Министерство высшего и среднего специального образования Республики Узбекистан
Академия наук Республики Узбекистан
Национальный университет Республики Узбекистан
Ферганский государственный университет
Ферганский политехнический институт

Ферганский
политехнический
институт

М А Т Е Р И А Л Ы

III Международной конференции по

Оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микро- и наноструктурах

14-15 ноября 2014 года

Фергана

УДК.621.529.592

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

О.У.Насриддинов, Д.Жарқинова, П.И.Мовлонов

Ташкентский университет информационной технологии Ферганский филиал
Кувасайиский коллеж экономический сервис обслуживание

Точное решение уравнения Шредингера существует лищь для очень простых задач например гармонический осциллятор, атом водорода, но и они требуют очень сложных математичиских методов вычисления.

Решение более сложных задач оказывается практически невозможным. Одноко во многих случиях эти задачи можно решать приближенно-путем сведения их к более простым задачам, допускающим строгое, точное решиние находя при этом соответствующие поправки. Разработка методов приближенных решений задач путем сведения их к соответствующим, более простым, с вычислением необходимых поправок и является содержанием теории возмущений. более простым с вычислением необходимых поиравок и является содержанием теории возмущений.

Пусть имеется некоторое уравнение

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Точное решение которого, однако, невозможно. Тогда необходимо из гамильтониана $\hat{H}$ выделить, члены $\hat{H}^o$ для которых существует точное решения, так что уравнение

$$\hat{H}^o\psi^o = E^o\psi^o$$

решается: известны ψ^o и E^o. В таком случае это решение можно принять в качестве нулевого приближения для исходной задачи, гамильтониан которой можно представить в виде суммы двух членов:

$$\hat{H} = \hat{H}^o + \hat{W}$$

где $\hat{W}=\hat{H}-\hat{H}^o$ носит название оператора возмущения если предположить, что возмущение мало, то можно искать приближенное решение в виде ряда по степеням этого возмущения. Результаты теории возмущений будут справедливы, тогда когда поправка мала, следовательно, для этого необходимо, чтобы условие

$$|W_{nm}|<<|E^o_n-E^o_m|$$

выполнялось, где E_n собственное значения волновой функции соответственно:ψ_{n1}, ψ_{n2},…, ψ_n, тогда состояние с энергией E_n называется вырожденным. Или, какому-либо значению E_n (или любой другой величинь) соответствуют *f* число различных собственымых функций. Для того чтобы решение уравнение Шредингера смысл, необходимо наложить на волновую функцию ψ следующие условия.

1. Однозначность. По смыслу ψ есть амплитуда вероятности, следовательно, $\psi^*\cdot\psi$- плотность вероятности, а $\psi^*\cdot\psi$ dv- вероятность найти частицу в объеме dv около точки x,y,z, в момент времени t. Это вероятность вполне определенная величина, следовательно, ψ должна быть однозначной функцией координат и времени, в противном случае мы получим, что для одной и той же точки ч имеется две или больще вероятностей, что лищено всякого физического смысла.
2. Конечность. Чтобы вероятность была конечной, необходимо, чтобы функция ψ было всюду конечной и вместе со своей первой производной обращалось в ноль на бесконечности.
3. Состояние микрочастиц описывается волновой функцией ψ - эта аналог траектории в классической физики. Состояние квантовой системы в пространстве и времени должно меняться непрерывно. А это означает, что ψ должно быть функцией непрерывной. В мести с непрерывностью волновой функции ψ должна быть непрерывной и ее первая производная. С точки зрения математики это является естественным требованием, поскольку уравнение Шредингера является уравнением второго порядка по

пространственным координатам, для того чтобы оно имело смысл всюду, необходимо, чтобы и ψ и $\Delta\psi$ были всюду непрерывны. Рассмотрим некоторые частные случаи:

1. Вектор плотности тока вероятности. При этом условие нормировки не зависит от времени (стационарный случай). Если в некоторый момент t

$$\int\psi^*(x,y,z,t)\,\psi(x,y,z,t)dxdydr=1$$

это равенство сохраняется во все моменты времены. Действительно, пологая, $\int\psi^*\psi dv=f(t)$ находим:

$$\frac{df}{dt}=\int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi dv+\int\psi^*\frac{\Delta\psi}{\Delta t}dv$$

Подставляя вместо $\frac{\delta\psi}{\delta t}$ и $\frac{\delta\psi^*}{\delta t}$ их выражения из уравнения Шредингера, после сохранения получим:

$$\frac{df}{dt}=\frac{i\hbar}{2m}\int div[\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*]dv=\frac{i\hbar}{2m}\int[\psi^*\Delta\psi-\psi\Delta\psi^*]_n ds$$

Так как на бесконечности ψ и $\Delta\psi$ обращаются в ноль, то $\frac{df}{\delta t}=0$ и, следовательно, f(t)=const=1.

Из предыдущ его равенства можно записать для произвольного объема V:

$$\int\{\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+div[\frac{i\hbar}{2m}(\psi\Delta\psi^*-\psi^*\Delta\psi)]\}dv=0$$

Уравнение совпадает по форме с уравнением неразрывности:

$$\frac{\partial Q}{dt}+divj=0$$

в гидродинамике и теории электричества. Так как $\psi^*\psi=w$ ест плотность вероятности, то вектор

$$j=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\Delta\psi^*-\psi^*\Delta\psi)$$

называется вектором плотности тока вероятности. Если система описывается вещественной волновой функцией $\psi^*=\psi$, то j=0.

Список литературы

[1] Д.И. Блохинцев. Введение в квантовую механику. Изд-во «Высшая школа»1963.

[2] Р. Спроул. Современная физика. Физматгиз, 1961.