин ғана есапқа аламыз. $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ 13-сүүретте $k_1 a$ ның мәніслериниң сәйкес областлары абсцисса көшеринде жуўан сызықлар менен көрсетилген.

Келтирилген графиклер бөлекшениң энергия спектриниң дискрет екенлигин көрсетеди. Потенциал шуқырдың тереңлиги U_0 хәм кеңлиги a қаншама үлкен болса (63)-теңлемениң оң тәрепине сәйкес келиўши графиктеги туўры сызықтың қыялығы сонша төмен хәм бул туўры синусоида менен көп санлы кесилисиў ноқатларына ийе болады. Демек потенциал шуқырда соншама көп энергия қәддилери жайласады деген сөз.

Шуқырда ең кемінде энергияның бир қәдди болатуғын шәртти табамыз. Бундай жағдайда (63)-теңлемениң оң тәрепине сәйкес келиўши туўрының қыялығын анықлайтуғын

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0 a^2}} < \frac{1}{\pi/2}$$

теңсизлигин қанаатландырыўы керек. Буннан $U_0 a^2$ ушын

$$U_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m} \quad (64)$$

шәртине ийе боламыз.

Бул аңлатпаны толығырақ таллаймыз. Усы шәрт орынланғанда ғана шуқыр ишиндеги бөлекше ушын Шредингер теңлемеси шешимге ийе болады, яғный шуқырдың ишинде кемінде бир қәдди болады. Бундай жағдайда шуқырдың ишиндеги бөлекшениң байланысқан қалы болады деп айтады. (64)-теңсизликтің шеп тәрепине тек потенциал шуқырдың параметрлери ғана киреди (оның кеңлиги a хәм тереңлиги U_0). Ал биз қарап атырған бөлекшениң типиди ушын (яғный оның массасы ушын) теңлемениң оң тәрепи константаға айланады.

Егер потенциал шуқыр жеткиликли дәрежеде терең ямаса жеткиликли дәрежеде кең болмаса (64)-шәрт орынланбайды. Бундай жағдайда шуқырдағы бөлекше ушын Шредингер теңлемеси шешимге ийе бола алмайды хәм усыған сәйкес потенциал шуқырға бирде бир энергия қәдди орналаса алмайды. Физикада усындай жағдайлар көп ушырасады. Мысалы еки нейтрон хәм еки протон арасында ядролық тартысуы күшлери тәсир етеди. Бирақ тәбиятта еки протоннан ямаса еки нейтроннан туратуғын байланысқан хал ушыраспайды. Себеби бундай бөлекшелердиң бир бири менен тәсирлесиўине сәйкес келетуғын потенциал шуқыр жеткиликли емес тереңликке хәм кеңликке ийе.

Протон менен нейтрон арасындағы тәсир етисиў күшиниң шамасы еки протон ямаса еки нейтрон арасындағы тәсир етисиў күшиниң шамасынан азмаз ғана үлкен. Усы азмаз айырма протон менен нейтрон арасындағы байланысқан хал – дейтронның пайда болыўы ушын жеткиликли. Протон менен нейтрон арасындағы тәсирлесиўге сәйкес келетуғын потенциал шуқырда энергияның тек бир қәдди жайласады. Демек дейтрон барлық ўақытта да тийкарғы халда жайласады, оның қозған халлары пүткиллей жоқ.

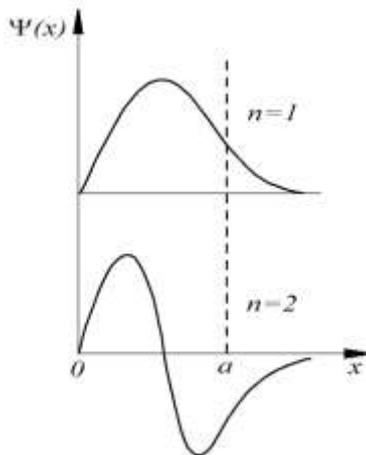
Биз қарап атырған мәселениң толқын функцияларын таллаўға қайтып келемиз. Жоқарыда $x < 0$ болғанда $\psi(x) \equiv 0$ теңлигиниң орынланатуғыны айтып өтилген еди. I областта, яғный потенциал шуқырда толқын функциясы

$$\psi_1(x) = A \sin k_1 x$$

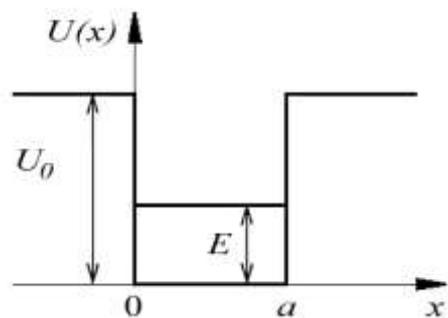
түрине ийе. Бул еки шексиз бийик дийўалға ийе шуқырда толқын функциясының осуилляцияланыўшы шешимге ийе болатуғынлығын көрсетеди. II областтағы толқын функциясының түри үлкен қызығыўшылық пайда етеди

$$\psi_2(x) = C e^{-k_2 x}.$$

$\psi_2(x)$ толқын функциясы потенциал шуқырдың сыртында нолге тең емес, ал x қашықлығына байланыслы экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Бул жағдай өз гезегинде бөлекшени табыўдың итималлығының потенциал шуқырдың сыртында да нолге тең болмайтұғынлығын аңғартады (7-мәселеге қараңыз). A хәм C константалары арасындағы қатнас нормировка шәртиниң жәрдеминде анықланады. Бул мәселе ушын толқын функцияларының сапалық түрлери 20-сүүретте келтирилген.



12-сүүрет.



13-сүүрет.

Енди $E > U_0$ болған жағдайды қараймыз. I хәм II областлар ушын Шредингер теңлемесин сәйкес

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0 \quad (65a)$$

хәм

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + k_2^2\psi_2(x) = 0 \quad (65b)$$

түрінде жазамыз. Бул аңлатпаларда $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ хәм $k_2 = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$.

Шуқырдың шегарасында $\psi_1(0) = 0$ екенлигин есапқа алғанда (65a) теңлемесиниң шешими

$$\psi_1(x) = A' \sin k_1 x = \frac{A'}{2i} (e^{ik_1 x} - e^{-ik_1 x}) \quad (66)$$

түрине ийе. (65b) теңлемесиниң шешимин былайынша жазамыз:

$$\psi_2(x) = D \sin k_2 x + \varphi = B' e^{ik_2 x} - C' e^{-ik_2 x}. \quad (67)$$

$x = a$ ноқатында функцияларды хәм олардың туўындыларын жалғастыруў операциясын орынласақ төмендегидей теңлемелер системасына өтеміз:

$$\begin{aligned} \frac{A'}{2i} (e^{ik_1 a} - e^{-ik_1 a}) &= B' e^{ik_2 a} - C' e^{-ik_2 a}, \\ \frac{A'}{2i} ik_1 (e^{ik_1 a} - e^{-ik_1 a}) &= ik_2 (B' e^{ik_2 a} - C' e^{-ik_2 a}). \end{aligned}$$

Бул теңлемелер системасын B' хәм C' амплитудаларына қарата шешсек, онда олардың A' амплитуда арқалы аңлатпаларын аламыз:

$$\begin{aligned} B' &= \frac{A'}{4i} e^{-ik_2 a} (e^{ik_1 a} \frac{k_1}{k_2} + 1) - e^{-ik_1 a} \frac{k_1}{k_2} - 1, \\ C' &= \frac{A'}{4i} e^{ik_2 a} (e^{ik_1 a} \frac{k_1}{k_2} - 1) - e^{-ik_1 a} \frac{k_1}{k_2} + 1. \end{aligned} \quad (68)$$

(68)-аңлатпалардың k_1 менен k_2 ниң қәлеген мәнислериндеги (яғный бөлекшениң энергиясының қәлеген мәнисиндеги) B' хәм C' амплитудаларының мәнислерин анықлайтуғынлығын атап өтеміз.

$E > U_0$. Бул $E > U_0$ шәрти орынланғанда бөлекшениң энергиясының үзликсиз спектрге ийе болатуғынлығын көрсетеди.

(66)- хәм (67)-толқын функцияларын таллаймыз. Олардың хәр қайсысы де Бройльдиң еки толқынының қосындысы болып табылады: e^{ikx} толқыны шеп тәрәптен оң тәрәпке қарай, ал e^{-ikx} толқыны оң тәрәптен шеп тәрәпке қарай. $+\infty$ тен келген толқынның (67-аңлатпадағы екинши қосылыўшы) бир бөлеги $x = a$ шуқырдың шегарасында шағылысады хәм (67)-аңлатпаның биринши қосылыўшысына үлес қосады. Қалған бөлеги сынады (66-аңлатпадағы екинши қосылыўшы). Буннан кейин толқын $x = 0$ дийўалында шағылысады (66-

аңлатпадағы биринши қосылыўшы) хәм шуқырдың $x = a$ шегарасында қайтадан сынады. Усының нәтийжесинде (57)-аңлатпаның биринши қосылыўшысына үлес қосады хәм шексизликке кетеди.

Шекли тереңликке ийе туўры мүйешли потенциал шуқыр. Шекли тереңликке ийе туўры мүйешли потенциал шуқырдың ишинде жайласқан бөлекшени қараймыз (13-сүүрет). Бундай модель атомның этирапындағы электронның қасындағы электронның қозғалысын сапалық түрде тәрийиплей алады. Сонлықтан атом физикасы менен қатты денелер физикасында кеңнен қолланылады.

Мейли бөлекшениң потенциал энергиясы

$$U = \begin{cases} U_0, & x < 0, \text{ I область} \\ 0, & 0 < x < a, \text{ II область} \\ U_0, & x > a, \text{ III область.} \end{cases}$$

түрине ийе болсын.

Дәслеп $E < U_0$ болған жағдайды қараймыз (яғный бөлекше шуқырдың ишинде жайласқан деген сөз). I хәм III областлар ушын (потенциал шуқырдан сыртта) Шредингер теңлемесин былайынша жазамыз

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi_{1,3} = 0$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} \text{ белгилеўин қабыл етемиз хәм}$$

$$\frac{d^2\psi_{1,3}}{dx^2} - k_1^2\psi_{1,3} = 0$$

теңлемесин аламыз.

Бул теңлеме

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x}, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x} \end{aligned}$$

түриндеги шешимлерге ийе болады. Толқын функциясының шекли болыўы ушын $B_1 = 0$ хәм $A_3 = 0$ болыўы шәрт.

II областта, яғный потенциал шуқырдың ишинде Шредингер теңлемеси

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_2 = 0$$

түрине ийе болады хәм $\psi_2(x) = C \sin(k_2 x + \alpha)$ осцилляцияланыўшы шешимге ийе.

Бул формулада $k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Солай етип бул мәселе ушын бөлекшениң толқын функциялары төмендегидей түрлерге ийе болады:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{k_1 x}, \\ \psi_2(x) &= C \sin(k_2 x + \alpha), \\ \psi_3(x) &= B_3 e^{-k_1 x}. \end{aligned} \tag{69}$$

$x = 0$ хәм $x = a$ ноқатларында толқын функцияларын хәм олардың туўындыларын жалғастырыў барысында

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \alpha &= \frac{k_2}{k_1}, \\ \operatorname{tg} k_2 a + \alpha &= -\frac{k_2}{k_1} \end{aligned}$$

еки аңлатпасын аламыз. Оларды

$$\begin{aligned} \sin \alpha &= \frac{\hbar k_2}{2mU_0}, \\ \sin(k_2 a + \alpha) &= -\frac{\hbar k_2}{2mU_0} \end{aligned}$$

түрине алып келиў қыйын емес. Бул еки аңлатпадан α ны жоғалтып

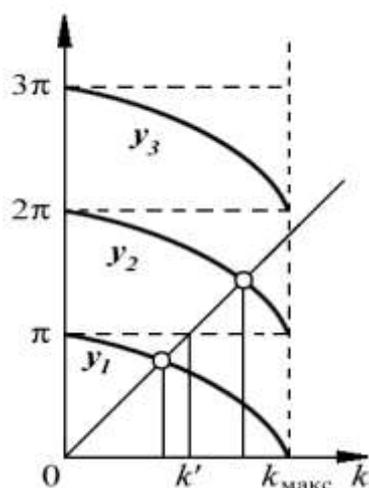
$$k_2 a = \pi n - 2 \arcsin \frac{\hbar k_2}{2mU_0}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (70)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпа болса шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергия спектрин анықлайды. n ниң терис мәнислери ямаса оның $n = 0$ болған мәниси мәселениң шәртин қанаатландырмайды. Себеби (70)-аңлатпаның шеп тәрепи терис мәниске ийе бола алмайды.

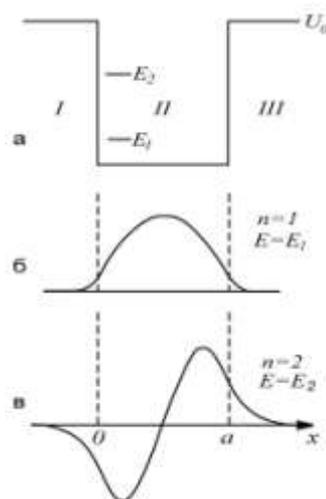
\arcsin функциясының аргументиниң мәниси 1 ден үлкен бола алмайды. Сонлықтан

$$\frac{\hbar k_2}{2mU_0} \leq 1$$

хәм k_2 шамасының мәниси $k_{2max} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0}$ шамасы менен шекленген.



14-сүүрет.



15-сүүрет.

Бул жағдайда да графикалық усыллардың жәрдеминде де шуқырдың ишиндеги бөлекшениң энергиясының квантланған, яғный (70)-аңлатпаның жәрдеминде анықланған энергия спектриниң дискрет екенлигин көрсетемиз. Буның ушын (70)-

теңлемениң шеп хэм оң тәрептериниң k_2 шамасынан байланысының графиклерин сызамыз. Шеп тәрепиниң графиги $y = k_2 a$ туўры сызығы болып табылады. Оның қыялығы шуқырдың кеңлиги a ның өсиўи менен өседи. (70)-теңлемениң шеп тәрийипиниң $n = 1, 2, 3$ мәнислери ушын сызылған графиклери y_1, y_2 хэм y_3 иймекликлери менен берилген. $y = k_2 a$ туўры сызығы менен y_i иймеклериниң кесилисиў ноқатлары (70)-теңлемениң коренлери болып табылады. Демек k_2 шамасының мәнислери, яғный оның менен байланыслы болған E энергияның мәнислериниң спектри дискрет болып шығады. Шуқырдың кеңлиги a қаншама үлкен болса, яғный $y = k_2 a$ туўры сызығы тик болса, онда ол y_i иймекликлери менен көп ноқатта кесилиседи. Хәр бир кесилисиў ноқаты энергияның белгили бир қәддине сәйкес келеди. $k_{2max} a < \pi n$ шәрти орынланса шуқырда n дана энергия қәдди болады. Демек бул жағдайда бөлекшениң n дана байланысқан халы жүзеге келеди деген сөз.

Шуқырдың тереңлиги U_0 киширейгенде k_{2max} шамасы да, усыған сәйкес шуқырдағы энергия қәддилери саны да киширейеди. $k_{2max} < \pi/a$ шәрти орынланғанда, яғный

$$U_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

шәрти орынланғанда шуқырда тек бир энергия қәдди қалады. Тереңлиги шекли болған туўры мүйешли потенциал шуқырда ең кеминде бир энергия қәддиниң, яғный бир байланысқан халдың болатуғынлығын атап өтемиз.

Шуқырдың тереңлиги шексиз үлкейгенде (яғный $U_0 \rightarrow \infty$ шәрти орынланғанда) (70) энергия спектриниң шексиз терең потенциал шуқыр ушын алынған (яғный дийўаллары шексиз бийик болған) (16)-спектрге өтетуғынлығына аңсат көз жеткерийге болады.

Биз қарап атырған мәселедеги (69)-толқын функцияларының сапалық түри 15-сүүретте келтирилген. Потенциал шуқырдың ишинде толқын функциялары синусоида түрине ийе, ал шуқырдан сыртта экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Үлкен энергияға ийе халлар ушын (яғный $U_0 - E$ айырмасы киши болғанда) толқын функциялары шуқырдың шетлеринде үлкен мәнислерге ийе болады хэм шуқырдан қашықласқанда әстелик пенен киширейеди.

Енди бөлекшениң энергиясы үлкен, яғный $E > U_0$ шәрти орынланатуғын жағдайды қараймыз. (6) Шредингер теңлемеси I, II хэм III областларда төмендегидей шешимлерге ийе болады:

$$\begin{aligned} \psi_1 x &= A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}, \quad x < a, \\ \psi_2 x &= A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}, \quad 0 < x < a, \\ \psi_3 x &= A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x}, \quad x > a. \end{aligned} \quad (71)$$

Бул аңлатпада

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (72)$$

(71)-аңлатпаға сәйкес бул толқын функцияларының хәр қайсысы еки де Бройль толқынының қосындысынан турады: биреўи $+x$ бағытында, ал екіншиси оған қарама-қарсы бағытта қозғалады. Анықлық ушын бөлекше шуқырға x тың терис мәнислери тәрептен жақынласады деп есаплайық (бул бөлекшениң шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалатуғынлығына сәйкес келеди). Бундай жағдайда $\psi_3 x$ ушын

жазылған аңлатпадағы екінші қосылыудың болмауы керек. Себеби бул қосылыушы бөлекшениң $+\infty$ тен шуқырға қарай қозғалыуына, яғный оң тәрәптен шеп тәрәпке қарай қозғалыуына сәйкес келеди. Демек B_3 коэффициентин нолге тең деп есаплайу керек.

ψ_1 x функциясындағы биринши қосылыушы шуқырға $-\infty$ тен келип түсетуғын толқынға, екіншиси шуқырда шағылысқан толқынға сәйкес келеди. ψ_2 x функциясындағы биринши қосылыушы $A_2 e^{ik_2 x}$ толқыны $x = 0$ шегарасында шағылысқан толқынды, екінші қосылыушы $x = a$ шегарасында шағылысқан толқынды береді. ψ_3 x толқын функциясы болса бир қосылыушыға ийе хәм ол өтиуши толқынға сәйкес келеди. Бул мәселеде де келип түсиуши толқынның амплитудасын 1 ге тең деп есаплаймыз (яғный $A_1 = 1$).

$x = 0$ хәм $x = a$ ноқатларында толқын функцияларын хәм олардың тууындыларын жалғастыруу шәртлери төмендегидей теңлемелер системаларына алып келеди

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ ik_1 - ik_1 B_1 &= ik_2 A_2 - ik_2 B_2, \\ A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} &= A_3 e^{ik_1 a}, \\ ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} &= ik_1 A_3 e^{ik_1 a}. \end{aligned}$$

Бул алгебралық теңлемелерди шешиу жолы менен B_1 , A_2 , B_2 хәм A_3 коэффициентлерин табамыз. Бул теңлемелер системасы k_1 менен k_2 параметрлериниң қәлеген мәнисинде шешимге ийе болғанлықтан (яғный энергия E ниң қәлеген мәнислеринде шешимге ийе болғанлықтан) бөлекше үзликсиз энергия спектрине ийе болады деген жуўмаққа келемиз.

Өткен толқынның амплитудасы A_3 ушын төмендегидей аңлатпа аламыз:

$$A_3 = \frac{4k_1 k_2 e^{ik_1 a}}{k_1 + k_2 \quad e^{ik_2 a} - k_1 - k_2 \quad e^{ik_2 a}}.$$

Бөлекшениң шуқырдың үсти менен өтиуи итималлығын характерлейтуғын D өтиу коэффициентини (37)-аңлатпаның жәрдемінде есапланады. Келип түсиуши хәм өткен толқынлар ушын итималлық ағысы тығызлығы векторы (36)-, (37)- хәм (70)-аңлатпаларға сәйкес

$$J_{\text{к.т}} = \frac{\hbar k_1}{m}, \quad J_{\text{өтиуши}} = \frac{\hbar k_1}{m} A_3^2$$

түрине ийе болады. Солай етип

$$D = A_3^2 = \frac{4k_1 k_2 e^{ik_1 a}}{k_1 + k_2 \quad e^{ik_2 a} - k_1 - k_2 \quad e^{ik_2 a}} \quad (73)$$

формуласына ийе боламыз. (73)-аңлатпаға (72)-аңлатпадан k_1 менен k_2 шамаларының мәнислерин қойсақ

$$D = 1 + \frac{U_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - U_0)} \quad (74)$$

формуласын аламыз. (4/74)-аңлатпадан өтиў коэффициентини D ның бөлекшениң энергиясы E менен потенциал шуқырдың тереңлиги U_0 арасындағы айырмаға байланыслы екенлиги көринип тур. $E - U_0$ айырмасы улыўма жағдайларда 1 ден киши. Бул жағдай ҳәтте $E > U_0$ болған ситуацияларда да бөлекшениң потенциал шуқырдағы шағылысыўының итималлығының нолге тең емес екенлигин аңғартады. Классикалық физикада пүткиллей жоқ бундай қубылыс бөлекшеде толқынлық қәсийетлердин бар болыўы менен түсиндириледі.

$\sin^2 k_2 a = 0$ болғанда өтиў коэффициентини D бирге тең болады. Бундай жағдайда бөлекше шуқырдың шегараларында шағылыспайды. Бул шәрт $k_2 a = \pi n$ болғанда, яғный бөлекшениң энергиясы

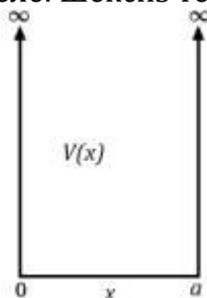
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (75)$$

шамаларына тең болған жағдайларда орынланады.

5-§. Питкерий қәнигелик жумысында келтирилген квант механикасының мәселелерин Mathematica компьютерлик алгебра системасының жәрдемінде шешиў

Биз төменде питкерий қәнигелик жумысында келтирилген барлық мәселелерди шешиў ушын арналған математикалық программаны жазамыз ҳәм бул программаның жәрдемінде алынған нәтийжелерди де келтирип өтемиз. Программа Mathematica компьютерлик алгебра системасының 5- ҳәм 6-версиялары ушын жазылған.

1-мәселе: Шексиз терең потенциал шуқырдағы бөлекше



Схемасы:

```
Needs["PlotLegends`"]
```

```
Clear["Global`*"];
```

а бөлими.

```
eq1=0==(V-En) ψ[x]-(ħ² ψ''[x])/(2 m);
```

```
eq2=eq1/.V->0;
```

```
krule=En->(ħ² k²)/(2 m);
```

```
schrod=Solve[eq2/.krule,ψ[x]][[1,1]].Rule->Equal;
```

```
dsol=DSolve[schrod,ψ,x][[1,1]];
```

б бөлими.

```
sol1=Reduce[{ψ[0]==0,ψ[a]==0}/.dsol];
```

```
En=ħ² k²/(2 m) /. k -> nπ/a;
```

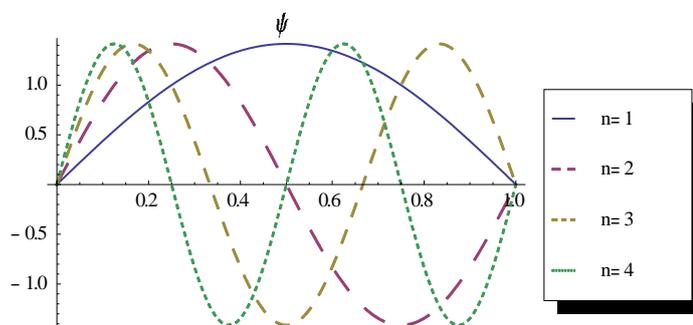
```
ψ[x,n]=ψ[x]/.dsol/.{C[1]->0,k->nπ/a};
```

```
normEq=1==Integrate[ψ[x,n]²,{x,0,a}]/Simplify[#,Element[n,Integers]]&//Solve[#,C[2]]
```

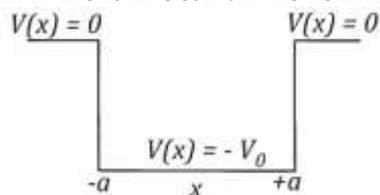
```
[[2,1 ]]&;
ψ[x_,n_] = Ψ[x,n]/.normEq//Simplify;
с бөлими.
table= Table[Integrate[ψ[x,i]ψ[x,j],{x,0,a}],{i,4},{j,4}];
TableForm[table,TableHeadings→{Table[ψ[i],{i,4}],Table[ψ[j],{j,4}]}
```

	ψ[1]	ψ[2]	ψ[3]	ψ[4]
ψ[1]	1	0	0	0
ψ[2]	0	1	0	0
ψ[3]	0	0	1	0
ψ[4]	0	0	0	1

```
Plot[Evaluate[Table[ψ[n,x],{n,4}]/._{a→1}],{x,0,1},PlotStyle→{{},Dashing[{0.05`}],Dashing[{0.03`}],Dashing[{0.01`}]},PlotLabel→Style[ψ,FontSize→14,FontWeight→Bold],PlotLegend→{"n=1","n=2","n=3","n=4"},LegendPosition→{1,-(1/2)}
```



2: Тереңлиги шекли болған потенциал шуқырдағы бөлекше



Схемасы:

```
Clear["Global`*"];
```

а бөлими.

```
schrodeq=0==(V-En) ψ[x]-(\hbar^2 ψ''[x])/(2 m);
```

```
EWrule={En→(kW^2 \hbar^2)/(2 m)+V};
```

```
ψ[x]/.DSolve[schrodeq,ψ[x],x][[1,1]]/.EWrule//ExpToTrig //Simplify //PowerExpand;
```

```
kWrule= kW→\frac{\sqrt{2} m(En-V)}{\hbar} / V→-V0/.En→-Wn;
```

```
ψW[x_]=cSym Cos[kW x]+cAsym Sin[kW x];
```

```
ELRrule={En→(kLR^2 \hbar^2)/(2 m)};
```

```
ψ[x]/.DSolve[schrodeq,ψ[x],x][[1,1]]/.V→0/.ELRrule //Simplify// PowerExpand;
```

```
kLRrule= kLR→\frac{\sqrt{2} m En}{\hbar} /.En→-Wn //PowerExpand;
```

```
qLRrule= qLR→\frac{\sqrt{2} m Wn}{\hbar};
```

```
ψ[x]/.DSolve[schrodeq,ψ[x],x][[1,1]]/.V→0/.ELRrule /.kLR→I qLR//Simplify// PowerExpand;
```

```
ψR[x_]= cR E^{qLR x} ; (*x>a*)
```

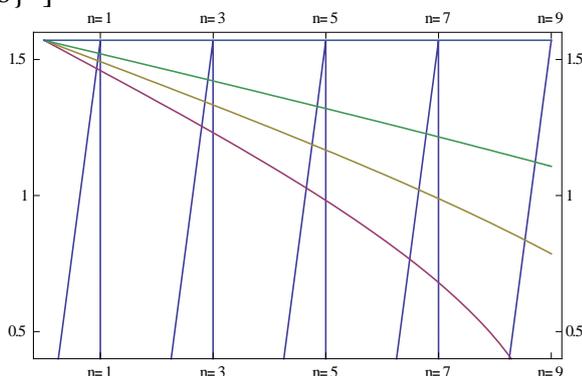
```
ψL[x_]= cL E^{+qLR x} ; (*x<-a*)
```

б бөлими.

```

eq1= { (ψL[ x]-ψW[ x]==0) /. {x→ -a},
        (ψW[ x]-ψR[ x]==0) /. {x→ +a},
        (ψL'[x]-ψW'[x]==0) /. {x→ -a},
        (ψW'[x]-ψR'[x]==0) /. {x→ +a} };
(eq2=eq1/.cAsym→0)//Column;
eq3=Reduce[{ eq2 , cL≠0,cR≠0,kW≠0,qLR ≠0, cSym≠0,Cos[ a kW]≠0 }//Flatten, {cL,cR}];
eq3 //Column;
symSol= Solve[eq3 ,{cL,cR} ] //Simplify//Flatten
symEn=Tan[ a kW]== qLR/kW;
eq4=Reduce[{ eq1/.cSym→0, cL≠0,cR≠0,kW≠0,qLR≠0,cAsym≠0,Cos[ a kW]≠0 }//Flatten,
{cL,cR} ] ;
eq4//Column;
asymSol= Solve[eq4 ,{cL,cR} ] //Simplify//Flatten;
asymEn=Tan[ a kW]== - kW/qLR;
с бѳлими.
values={ a→1,m→1, ħ→1,V0 →{ 100, 200, 500,∞ } } ;
nRule=Wn→V0-(n2 π2 ħ2)/(8 a2 m);
kRules={ kW→ $\frac{2m(V0-Wn)}{\hbar}$ , qLR →  $\frac{2 Wn m}{\hbar}$  };
eq5 =symEn/.kRules /.nRule//PowerExpand
Sign[n]^ = +1;
pt1=Plot[{ ArcTan[eq5[[1]]],ArcTan[eq5[[2]]]}/.values//Evaluate, {n,0,9 },
Frame→True,FrameTicks→
{{ {1,"n=1"},{3,"n=3"},{5,"n=5"},{7,"n=7"},{9,"n=9"}},{0,0.5,1,1.5}},
PlotRange→{.4,1.6} ]

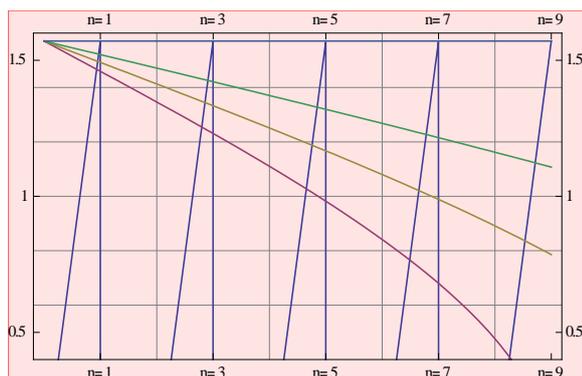
```



```

text={
Text[ "V0=∞", {6,1.5}],
Text[ "V0=500", {6,1.3}],
Text[ "V0=200", {6,1.1}],
Text[ "V0=100", {6,0.8}];
Show[pt1,Graphics[text] ,GridLines→Automatic]

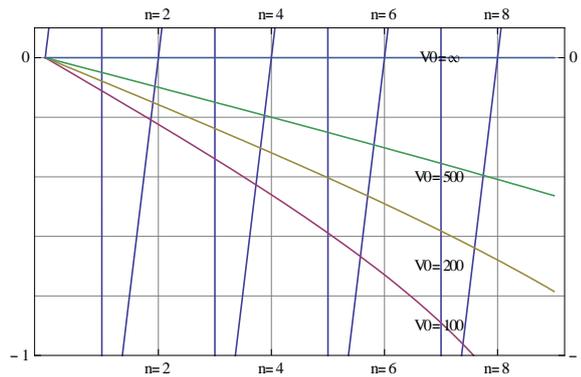
```



```

eq6 =asymEn/.kRules /.nRule//PowerExpand
text={
  Text[ "V0=∞", {7,0}],
  Text[ "V0=500", {7,-.4}],
  Text[ "V0=200", {7,-.7}],
  Text[ "V0=100", {7,-.9 }]];
Plot[{ ArcTan[eq6[[1]]],ArcTan[ eq6[[2]]]} /.values//Evaluate, {n,0.0 ,9},
  Frame→True, FrameTicks→{{{2,"n=2"},{4,"n=4"},{6,"n=6"},{8,"n=8"}},{-1.5,-
1,0,0.5,1,1.5}},
  PlotRange→{-1 , .1}, GridLines→Automatic, Epilog→ text ]

```



d бөлими.

```

nValues[eq_,potential_,guess_]:=
(n/.FindRoot[eq/.{m→1,a→1,ħ→1,V0→potential}]/Evaluate,{n,guess}][[1]]
symGuess= {0.9, 2.9, 4.9, 6.9, 8.9};
symValues= {nValues[eq5,100,#]
  ,nValues[eq5,200,#]
  ,nValues[eq5,500,#]}& /@ symGuess;
asymGuess={1.9,3.9,5.9,7.9 };
asymValues={nValues[eq6,100,#]
  ,nValues[eq6,200,#]
  ,nValues[eq6,500,#]}& /@ asymGuess;
(Partition[Sort[{symValues,asymValues}]/Flatten],3)//
TableForm[#,TableSpacing→{0,2},TableHeadings→{{"n=1","n=2","n=3","n=4","n=5","n=6","n=7",
"n=8","n=9"},{"V0=100","V0=200","V0=500"}}]&)

```

	V0=100	V0=200	V0=500
n=1	0.933848	0.952339	0.969335
n=2	1,86702	1.90442	1.9386
n=3	2.79876	2.85598	2.90773
n=4	3.72819	3.80671	3.87664
n=5	4.65414	4.75628	4.84526
n=6	5.5749	5.70426	5.8135
n=7	6.48773	6.65015	6.78128
n=8	7.38736	7.59322	7.74848
n=9	8.26041	8.53247	8.71498

```

Partition[Sort[{symValues,asymValues}]/Flatten],3]// TableForm[#,

```

TableSpacing→{0,2},TableHeadings→{{"n=1","n=2","n=3","n=4","n=5","n=6","n=7","n=8","n=9"},{"V0=100","V0=200","V0=500"} }]&

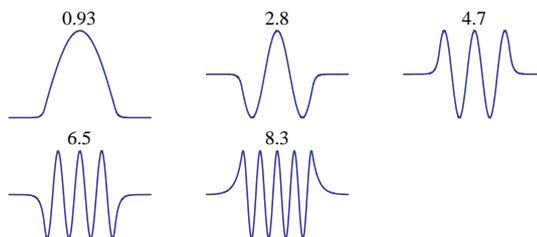
	V0=100	V0=200	V0=500
n=1	0.933848	0.952339	0.969335
n=2	1.86702	1.90442	1.9386
n=3	2.79876	2.85598	2.90773
n=4	3.72819	3.80671	3.87664
n=5	4.65414	4.75628	4.84526
n=6	5.5749	5.70426	5.8135
n=7	6.48773	6.65015	6.78128
n=8	7.38736	7.59322	7.74848
n=9	8.26041	8.53247	8.71498

е бѳлими.

```

symRules={kRules,nRule,symSol,a→1,ħ→1,m→1,V0→100,cSym→100,cAsym→0} //Flatten;
Clear[sψ,aψ];
(* Symmetric*)
sψ[x_ /;x<-1,n0_]:= (ψL[x]//.symRules//.{n->n0});
sψ[x_ /;-1<=x<1,n0_]:= (ψW[x]//.symRules//.{n->n0});
sψ[x_ /;x>=1,n0_]:= (ψR[x]//.symRules//.{n->n0});
symEnergy= nValues[eq5, 100,#]&/@symGuess;
plotsym=
Plot[ sψ[x,#] // .symRules //Evaluate
, {x,-2,2}
,PlotLabel-> NumberForm[#,2]
,Axes->None
,DisplayFunction->Identity ]& /@ symEnergy;
GraphicsGrid[{plotsym {1,2,3} plotsym {4,5} }]

```

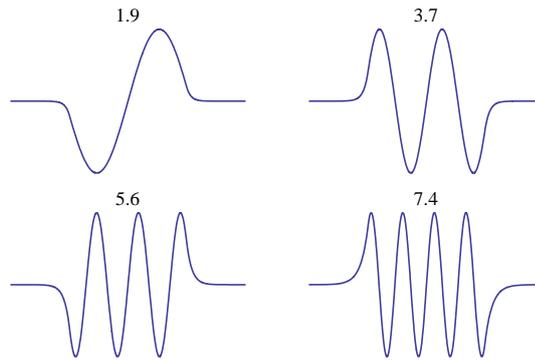


```

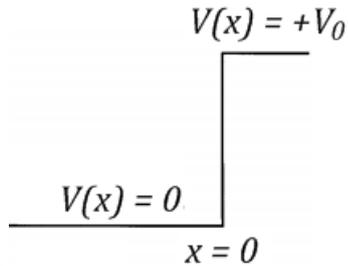
asymRules={kRules,nRule,asymSol,a→1,ħ→1,m→1,V0→100,cAsym→100,cSym→0} //Flatten;
(* Asymmetric*)
aψ[x_ /;x<-1,n0_]:= (ψL[x]//.asymRules//.{n->n0});
aψ[x_ /;-1<=x<1,n0_]:= (ψW[x]//.asymRules//.{n->n0});
aψ[x_ /;x>=1,n0_]:= (ψR[x]//.asymRules//.{n->n0});
asymEnergy=nValues[eq6,100,#]&/@asymGuess ;
plotasym=
Plot[ aψ[x,#] // .asymRules //Evaluate
, {x,-2,2}
,PlotLabel->NumberForm[#,2]
,Axes->None
,DisplayFunction->Identity]& /@ asymEnergy;

GraphicsGrid[{plotasym {1,2} , plotasym {1,2} }]

```



3-мәселе: Шекли бийикликтеги потенциал дийўалда шағылысатуғын бөлөкше.



Схемасы:

Needs["PlotLegends`"]

Clear["Global`*"];

а бөлими.

$\psi_L[x_] = e^{ikLx} + e^{-ikLx} R;$

$kLRule = kL \rightarrow \frac{2}{\hbar} \frac{Enm}{\hbar};$

$\psi_R[x_] = e^{ikR x} T;$

$kRRule = kR \rightarrow \frac{2}{\hbar} \frac{m(En - V_0)}{\hbar};$

boundary = { $\psi_L[x] == \psi_R[x]$, $\psi_L'[x] == \psi_R'[x]$ } /. x -> 0;

RTrule = Solve[boundary, {R, T}] // Flatten // Simplify;

б бөлими.

exp_ := exp /. {Complex[a_, b_] :=> Complex[a, -b]}

(a - i b + e^{-iθ})^{*}

Conjugate[a - ib + e^{iθ}]

`BCKSPC`f_ := D[f, #] & /@ {x, y, z}

`BCKSPC`ψ[x]

flux[ψ_] := $\hbar / (2i m) (\psi^* \text{BCKSPC} \psi - \text{BCKSPC} \psi^* \psi)$ // Simplify

$\psi_L[x]$ // flux // Simplify

incFlux = flux[ψL[x]] /. {R -> 0}

Rflux = (incFlux - flux[ψL[x]]) // Simplify

Tflux = flux[ψR[x]]

{RR, TT} = { Rflux[[1]] / incFlux[[1]],

Tflux[[1]] / incFlux[[1]] }

{RR, TT} = {RR, TT} /. RTrule

RR + TT // Simplify

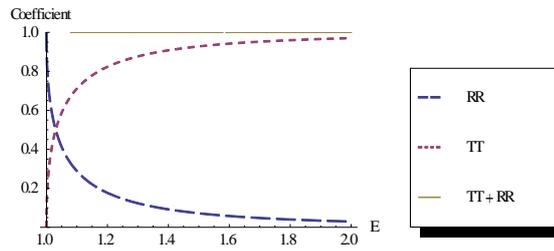
values = {m -> 1, \hbar -> 1, V0 -> 1};

Plot[{RR, TT, TT + RR} /. RTrule /. kLRule /. kRRule /. values // Evaluate,

{En, 1, 2}, AxesLabel -> {"E", "Coefficient"},

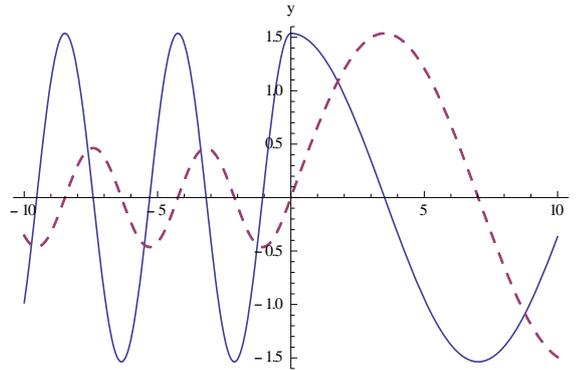
PlotStyle -> {Dashing[{0.06, 0.02}], Dashing[{0.02}], {}},

```
PlotLegend->{"RR","TT","TT+RR"},
LegendPosition->{1,-1/2},
PlotRange->{0,1}]
```

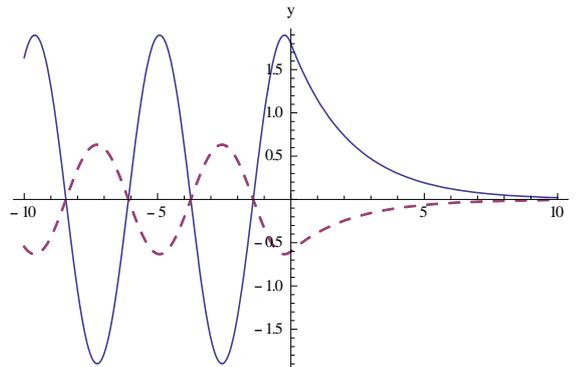


с бөлими.

```
kRule={kLRule,kRRule};
wave[x_,En_]={ψL[x],ψR[x]}/.RTrule/.kRule/.values //Simplify ;
ψ[x_,En_]:=Which[ x<=0,wave[x,En][[1]],x>0,wave[x,En][[2]]]
waveplot2D[Energy_]:=Plot[{ψ[x,Energy]//Re,ψ[x,Energy]//Im},
{x,-10,10}, PlotStyle->{{},Dashing[{0.02}]},AxesLabel->{"x","y"}]
waveplot2D[1.1]
```

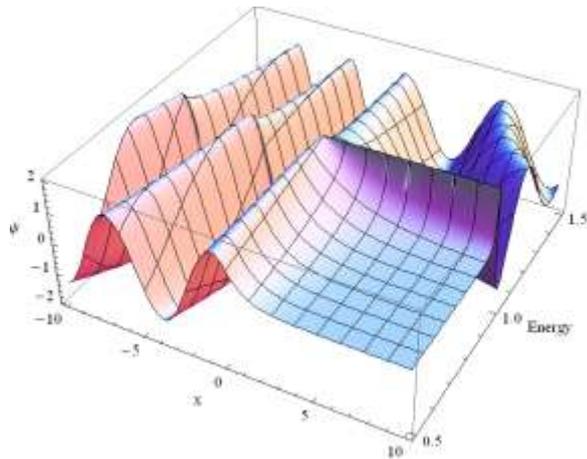


waveplot2D[0.9]

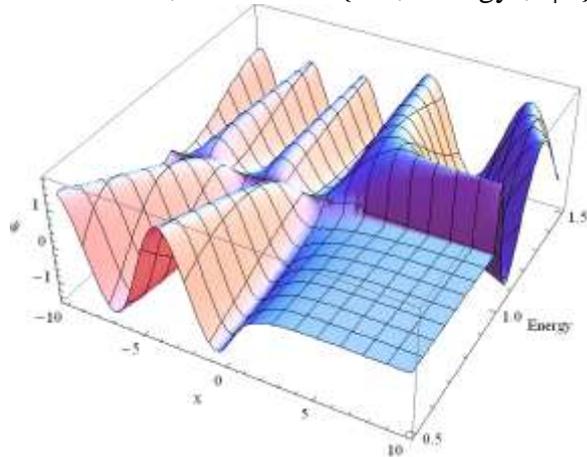


d бөлими

```
Plot3D[ψ[x,Energy]//Re,{x,-
10,10},{Energy,.5,1.5},PlotPoints->50,AxesLabel->{"x","Energy","ψ"}]
```

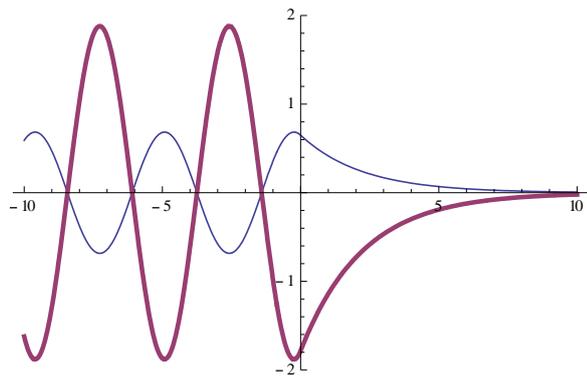


```
Plot3D[ψ[x,Energy]//Im,{x,-10,10},{Energy,.5,1.5},PlotPoints→50,AxesLabel→{"x","Energy","ψ"}]
```

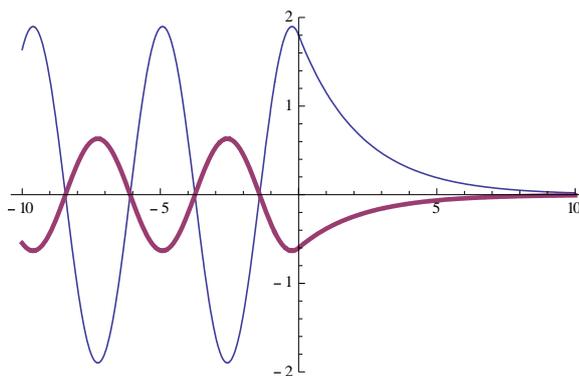


е бѳлими.

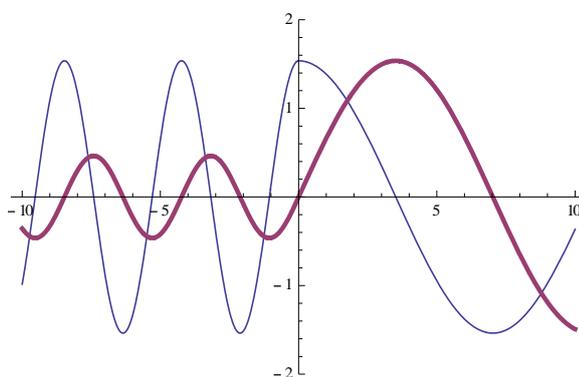
```
timePlot[time_,En_]:=Plot[{Exp[-I En time]ψ[x,En]//Re,Exp[-I En time]ψ[x,En]//Im},
{x,-10,10}, PlotStyle→{{},{Thickness[0.008]}}, PlotRange→{-2,2}]timePlot[1.,0.9]
```



```
frames=1;
Energy=0.9;
timestep=(2π)/((frames)Energy);
Do[ timePlot[n timestep ,Energy] //Print; ,{n,1,frames} ]
```



```
frames=1;
Energy=1.1;
timestep=(2π)/((frames)Energy);
Do[ timePlot[n timestep ,Energy] //Print; ,{n,1,frames} ]
```



Питкеріу қәнигелик жумысы бойынша улыўмалық жуўмақлар

1. Питкеріу қәнигелик жумысында стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси, өткермейтуғын дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекше, потенциал табалдырық хәм дийўал областындағы бөлекшениң қозғалысы, шекли тереңликке ийе потенциал шуқырдағы бөлекше ҳаққында бир өлшемли квант механикалық мәселелер талқыланды хәм бул мәселелерди ең әпиўайы жоллар менен шешиў усыллары қарап өтилди. Мәселелерди шешиўде ўақыттан ғәрезсиз болған бир, еки хәм үш өлшемли Шредингер теңлемелери пайдаланылды.

2. Питкеріу қәнигелик жумысында келтирилген барлық мәселелерди шешиў ушын Mathematica компьютерлик системасы ушын программалар дүзилди хәм бул программалар тийкарында айқын мәселелер үлкен дәлликте шешилди. Соның менен бир қатарда шекли бийикликтеги потенциал дийўалда шағылысатуғын бөлекше ушын энергия операторының меншикли толқын функцияларын хәм меншикли мәнислерин есаплаў ушын Mathematica тилинде программа дүзилди.

3. Питкеріу қәнигелик жумысында келтирилген барлық программалар бойынша есаплаўлар жүргизилди хәм бул есаплаўлардың нәтийжелери әдебиятта бар болған мағлыўматлар менен салыстырылды хәм олар арасындағы дәл сәйкесликтің бар екенлиги көрсетилди.

4. Питкериў қәнигелик жумысы квант механикасының ҳәр қыйлы (бир, еки ҳәм үш) өлшемли мәселелерин шешиўге арналған оқыў-методикалық қолланбаның орнын ийелеўи мүмкин.

Пайдаланылған әдебиятлар дизими

Илимий-методикалық мақалалар:

1. Б.А.Абдикамалов, Ж.О.Акимова. Использование среды Mathematica при проведении практических занятий и физического практикума по курсу общая физика. "Технологии и методики в образовании". Научно-технический журнал. Воронеж. Издательство "Мастеринг" Воронежского государственного педагогического института. 2011. № 3. 16-18.

2. Б.А.Абдикамалов, Ж.О.Акимова, Б.Р.Жоллыбеков. Возможности использования системы компьютерной алгебры Mathematica при изучении общей физики (в печати).

Mathematica компьютерлик системасы бойынша әдебиятлар:

1. Abell M., J. Braselton J. Differential Equations with Mathematica 3ed, Elsevier, 2004. 876p.

2. Abell M., J. Braselton J. Mathematica by Example 3ed, Elsevier, 2004. 571 p.

3. Baglivo J. Mathematica Laboratories for Mathematical Statistics. SIAM, 2005. 260 p.

4. Belomo N. ed. Continuum mechanics using Mathematica. Springer, 2006. 388 p.

5. Voccaro N. Essentials of Mathematica - With Applications to Mathematics and Physics. Springer, 2007. 539 p.

6. Cap F. F. Mathematical Methods in Physics and Engineering with Mathematica. CRC, 2003. 352 p.

7. Constantinescu A. Korsunsky A. Elasticity with Mathematica - An Introduction to Continuum Mechanics and Linear Elasticity. CUP, 2007. 266 p.

8. Dubin D. Numerical and Analytical Methods for Scientists and Engineers Using Mathematica. Wiley, 2003. 649 p.

9. Getz C., Helmstedt J. Graphics with Mathematica - Fractals, Julia Sets, Patterns and Natural Forms. Elsevier, 2004. 334 p.

10. Hassani S. Mathematical Methods Using Mathematica For Students Of Physics And Related Fields. Springer, 2003. 256 p.

11. Kelly J. Graduate Mathematical Physics With MATHEMATICA. Wiley, 2006. 466p.

12. Kulenovic M., Merino O. Discrete Dynamical Systems and Difference Equations with Mathematica. CRC, 2002. 360 p.

13. Lynch S. Dynamical Systems with Applications using Mathematica. Birkhauser, 2007. 497 p.

14. McMahan D., Topa D. A Beginners Guide to Mathematica. CRC, 2006. 736 p.

15. Wellin P., Kamin S., Gaylord R. An introduction to programming with Mathematica. 3ed, CUP, 2005. 570 p.

16. Zimmerman R. L., Olness F. I. Mathematica for Physics. AW, 2002. 645 p.

Квант механикасы бойынша әдебиятлар:

1. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Издание 6-е, исправленное. — М.: Физматлит, 2004. — 800 с. — («Теоретическая физика», том III).

2. Блохинцев Д. И. Основы квантовой механики. 5-е изд. Наука, 1976. — 664 с.
3. А.В.Борисов. Основы квантовой механики. Учебное пособие. Издательство физического факультета МГУ. Москва. 1999. 88 с.
4. А.С.Давыдов. Квантовая механика. Издательство "Наука". Москва. 1973. 704 с.
5. А.А.Соколов, И.М.Тернов, В.Ч.Жуковский. Квантовая механика. Издательство "Наука". Москва. 1979. 528 с.
6. Л.К.Мартинсон, Е.В.Смирнов. Квантовая физика. Издательство МГТУ имени Н.Э.Баумана. 2004. 496 с.
7. Фаддеев Л. Д., Якубовский О. А. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков. Ленинград, Изд-во ЛГУ, 1980. — 200 с.
8. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Пер. с англ., Том 8. Том 9., М., 1966—1967.
9. К. Коэн-Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоз. Квантовая механика. Т.1. Екатеринбург: Изд-во Уральского ун-та, 2000. — 944 с.
10. К. Коэн-Таннуджи, Б. Диу, Ф. Лалоз. Квантовая механика. Т.2. Екатеринбург: Изд-во Уральского ун-та, 2000. — 800 с.
11. Астахов А.В., Широков Ю.М. Курс физики. Том 3. Квантовая физика. М: Наука, 1983.
12. Вихман Э. Берклеевский курс физики. Том 4. Квантовая физика. М.: Наука, 1974.
13. Гейзенберг В., Шредингер Э. Дирак П.А.М. Современная квантовая механика. Три нобелевских доклада. Л.-М.: Гостехиздат, 1934
14. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики (2-е издание). М.: Наука, 1979.
15. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика с задачами. М.: Наука, 1976. 334 с.
16. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Том 1. М.: ГИТТЛ, 1956. 592 с.
17. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Том 2. М.: ГИТТЛ, 1956. 694 с.
18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики, том 2: Квантовая механика. М.: Наука, 1972
19. Матвеев А.Н. Квантовая механика и строение атома. М.: Высшая школа, 1965
20. Мессиа А. Квантовая механика. Том 1. М.: Наука, 1978. 478 с.
21. Мессиа А. Квантовая механика. Том 2. М.: Наука, 1979. 584 с.
22. Нейман И. Математические основы квантовой механики. М.: Наука, 1964. 368 с.
23. Фаддеев Л.Д., Якубовский О.А. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков. Л.: ЛГУ, 1980. 200 с.
24. Фок В.А. Начала квантовой механики. Москва. Наука. 1976. 276 с.
25. Шпольский Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома (4-е издание). М.: Наука, 1974. 448 с.
- В.В.Балашов, В.К.Долинов. Курс квантовой механики. Ижевск. НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика". 2001. 336 с.

Мәселелер топлармлары:

1. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 1. Издательство "Мир". Москва. 1974. 344 с.
2. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике. Том 2. Издательство "Мир". Москва. 1974. 316 с.
3. Сборник задач по атомной физике. Под редакцией С.С.Красильникова, А.М.Попова, О.В.Тихоновой. Москва. Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова. 2010.

4. В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике. Изд. 2-е, М., Наука, 1992. 468 с.
5. И.Е.Иродов. Сборник задач по атомной и ядерной физике. Атомиздат. Москва. 1966. 372 с.
6. И.В.Копытин, А.С.Корнев. Задачи по квантовой механике. Учебное пособие для вузов. Часть 3. Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета. Воронеж. 2007. 74 с.
7. И.В.Копытин, А.С.Корнев. Задачи по квантовой механике. Учебное пособие для вузов. Часть 1. Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета. Воронеж. 2004. 68 с.
8. П.В.Елютин, В.Д.Кравченков. Квантовая механика с задачами. Москва. Физматлит. 2000. 304 с.