Өзбекстан Республикасы Жоқары ҳәм орта арнаўлы билим министрлиги

Бердақ атындағы Қарақалпақ мәмлекетлик университети
Физика-математика факультети

Физика кафедрасы

Квантлық механика бойынша мәселелер жыйнағы ҳәм методикалық көрсетпелер

Мәмлекетлик университеттиң физика қәнигелиги студентлери ушын арналған оқыў қолланбасы

Нөкис 2022

Бул оқыў қолланбасында Өзбекстан Республикасы Жоқары ҳәм орта арнаўлы билим министрлиги тәрепинен тастыйықланған бакалавриат ушын "Квантлық механика" курсының оқыў бағдарламасына сәйкес мәселелер ҳәм олардың шешимлери келтирилген. Қолланбада орын алған мәселелердиң барлығы да релятивистлик емес квантлық механиканың тийкарғы мәселелерин өз ишине қамтыйды. Берилген мәселелердиң студентлер ушын түсиникли болыўы мақсетинде бир қатар методикалық көрсетпелер берилген. Соның менен бирге қолланбада қосымшалар сыпатында студентлердиң жумыслары ушын зәрүрли болған математика бойынша базы бир математикалық мағлыўматлар ҳәм әдебиятлар дизими келтирилген.

Мазмуны

1. Квантлық механикадағы операторлар. Коммутациялық қатнаслар

Методикалық көрсетпелер. Сызықлы оператор деп төмендегидей қәсийетлерге ийе операторларға айтамыз:

$$1.\ \hat{F}(\psi+\varphi)=\hat{F}\psi+\hat{F}\varphi. \tag{1.1}$$
$$2.\ \hat{F}(\alpha\psi)=\alpha\hat{F}\psi.$$

Мүмкин болған операторлардың айырымларын қараймыз. Квадратқа көтериў операторы:

$$\hat{Q}\psi=\psi^2. \tag{1.2}$$

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

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

Инверсия операторы $\hat{I}$

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

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

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

Бөлекшениң улыўмаласқан импулсиь $\mathbf{p}$ ға сәйкес келиўши $\hat{\mathbf{p}}$ операторы

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

Бул аңлатпада i арқалы жормал бирлик, $\hbar$ арқалы Планк турақлысы, ∇ арқалы Гамильтонның "набла" деп аталатуғын дифференңиаллық операторы белгиленген:

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

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

1.1-мәселе. (1.1)-(1.6) операторларының сызықлы екенлигин тексерип көриңиз.

Шешими: Оператордың сызықлы ямаса сызықлы емес екенлигин анықлаў ушын

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

шәртлерин қанаатландыратуғынлығын ямаса қанаатландырмайтуғынлығын тексерип көриў зәрүр. Квадратқа көтериў операторными, сызықлы екенлигин тексерип көриўушын $\hat{Q}$ операторы менен ψ ҳәм σ функцияларына тәсир етемиз:

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

Соның ушын бул оператор сызықлы оператор болып табылмайады.

Басқа операторлардыи, барлығы да сызықлы. Ҳақыйқатында да

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

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

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

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

қағыйдасы бойынша тәсир ететуғын операторға айтамыз. Сонлықтан

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

теңликлерин аламыз. Буннан $\hat{F}+\hat{G}=\hat{G}+\hat{F}$ теңлигиниң орынлы екенлигине ийе боламыз.

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

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

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

ҳәм буннан $[\hat{x},\hat{y}]=0$ теңлигиниң орын алатуғынлығын көремиз. **1.4-мәселе**. Импульс қураўшылары операторларының бир бири менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

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

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

$$=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}-\frac{\partial^2\psi}{\partial y\partial x}\right).$$

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

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

Шешими: Мысал ретинде мынажағдайды қараймыз:

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

Демек, $[\hat{x},\hat{p}_y]=0$ теңлиги орынлы екен.

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

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

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

ямаса

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

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

Шешими: Анықлама бойынша

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}.$$

Теңликтиң оң тәрепине $\hat{B}\hat{A}\hat{C}$ операторын қосамыз ҳәм алып таслаймыз:

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

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

Көпшилик операторлар ушын (бирақ барлық операторлар ушын емес) кери операторларды табыў мүмкин. Егер

$$\hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{1}$$

теңлиги орынланатуғын болса $\hat{F}^{-1}$ операторын $\hat{F}$ операторына кери оператор деп атаймыз. Бул аңлатпада $\hat{1}$ арқалы бирлик оператор белгиленген. Бул оператор ықтыярлы ψ функциясына тәсир еткенде бул ψ функциясы өзгериссиз қалады: $\hat{1}\psi = \psi$.

1.8-мәселе. Жылжыў (трансляция) $\hat{T}_a$: $\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$, ($a$ арқалы ҳақыйқый сан белгиленген) ҳәм $\hat{I}$ инверсия операторына [$\hat{I}$: $\hat{I}\psi(x) = \psi(-x)$] кери операторларды табыңыз.

Шешими.

а) (1.13)-аңлатпа бойынша

$$\hat{T}_a^{-1}\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x)$$

шәртиниң орынланыўы керек.

$$\hat{T}_a\psi(x) = \psi(x+a)$$

теңлиги орынлы болғанлықтан

$$\hat{T}_a^{-1}\psi(x) = \psi(x+a)$$

теңлигине ийе боламыз. Буннан $\hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_{-a}^{-1}$ теңлигиниң орынлы екенлигине ийе боламыз. Табылған $\hat{T}_a^{-1}$ операторы ушын (1.13)-теңликлер избе-излигиниң бириншисиниң орынланатуғынлығын аңсат тексерип көриўге болады. Ҳақыйқатында да

$$\hat{T}_a\hat{T}_a^{-1}\psi(x) = \hat{T}_a\psi(x-a) = \psi(a).$$

Демек, $\hat{T}_a\hat{T}_a^{-1} = 1$ теңлиги орынлы болады екен.

б) Бул жағдайда а) пунктинде орын алған жағдайға уқсас:

$$\hat{I}^{-1}\hat{I}\psi(x) = \hat{I}^{-1}\psi(-x) = \psi(x).$$

Буннан $\hat{I}^{-1} = \hat{I}$ теңлигиниң орынлы екенлигин көремиз.

1.9-мәселе. $\left(\hat{x} + \hat{D}\right)^2$ операторының түрин табыңыз.

Шешими: Операторларға әдеттеги санларға қарағандай етип қараў турпайы қәтелик болып табылады. Егер жоқарыдағы операторды әдеттегидей сан деп қарасақ биз излеп атырған оператор $x^2 + 2x\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2}$ түрине ийе болған болар еди. Ал биз қарап атырған жағдайда $\left(\hat{x} + \hat{D}\right)^2$ операторы $\psi(x)$ функциясына еки рет тәсир етеди:

$$\left(\hat{x} + \hat{D}\right)\left(\hat{x} + \hat{D}\right)\psi(x) = \left(x + \frac{d}{dx}\right)\left(x\psi(x) + \frac{d\psi(x)}{dx}\right) =$$

$$= (x^2+1)\psi(x) + 2x\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}.$$

Соның ушын берилген оператор ушын биз

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)^2 = (x^2+1) + 2x\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

аңлатпасын жаза аламыз.

Мейли, $f(z)$ функциясын нолдиң әтирапында Тейлор қатарына жайыўға болатуғын болсың яғный

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \, .$$

Бул аңлатпада коэффициентлер:

$$c_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n f}{dz^n}\bigg|_{z=0}.$$

Биз Тейлор қатарының не екенлигин еске түсиремиз. Егер $f(x)$ функциясы a ноқатының әтирапында дифференңиалланатуғын болса, онда

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k$$

қатары f функциясының a ноқатындағы Тейлор қатары деп аталады.

Мәселеге қайтып келемиз ҳәм $f(\hat{F})$ түриндеги операторды

$$f(\hat{F}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{F}^n \qquad (1.14)$$

шамасына тең оператор деп түсиниўимиз керек болады.

1.10-мәселе. $f(\hat{I}) = \exp(ia\hat{I})$ операторының айқын түрин табыңыз. Бул аңлатпада a арқалы ҳақыйқый турақлы, ал $\hat{I}$ арқалы инверсия операторы белгиленген.

Шешими. (1.14)-анықламаға сәйкес экспонентаны Тейлор қатарына жаямыз:

$$f(\hat{I}) = \exp(ia\hat{I}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ia)^n}{n!} \hat{I}^n. \qquad (1.15)$$

$\hat{I}^2 = \hat{1}$ теңлигиниң орынлы екенлигин аңсат көрсетиўге болады. Ҳақыйқатында да (1.4)-аңлатпадан пайдаланып

$$\hat{I}^2\psi(x) = \hat{I}\hat{I}\psi(x) = \hat{I}\psi(-x) = \psi(x)$$

теңликлерин аламыз. Демек $\hat{I}$ операторының барлық жуп дәрежелери 1 ге, ал тақ дәрежелери -1 ге тең болады екен.

Усы жағдайды есапқа алып (1.15)-аңлатпаны былайынша көширип жазамыз:

$$f(\hat{I}) = \exp(ia\hat{I}) = \left(1 - \frac{a^2}{2!} + \frac{a^4}{4!} - \frac{a^6}{6!} + \cdots\right) +$$
$$+i\left(a - \frac{a^3}{3!} + \frac{a^5}{5!} - \frac{a^7}{7!} + \cdots\right)\hat{I}.$$

Теңликтиң оң тәрепиндеги биринши қаўсырмаға көбейтилиўи керек болған бирлик оператор әпиўайылық ушын жазылмады). Теңликтиң он тәрепиндеги қаўсырмада $\cos\alpha$ функциясының қатарға жайылыўы, ал екинши қаўсырмада болса $\sin\alpha$ функциясынын қатарға жайылыўы жайласқан.

Солай етип айқын түрде жазылған

$$\exp(ia\hat{I}) = \cos a + i\,(\sin a)\hat{I}$$

формуласын аламыз.

Базы бир ескертиўлер: $\hat{F}$ операторына Эрмитлик түйинлес оператор деп

$$\int \varphi^*(q)\hat{F}\psi(q)dq = \int \left(\hat{F}^+\varphi(q)\right)^*\psi(q)dq \qquad ()$$

шәртин қанаатландыратуғын $\hat{F}^+$ операторына айтамыз. Бул аңлатпада интеграллаў q өзгериўшисинин барлық өзгериў областы бойынша алынады. dq белгиси арқалы интеграллаў областынын көлеминин элементи, ал жулдызша белгиси менен комплексли түйинлес шамалар белгиленген. (1.16)-аңлатпадағы $\psi(q)$ ҳәм

$\varphi(q)$функциялары ушын интеграллар мәниске ийе болыўы керек (яғный жыйнақлы болыўы керек). Усының менен бирге олардың модуллериниң квадраты интегралланатуғын болыўы керек, яғный

$$\int |\varphi(q)|^2 dq < \infty, \qquad \int |\psi(q)|^2 dq < \infty.$$

Жоқарыдағы шәртлер менен бир қатарда $\hat{F}$ операторының өзи модулинин квадраты интегралланбайтуғын функцияларға да тәсир ете алады (мысалы меншикли функцияларға ийе бола алады).

Оператордын эрмитлик түйинлеслигин былайынша да жазады:
$\int \varphi^*(q)\,\hat{F}\psi(q)dq = \left(\int \varphi^*(q)\,\hat{F}^+\psi(q)dq\right)^*$.

Бул аңлатпада (1.16)-теңликтиң оң тәрепин

$$\int \left(\hat{F}^+\varphi(q)\right)^* \psi(q)dq = \left(\int \psi^*(q)\,\hat{F}^+\varphi(q)dq\right)^*$$

түринде де жазыўдын мүмкин екенлиги есапқа алынған.

Егер $\hat{F}$ операторы өзинин эрмитлик түйинлес операторы менен бирдей болса, яғный

$$\hat{F} = \hat{F}^+$$

теңлиги орынлы болса, онда бул $\hat{F}$ операторын эрмитлик ямаса өзи өзине түйинлес оператор деп атаймыз.

1.11-мәселе. dx дифференциаллаў операторы ушын эрмитлик түйинлес операторды табыңыз.

Шешими. Бизиң операторымыз ушын (1.16)-теңликтиң шеп тәрепинде турған интегралды аламыз ҳәм оны бөлеклерге бөлип интеграллаймыз:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\hat{D}\psi(x)dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx = \\ &= \varphi^*(x)\psi(x)\rfloor_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\frac{d\varphi^*(x)}{dx}dx = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\hat{D}\varphi(x)\right)^*\psi(x)dx.\end{aligned} \tag{1.17}$$

(1.17)-аңлатпада $\psi(q)$ ҳәм $\varphi(q)$ функцияларының модуллериниң квадратларының интеграллатуғынлығы себепли олардың мәнислериниң шексизликте нолге умтылатуғынлығы есапқа алынған. Демек интегралдан тыстағы қосылыўшылар нолге айланады. (1.17)-аңлатпаны (1.16)-аңлатпа менен салыстырып $\hat{D}^+ = -\hat{D} = -\frac{d}{dx}$ теңликлери орынланады деген жуўмаққа келемиз.

Солаq етип $\hat{D} = \frac{d}{dx}$ операторы эрмитлик оператор емес екен. Бирақ жоқарыдағы таллаўлардай таллаўларды жүргизип биз $i\frac{d}{dx}$ операторының эрмитлик екенлигин дәлиллей аламыз. Буннан $\hat{p}_x, \hat{p}_y$ ҳәм $\hat{p}_z$ операторларының, соның менен бирге $\hat{\mathbf{p}}$ операторының да эрмитлиги келип шығады.

1.12-мәселе. $\left(c\hat{F}\right)^+ = c^*\hat{F}^+$ теңлигиниң орынлы екенлигин көрсетиңиз. Бул теңликте c арқалы ықтыярлы комплексли сан белгиленген.

Шешими. Бул теңлик (1.16)-анықламадан ҳәм төмендегидей теңликлер дизбегинен келип шығады:

$$\int \left(\left(c\hat{F}\right)^{+}\varphi(q)\right)^{*}\psi(q)dq = \int \varphi^{*}(q)\left(c\hat{F}\right)\psi(q)dq =$$
$$= c\int \varphi^{*}(q)\hat{F}\psi(q)dq = c\int \left(\hat{F}^{+}\varphi(q)\right)^{*}\psi(q)dq =$$
$$= \int \left(c^{*}\hat{F}^{+}\varphi(q)\right)^{*}\psi(q)dq.$$

Еки шетки интегралды бир бири менен салыстырып $\left(c\hat{F}\right)^{+} = c^{*}\hat{F}^{+}$ теңлигиниң орынлы екенлигин көремиз.

1.13-мәселе. Операторлардың $\hat{F}\hat{G}$ көбеймеси ушын

$$\left(\hat{F}\hat{G}\right)^{+} = \hat{G}^{+}F^{+} \qquad (1.18)$$

теңлигиниң орынлы екенлигин дәлиллеңиз.

Шешими. Дәлиллеў ушын эрмитлик түйинлесликтиң (1.16)-анықламасынан пайдаланамыз. Бир тәрептен биз мынаған ийемиз:

$$\int \varphi^{*}(q)\left(\hat{F}\hat{G}\right)\psi(q)dq = \int \left(\left(\hat{F}\hat{G}\right)^{+}\varphi(q)\right)^{*}\psi(q)dq. \qquad (1.19)$$

Екинши тәрептен мынадай аңлатпаны да жаза аламыз:

$$\int \varphi^{*}(q)\left(\hat{F}\hat{G}\right)\psi(q)dq = \int \varphi^{*}(q)\hat{F}\left(\hat{G}\psi(q)\right)dq =$$
$$= \int \left(\hat{G}^{+}\hat{F}^{+}\varphi(q)\right)^{*}\psi(q)dq. \qquad (1.20)$$

(1.19)- ҳәм (1.20)-теңликлердиң шеп тәреплери бирдей болғанлықтаң олардың оң тәреплерин бир бири менен теңлестирип

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

теңлигине ийе боламыз.

1.14-мәселе. Бир бири менен коммутацияланбайтуғын $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ эрмит операторлары ушын

$$\left[\hat{F}\hat{G}\right] = i\hat{D}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлиллеңиз. Бул теңликтеги $\hat{D}$ операторы да эрмит операторы болып табылады.

Шешими. (1.20)-аңлатпадан $\hat{D}$ операторы ушын

$$\hat{D} = -i\left[\hat{F}\hat{G}\right]$$

теңлигиниң орынлы екенлиги келип шығады. Енди бул оператордың эрмит операторы екенлигин дәлиллеймиз:

$$\hat{D}^{+} = \left(-i\left[\hat{F}\hat{G}\right]\right)^{+} = -i\left[\hat{F}\hat{G}\right]^{+} = i\left\{\left(\hat{F}\hat{G}\right)^{+} - \left(\hat{G}\hat{F}\right)^{+}\right\} =$$
$$= i\left(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}\right) = -i\left[\hat{F}\hat{G}\right] = \hat{D}.$$

Биз бул мәселени шешиўде 1.12- ҳәм 1.13-мәселелердиң нәтийжелеринен пайдаландық.

Базы бир ескертиўлер: Егер

$$\hat{U}\hat{U}^{+} = \hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{1}$$

шәрти қанаатландырылатуғын болса, онда $\hat{U}$ операторын унитар оператор деп атаймыз.

ψ функциясына $\varphi = \hat{U}^{+}\psi$ операторы, ал $\hat{A}$ операторына $\hat{a} = \hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}$ операторы теңлестирилетуғын түрлендириўлерди унитар түрлендириўлер деп атайды.

1.15-мәселе. Унитар түрлендириўлердиң коммутациялық қатнасларды сақлайтуғынлығын дәлиллеңиз.

Шешими. Мейли $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{C}$ болсын. Унитар түрлендириўде $\hat{A}$ операторы ушын $\hat{a} = \hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}$ операторы, $\hat{B}$ операторына $\hat{b} = \hat{U}^{+}\hat{B}\hat{U}$ операторы, ал $\hat{C}$ операторына $\hat{c} = \hat{U}^{+}\hat{C}\hat{U}$ операторы сәйкес келеди. Сонлықтан $\left[\hat{a}, \hat{b}\right]$ коммутаторын есаплағанда мынаған ийе боламыз:

$$\left[\hat{a}, \hat{b}\right] = \hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{+}\hat{B}\hat{U} - \hat{U}^{+}\hat{B}\hat{U}\hat{U}^{+}\hat{A}\hat{U} =$$
$$= \hat{U}^{+}\hat{A}\hat{B}\hat{U} - \hat{U}^{+}\hat{B}\hat{A}\hat{U} = \hat{U}^{+}\hat{C}\hat{U} = \hat{c}.$$

Бизлердиң усы жағдайды дәлиллеўимиз керек еди.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. $D = \frac{d}{dx}$ дифференциаллаў операторына кери болған оператор бар ма?

2. (1.8)-(1.11) операторлардың қәсийетлерин дәлиллеңиз.

3. Табыңыз:

a) $\left(\frac{d}{dx} + x\right)^3$;

b) $\left(\hat{A} - \hat{B}\right)\left(\hat{A} + \hat{B}\right)$;

c) $\left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x}\right)^3$

4. Есаплаңыз: $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$, $[\hat{x}^2, \hat{p}_x]$, $[\hat{x}^2, \hat{p}_x^2]$.

5. Дәлиллеңиз:

a) $[\hat{p}_x, f(\hat{x})] = -i\hbar\, \frac{\partial f}{\partial x}$,

b) $[\hat{x}, f(\hat{p}_x)] = \ i\hbar\, \frac{\partial f}{\partial x}$.

6. Егер эрмитлик болған $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ операторлары бир бири менен коммутацияланатуғын болса, онда олардың көбеймесиниң де эрмитлик оператор болатуғынлығын дәллилеңиз.

7. Егер $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ операторлары эрмитлик болса, онда

$$\hat{S} = \frac{1}{2}\left(\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}\right)$$

операторының да эрмитлик болатуғынлығын дәлиллиңиз.

8. $\frac{d^2}{dx^2}$ операторының Эрмит операторы екенлигин дәлиллеңиз.

9. $\hat{F}^{++} = \hat{F}$ теңлигиниң дурыс екенлигин дәлиллеңиз.

10. $\hat{F}$ операторы ушын $e^{i\hat{F}}$ операторының унитарлық екенлигин дәлиллеңиз.

11. Унитарлық операторлардың көбеймесиниң де унитар оператор екенлигин дәлиллеңиз.

Өз бетинше шешиў ушын усынылған мәселелердиң жуўаплары

1. Дифференциаллаў операторына кери болған оператор жоқ.

3. a) $\frac{d^3}{dx^3} + 3x\frac{d^2}{dx^2} + (3x^2 + 3)\frac{d}{dx} + (x^2 + 3x)$;

b) $\hat{A}^2 - \hat{B}^2 + \left[\hat{A}, \hat{B}\right]$;

4. $2i\hbar\hat{p}_x, 2i\hbar x, 2i\hbar(\hat{x}\,\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x})$.

2. Толқын функциясы. Физикалық шамалардың орташа мәнислери ҳәм дисперсиясы

Методикалық көрсетпелер: Квантлық механикада системаның халы толқын функциясы менен тәрийипленеди. Улыўма жағдайда толқын функциясы комплексли шама болып табылады. Физикалық мәниске толқын функциясының модулиниң квадраты ийе: $|\Psi(q,t)|^2 = \Psi^*(q,t)\Psi(q,t)$. Бул шама бөлекшени t ўақыт моментинде координаталары q болған ноқатта табыўдың итималлығының тығызлығына тең.

Ҳәзиринше модулиниң квадраты менен интегралланатуғын толқын функцияларын үйрениў менен шекленемиз. Бундай толқын функциялары ушын $\int |\Psi(q,t)|^2 dq$ интегралы жыйнақлы интеграл болып табылады. Бөлекшени барлық көлемде табыўдың итималлығы 1 ге тең болғанлықтан бул жағдай толқын функциясының нормировкасы ушын белгили шартты қояды. Атап айтқанда t ўақыт моментинде

$$\int_{-\infty}^{+} |\Psi(q,t)|^2 dq = 1 \qquad (2.1)$$

теңлигиниң орынланыўы керек.

Квантлық механикада ўақыт параметрдиң орнын ийелейтуғын болғанлықтан гүман пайда ететуған жағдайларда t параметрин қалдырып кетемиз.

$\varphi(q)$ ҳәм $\psi(q)$ функцияларының скаляр көбеймеси

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int \varphi^*(q)\psi(q)dq \qquad (2.2)$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Скаляр көбеймени $\langle\varphi|\psi\rangle$ түринде булгилеўди Дирак белгилеўи деп атайды.

ψ функциясына $\hat{F}$ операторы тәсир ететуғын жағдайда оның φ функциясына скаляр көбеймеси былайынша жазылады (яғный φ функциясын $\hat{F}\psi$ ге көбейтиў керек болады)

$$\langle\varphi|\hat{F}\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle.$$

Ψ функциясы ушын Дирак белгилеўлериндеги нормировка шәрти

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1,$$

ал эрмитлик-түйинлес оператордың анықламасы

$$\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle = \langle\hat{F}^{+}\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{F}^{+}|\psi\rangle^*$$

түринде жазылады.

Егер квантлық системаның $\Psi(q,t)$ толқын функциясы белгили болса, онда F шамасының орташа мәниси (математикалық күтилиўи)

$$\langle F\rangle = \langle\Psi|\hat{F}|\Psi\rangle \equiv \int \Psi^*(q,t)\hat{F}\Psi(q,t)dq \qquad (2.3)$$

формуласының жәрдеминде есапланады. Бул жерде $\Psi(q,t)$ толқын функциясы (2.1)-шәртке сәйкес нормировкаланған деп есапланады.

2.1-мәселе. F шамасының орташа мәнисиниң ҳақыйқый болыўының зәрүрли ҳәм жеткиликли шәрти усы шаманың операторының эрмитлиги (өзи өзине түйинлес екенлиги) болып табылатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими. Дәслеп $\hat{F}$ ти эрмитлик оператор деп есаплап F тиң орташа мәнисиниң ҳақыйқый екенлигин дәлиллеймиз (бул жеткиликлилигиниң дәлили болып табылады). Орташа мәнистиң ҳәм оператордың эрмитлигиниң анықламаларынан пайдаланып

$$\langle F\rangle^* = \left\langle\Psi\middle|\hat{F}\middle|\Psi\right\rangle^* = \left\langle\Psi\middle|\hat{F}\middle|\Psi\right\rangle = \langle F\rangle$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Енди зәрүрли болыў шәртин дәлиллеўге кирисемиз. Мейли, $\langle F\rangle^* = \langle F\rangle$ теңлиги орынланатуғын болсын. ψ ҳалындағы F шамасының орташа мәнисин $\langle F_1\rangle$, ал сол F F шамасының φ ҳалындағы орташа мәнисин $\langle F_2\rangle$ арқалы белгилейик, яғный

$$\langle F_1\rangle = \left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\psi\right\rangle, \qquad \langle F_2\rangle = \left\langle\varphi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle.$$

$\Psi = C(\psi + \lambda\varphi)$ функциясын қараймыз. Бул аңлатпада λ арқалы ықтыярлы комплексли сан, ал C арқалы Ψ функциясын 1 ге нормировкалаўға мүмкиншилик беретуғын константа белгиленген. F шамасының ψ ҳалындағы орташа мәниси

$$\langle F\rangle = \left\langle\Psi\middle|\hat{F}\middle|\Psi\right\rangle = |C|^2\left(\langle F_1\rangle + |\lambda|^2\langle F_2\rangle + \lambda\left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\psi\right\rangle + \lambda^*\left\langle\varphi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle\right). \qquad (2.4)$$

Енди

$$\langle F\rangle^* = \langle F\rangle$$

ҳәм

$$\langle F_1\rangle^* = \langle F_1\rangle, \qquad \langle F_2\rangle^* = \langle F_2\rangle:$$

$$\langle F\rangle = |C|^2\left(\langle F_1\rangle + |\lambda|^2\langle F_2\rangle + \lambda^*\left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\psi\right\rangle^* + \lambda\left\langle\varphi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle^2\right)$$

теңликлериниң орынлы екенлигин есапқа алып $\langle F\rangle$ ушын комплексли-түйинлес аңлатпаға өтемиз. Бул аңлатпадан (2.4)-аңлатпаны алып

$$0 = \lambda^*\left(\left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle^* - \left\langle\varphi\middle|\hat{F}\middle|\psi\right\rangle\right) + \lambda\left(\left\langle\varphi\middle|\hat{F}\middle|\psi\right\rangle^* - \left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle\right) \qquad (2.5)$$

аңлатпасына ийе боламыз. (2.5)-теңлик λ шамасының қәлеген мәнисинде орынланатуғын болғанлықтан қаўсырма ишинде турған аңлатпалар өз алдына да нолге тең болады:

$$\left\langle\varphi\middle|\hat{F}\middle|\psi\right\rangle = \left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle^*$$

ҳәм

$$\left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle = \left\langle\psi\middle|\hat{F}\middle|\varphi\right\rangle^*.$$

Демек $\hat{F}^* = \hat{F}$ теңлиги орынланады деген сөз.

2.2-мәселе.Толқын функциялары Ψ_1 менен Ψ_2

$$\Psi_2(x) = \Psi_1(x+a), \qquad a = const$$

аңлатпасы арқалы байланысқан еки бөлекшениң координаталарының ҳәм импульслериниң орташа мәнислери арасындағы байланысты табыңыз.

Шешими. Биринши бөлекшениң координатасының орташа мәниси

$$\langle x_1\rangle = \langle\Psi_1|\hat{x}|\Psi_1\rangle \equiv \int \Psi_1^*(x)x\,\Psi_1(x)dx$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бул аңлатпаны есапқа алып екинши бөлекшениң координатасының орташа мәнисин табамыз:

$$\langle x_2\rangle = \langle\Psi_2|\hat{x}|\Psi_2\rangle \equiv \int \Psi_2^*(x)x\,\Psi_2(x)dx =$$

$$= \int \Psi_1^*(x+a)\,\Psi_1(x+a)dx =$$

$$= \int \Psi_1^*(x)\,(x-a)\Psi_1(x)dx = \langle x_2\rangle - a.$$

Биринши бөлекшениң импульсиниң орташа мәниси ушын

$$\langle p_1\rangle = \langle \Psi_1|\hat{p}|\Psi_1\rangle \equiv -i\hbar\int \Psi_1^*(x)\frac{d}{dx}\Psi_1(x)dx$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бундай жағдайда екинши бөлекшениң импульсиниң орташа мәниси

$$\langle p_2\rangle = \langle \Psi_2|\hat{p}|\Psi_2\rangle \equiv -i\hbar\int \Psi_2^*(x)\frac{d}{dx}\Psi_2(x)dx =$$
$$= -i\hbar\int \Psi_1^*(x+a)\frac{d}{dx}\Psi_1(x+a)dx =$$
$$= -i\hbar\int \Psi_1^*(x)\frac{d}{dx}\Psi_1(x)dx \equiv \langle p_1\rangle.$$

Базы бир ескертиўлер: F физикалық шамасының дисперсиясы

$$\langle(\Delta F)^2\rangle = \langle(F-\Delta F)^2\rangle \equiv \langle F^2\rangle - \langle F\rangle^2$$

формуласының жәрдеминде анықланады.

2.3-мәселе. A ҳәм B физикалық шамаларының $\hat{A}$ ҳәм $\hat{B}$ операторларының коммутаторы

$$[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C}$$

түринде жазылған. Жоқарыдағы теңликте $\hat{C}$ арқалы Эрмит операторы белгиленген. Бундай жағдайда

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{\langle C\rangle^2}{4} \tag{2.6}$$

теңсизлигиниң орынлы болатуғынлығын дәлиллеңиз.

Шешими: Биз

$$\widehat{\Delta A} = \hat{A} - \langle A\rangle$$

ҳәм

$$\widehat{\Delta B} = \hat{B} - \langle B\rangle$$

операторларын киргиземиз. Бул аңлатпаларда $\langle A\rangle$ ҳәм $\langle B\rangle$ арқалы A ҳәм B шамаларының Ψ ҳалындағы орташа мәнислери белгиленген. $\langle A\rangle$ ҳәм $\langle B\rangle$ орташа мәнислери ҳақыйқый шамалар болғанлықтан $\widehat{\Delta A}$ ҳәм $\widehat{\Delta B}$ операторлары Эрмитлик операторлар болып табылады. Туўрыдан-туўры есаплаулар жолы менен $[\widehat{\Delta A},\widehat{\Delta B}]$ коммутаторы ушын

$$[\widehat{\Delta A},\widehat{\Delta B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C} \tag{2.7}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығына көз жеткеремиз.

Енди

$$I(\alpha) = \langle(\alpha\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B})\Psi|(\alpha\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B})\Psi\rangle \equiv \tag{2.8}$$
$$\equiv \int \left|(\alpha\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B})\Psi(q)\right|^2 dq \geq 0$$

жәрдемши интегралын қараймыз. (2.8)-интеграл белгисиниң астында турған қаўсырмаларды ашамыз ҳәм (2.7)-коммутациялық қтанасларды есапқа аламыз:

$$(\alpha\widehat{\Delta A} + i\widehat{\Delta B})(\alpha\widehat{\Delta A} - i\widehat{\Delta B}) =$$
$$= \alpha^2(\widehat{\Delta A})^2 - i\alpha(\widehat{\Delta A}\widehat{\Delta B} - \widehat{\Delta B}\widehat{\Delta A}) + (\widehat{\Delta B})^2 = \tag{2.9}$$
$$= \alpha^2(\widehat{\Delta A})^2 + \alpha\hat{C} + (\widehat{\Delta B})^2.$$

(2.9)-аңлатпаны (2.8)-аңлатпаға қойып ҳәм орташа мәнис ушын берилген (2.3)-

анықламаны пайдаланып

$$I(\alpha) = \alpha^2\langle(\Delta A)^2\rangle + \alpha\langle C\rangle + \langle(\Delta B)^2\rangle \geq 0 \qquad (2.10)$$

теңсизлигиниң орынланатуғынлығын табамыз. (2.10)-теңсизлиги α шамасының ықтыярлы мәнислеринде орынланыўы керек. Бул теңсизликтеги α^2 шамасының алдында турған ағза ушын $\langle(\Delta A)^2\rangle \geq 0$ теңсизлиги орынланатуғын болғанлықтан, егер, сәйкес квадрат теңлемениң дискриминанты нолге тең ямаса нолден киши болса, яғный

$$\langle C\rangle^2 - 4\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \leq 0$$

теңсизлиги орынланғанда

$$\alpha^2\langle(\Delta A)^2\rangle + \alpha\langle C\rangle + \langle(\Delta B)^2\rangle$$

квадрат үш ағза терис мәниске ийе болады. Буннан (2.6)-теңсизлиги тиккелей келип шығады.

Ескертиў: Көплеген жағдайларда F физикалық шамасын өлшегенде алынатуғын пытыраңқылықтың характеристикасы ретинде

$$\Delta F = \sqrt{\langle(\Delta F)^2\rangle}$$

орташа квадратлық аўысыўды алады. Бундай белгилеўлерде (2.6)-теңсизлик

$$\Delta A\Delta B \geq \frac{|\langle C\rangle|}{2} \qquad (2.11)$$

түрине ийе болады. (2.11)-теңсизликтиң анықсызлық қатнаслары деп аталатуғынлығын еске түсирип өтемиз.

2.4-мәселе. Координата x пенен импульстиң p_x проекциясы ушын анықсызлық қатнасын жазыңыз.

Шешими: $\hat{x}$ ҳәм $\hat{p}_x$ операторларының коммутаторы былайынша жазылады:

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

(2.11)-аңлатпаға сәйкес

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

теңсизлигиниң орынлы болатуғынлығын көремиз.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. $\langle\varphi|\psi\rangle \equiv \int \varphi^*(q)\psi(q)dq$ аңлатпасы менен анықланған скаляр көбеймениң төмендегидей қәсийетлерге ийе болатуғынлығын дәлиллеңиз:

$$\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle,$$
$$\langle\varphi_1 + \varphi_2|\psi\rangle = \langle\varphi_1|\psi\rangle + \langle\varphi_2|\psi\rangle,$$
$$\langle\varphi|\alpha\psi\rangle = \alpha\langle\varphi|\psi\rangle,$$
$$\langle\alpha\varphi|\psi\rangle = \alpha^*\langle\varphi|\psi\rangle.$$

Бул аңлатпаларда α арқалы ықтыярлы комплексли сан белгиленген.

2. φ ҳәм $\phi = \varphi e^{i\delta}$ функцияларының бир физикалық ҳалды тәрийиплейтуғынын дәлиллеңиз.

3. Ψ_1 ҳәм Ψ_2 толқын функциялары

$$\Psi_2(x) = \Psi_1(x)\exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar}\right), \qquad p_0 = const$$

арқалы байланысқан еки бөлекшениң координатасы менен импульси арасындағы байланысты табыңыз.

4. $\hat{F}^{+}\hat{F}$ ҳәм $\hat{F}\hat{F}^{+}$ Эрмит операторларының орташа мәнислериниң ықтыярлы ҳалларда терис емес екенлигин дәлиллеңиз.5. Бир ҳалда A шамасының орташа мәниси $\langle A \rangle$, ал B шамасының орташа мәниси $\langle B \rangle$ болса, онда қосындының орташа мәниси ушын

$$\langle A + B \rangle = \langle A \rangle + \langle B \rangle$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлиллеңиз.

6. $\Psi = Ce^{-x^2/2a^2}$ толқын функциясы ушын $\langle x \rangle, \langle p \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p^2 \rangle, \langle (\Delta x)^2 \rangle, \langle (\Delta p)^2 \rangle$ шамаларын ҳәм нормировкалаўшы көбейтиўши C ны табыңыз (a арқалы ҳақыйқый параметр белгиленген).

Өз бетинше шешиў ушын усынылыған мәселелердиң жуўаплары

3. $\langle x_2 \rangle = \langle x_1 \rangle, \langle p_2 \rangle = \langle p_1 \rangle + p_0$.

6. $C = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}, \langle x \rangle = 0, \langle p \rangle = 0, \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{2}, \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}, \langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{a^2}{2}, \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2a^2}$.

Ескертиў: Мәселелерде есапланыўы керек болған интеграллардың мәнислери қосымшада берилген.

3. Эрмит операторларының меншикли функциялары ҳәм меншикли мәнислери

Методикалық көрсетпелер: Мейли $\hat{F}$ эрмит операторы болсын. Бундай жағдайда

$$\hat{F}\psi = F\psi \tag{3.1}$$

теңлемеси ноллик емес ψ шешимине ийе болған жағдайлардағы барлық F санлары $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери, ал сәйкес келиўши ψ функцияларын усы оператордың меншикли функциялары деп аталады. $\hat{F}$ операторының барлық меншикли мәнислериниң жыйнағы оның спектри деп аталады. Физикалық системалардың хақыйқый жүзеге келетуғын ҳаллары (3-1)-теңлемениң бир мәнисли, үзликсиз ҳәм шекли шешимлери менен тәрийипленеди.

Квантлық механикада ҳәр бир физикалық шамаға эрмит операторы сәйкес келедию Квантлық механиканың ең тийкарғы постулатының мазмуны мынадан ибарат: қәлеген квантлық-механикалық ҳалда, яғный ықтыярлы толқын функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалда F физикалық шамасы оның операторы болған $\hat{F}$ операторының спектрине кириўши мәнислерди ғана қабыл ете алады.

Егер $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислериниң саны белгили болса (оларды санап шығыў мүмкин болса), онда дискрет спектр ҳаққында гәп етиледи. Бундай жағдайда меншикли мәнислерди F_n (n = 0,1,2,...) арқалы, ал меншикли мәнисине сәйкес келетуғын толқын функцияларын $\psi_{F_n} \equiv \psi_n$ = арқалы белгилеймиз.

Егер меншикли мәнисине s дана сызықлы ғәрезсиз $\psi_1^n, \psi_2^n, \dots, \psi_s^n$ функциялары сәйкес келетуғын болса, онда меншикли мәниси s есе азғынған болып табылады. Бундай жағдайда меншикли функцияларды сайлап алыў бир мәнисли түрде әмелге асырылмайды.

Қәлеген

$$\varphi_n^m = \sum_{i=1}^{s} c_m^i \psi_n^i \tag{3.2}$$

сызықлы комбинациясының (бул аңлатпада c_m^i арқалы ықтыярлы комплексли сан белгиленген) F_n меншикли мәнисине сәйкес келиўши $\hat{F}$ операторының меншикли функциясы болып табылатуғынлығы айқын. (3.2) сызықлы комбинаңиясының саны s ке, қәддиниң азғыныў санына тен. Сонлықтан $\psi_1^n, \psi_2^n, \dots, \psi_s^n$ функцияларынын орнына (3.2)-аңлатпаның қәлеген s сызықлы комбинаңиясын сайлап алыўға болады.

Егер F меншикли мәнислери ықтыярлы комплексли санлар болып табылатуғын болса (базы бир интервалда үзликсиз қатарды өтеди), онда $\hat{F}$ операторының спектри үзликсиз деп аталады. Бул жағдайда $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислерин сол F ҳәриплери арқалы белгилеймиз (индекссиз), ал сәйкес келетуғын меншикли функцияларды ψ_F арқалы белгилеймиз. Әлбетте үзликсиз спектрдиң меншикли функциялары F тен де, параметрден де ғәрезли [яғный $\psi_F(q) \equiv \psi(F, q)$].

Спектри дискрет мәнислерден туратуғын ҳәм базы бир интервалларда үзликсиз өзгеретуғын операторлардың да болыўы мүмкин

Сызықлы эрмит (өзи өзине түйинлес) операторлардың меншикли мәнислери менен меншикли функцияларының тийкарғы қәсийетлерин атап өтемиз:

1). Эрмит операторының меншикли мәнислери ҳақыйқый шамалар болып табылады. Яғный егер $\hat{F}$ эрмит операторы болып табылатуғын болса, онда дискрет спектр болған жағдайда $F_n = F_n^*$, ал үзликсиз спектр болған жағдайда $F = F^*$ теңликлери орынлы болады.

2). Эрмит операторының меншикли функциялары ортогоналлық.

Дәслеп дискрет спектрди қарап шығамыз. Мейли $\hat{F}$ эрмит операторы, ал ψ_n менен ψ_m арқалы оның ψ_n ҳәм ψ_m $(n, m = 0, 1, \dots)$ меншикли мәнислерине сәйкес келетуғын меншикли функциялары болсын:

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n, \dots, \hat{F}\psi_m = F_m\psi_m.$$

Меншикли функциялардың ортогоналлығы $n \neq m$ болған жағдайда

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle \equiv \int \psi_n^*(q)\psi_m(q)dq = 0$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын аңғартады.

Дискрет спектрдиң меншикли функцияларын (2.1)-нормализация шәрти орынланатуғындай етип сайлап алыў керек:

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle \equiv \int |\psi_n(q)|^2 dq = 1.$$

Соңғы еки аңлатпаны былайынша жазыўға болады:

$$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{3.3}$$

Бул аңлатпада δ_{nm} арқалы Кронекер символы белгиленген.

(3.3)-аңлатпаны ортонормировкалаў шәрти, ал (3.3)-аңлатпаны қанаатландыратуғын толқын функцияларын ортонормировкаланған толқын функциялары деп аталады.

$\hat{F}$ эрмит операторының меншикли мәнислери азғынған жағдайда бир меншикли мәнисине сәйкес келетуғын қәлеген функциялардын ортогоналлығына кепиллик бериўге болмайды. Бирақ (3.2)-формуланы пайдаланып барлық ўақытта сәйкес ортонормировкаланған меншикли функцияларының системасын дүзиў мүмкин:

$$\varphi_n^1, \varphi_n^2, \dots, \varphi_n^s,$$

ал олар ушын

$$\langle \varphi_n^k | \varphi_n^l \rangle = \delta_{kl}, (k, l = 0, 1, 2, \dots).$$

Ортонормировкаланған системаны дүзиў ушын

$$\varphi_n^1 = \psi_n^1,$$
$$\varphi_n^2 = a(\psi_n^1 + c_2^2 \psi_n^2)$$

теңликлерин алыўға болады. Бул аңлатпада a арқалы комплексли турақлы белгиленген. c_2^2 коэффициентиниң мәниси ортогоналлық шәртинен анықланады:

$$\langle \varphi_n^1 | \varphi_n^2 \rangle = \langle \varphi_n^1 | a(\psi_n^1 + c_2^2 \psi_n^2) \rangle =$$
$$= a(\langle \varphi_n^1 | \varphi_n^1 \rangle + c_2^2 \langle \psi_n^1 | \psi_n^2 \rangle) = 0.$$

Буннан φ_n^1 функциясын нормировкаланған деп есаплап

$$c_2^2 = -\frac{1}{\langle \psi_n^1 | \psi_n^2 \rangle}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығына көз жеткеремиз.

a турақлысы

$$\langle \psi_n^1 | \psi_n^2 \rangle = 1$$

нормировка шәртинен анықланады. Тап сол сыяқлы

$$\varphi_n^3 = b(\psi_n^1 + c_3^2 \psi_n^2 + c_3^3 \psi_n^3), \qquad b = const$$

деп есаплап c_3^2 ҳәм c_3^3 коэффициентлерин анықлаў ушын $\langle \psi_n^1 | \psi_n^3 \rangle = 0$ ҳәм $\langle \psi_n^2 | \psi_n^3 \rangle = 0$ сызықлы еки теңлемелер системасын аламыз. b константасы нормировкалаў шәртинен анықланады. Усындай проңедурадан пайдаланып барлық s дана (s арқалы азғыныўдың еселиги белгиленген) сызықлы ғәрезсиз ортонормалланған функцияларды аламыз. Бундай процедураны Шмидт бойынша ортогонализация деп атайды.

Егер $\hat{F}$ операторы меншикли мәнислердиң үзликсиз спектрине ийе болатуғын болса ψ_F функцияларын әдеттегидей жоллар менен нормировкалаўға болмайды. Себеби $\int |\psi_F|^2 dq$ интегралы тарқалыўшы интегралға айланады. Үзликсиз спектр ушын (3.3)-шәртке сәйкес келиўши ортонормировкаланғанлық шәрти

$$\langle \psi_F | \psi_{F'} \rangle \equiv \int \psi_F^*(q)\, \psi_{F'}(q) dq = \delta(F' - F) \tag{3.4}$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада F ҳәм F' меншикли мәнислерине сәйкес келетуғын меншикли функциялар ψ_F ҳәм $\psi_{F'}$ арқалы, ал $\delta(F' - F)$ арқалы Дирактың дельта-функциясы белгиленген (Дирактың дельта-функциясының тийкарғы қәсийетлери қосымшада келтирилген).

$\hat{F}$ операторының барлық меншикли функцияларының жыйнағы функциялардың толық ямаса туйық системасын пайда етеди. Басқа сөз бенен айтқанда $\hat{F}$ операторының меншикли функциялары сыяқлы сол өзгериўшилерден ҳәм сол шегаралық шәртлерден ғәрезли болған қәлеген басқа $\Psi(q)$ функциясы $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери дискрет болғанда

$$\Psi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q) \tag{3.5}$$

қатары түринде, ал $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери үзликсиз болғанда

$$\Psi(q) = \int a(F)\, \psi_F(q) dF \tag{3.6}$$

интегралы түринде бериледи. (3.5)-аңлатпадағы суммалаў ҳәм (3.6)-аңлатпа бойынша интеграллаў n менен F тиң мүмкин болған барлық мәнислери бойынша жүргизиледи.

a_n коэффициентлерин ҳәм $a(F)$ функциясын табыў ушын (3.5)- ҳәм (3.6)-аңлатпаларын сәйкес $\psi_n^*(q)$ ҳәм $\psi_F^*(q)$ функцияларына көбейтемиз ҳәм қарап атырылған барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз. Нәтийжеде $\psi_n(q)$ ҳәм $\psi_F(q)$ функцияларының ортогоналлығын есапқа алып,

$$a_n = \int \psi_n^*(q)\Psi(q)dq \equiv \langle\psi_n|\Psi\rangle,$$

$$a_n \equiv a(F) = \int \psi_F^*(q)\Psi(q)dq \equiv \langle\psi_F|\Psi\rangle$$

аңлатпаларына ийе боламыз.

Мейли система F шамасы анық мәниске ийе болмайтуғын ҳалда турған болсын. Демек көп қайтара өткерилген өлшеўлерде (квантлық механикада өлшеў ҳаққында гәп болғанда классикалық әсбап пенен квантлық система арасындағы тәсирлесиўди түсинеди) F шамасының бақланатуғын мәнислеринде базы бир пытыраңқылық алынады. Дискрет спектр орын алатуғын жағдайларда $|a_n|^2$ шамасы F шамасының F_n мәнисине тең болыўының итималлығын береди. Ал үзликсиз спектрге ийе болған жағдайларда $|a_F|^2$ шамасы F шамасыныи тарқалыўының итималлығының тығызлығы болып табылады ($|a_F|^2dF$ көбеймеси болса F шамасының $[F, F+dF]$ интервалында табыўдың итималлығына тең). Жоқарыда айтылғанларға байланыслы

$$\sum_n |a_n|^2 = 1$$

ҳәм

$$\int |a_F|^2 dF = 1$$

теңликлериниң орынланатуғынлығы өз-өзинен түсиникли.

Егер операторда дискрет спектр менен бирге үзликсиз спектр де болатуғын болса, онда усындай оператордың меншикли функциясы бойынша Ψ функциясының қатарға жайылыўы төмендегидей түрге ийе болады:

$$\Psi(q) = \sum_n a_n\psi_n(q) + \int a(F)\psi_F(q)dF.$$

3.1-мәселе. Импульс моментинии z көшерине түсирилген проекциясы операторыныи меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыңыз. Сфералық координаталарда бул оператордың

$$\hat{L}_z = i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

түрине ийе болатуғынлығын еске тусиремиз.

Шешими. Бул жағдайда меншикли мәнислер менен меншикли функцияларды табыўға арналған (3.1)-теңлеме былайынша жазылады:

$$i\hbar\frac{d\psi(\varphi)}{d\varphi} = L_z\psi(\varphi).$$

Бул биринши тәртипли дифференциаллық теңлеме болып, оның шешими

$$\psi(\varphi) = Ce^{\frac{i}{\hbar}L_z\varphi}$$

функциясы түрине ийе. Бул функцияда C арқалы базы бир константа белгиленген. $\psi(\varphi)$ функциясының бир мәнисли болыўы ушын

$$\psi(\varphi + 2\pi) = \psi(\varphi)$$

шәртиниң, яғный

$$e^{\frac{i}{\hbar}2\pi} = 1$$

теңлигиниң орынланыўы керек. Буннан

$$L_z = \hbar m, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

теңлигиниң орынланатуғынлығы көремиз. Бундай жағдайда $\psi_m(\varphi)$ функциясы ушын

$$\psi_m(\varphi) = Ce^{im\varphi}$$

теңлигин аламыз.

Солай етип, $\hat{L}_z$ операторының спектри дискрет ҳәм азғынбаған екен. C константасын

$$\langle\psi_m|\psi_m\rangle = \int_0^{2\pi} |\psi_m|^2 d\varphi = 1$$

нормировка шәртинен

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

шамасына тең екенлигин табамыз. Демек меншикли функциялар

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

турине ийе болады екен.

3.2-мәселе. Импульстиң проекциясы операторы

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

ның меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын табыңыз.

Шешими: Меншикли мәнислер ҳәм меншикли функциялар ушын жазылған теңлеме

$$i\hbar\frac{d\psi}{dx} = p_x\psi.$$

түринде жазылады. Буннан

$$\psi_{p_x} = Ce^{\frac{i}{\hbar}p_x x} \tag{3.7}$$

шешимин аламыз. Бул аңлатпада C арқалы нормировкалаўшы турақлы шама белгиленген. (3.7)-теңлеме p_x тың қәлеген ҳақыйқый мәниси ушын бир мәнислик, үзликсизлик ҳәм шеклилик талапларын қанаатландырады. Демек $\hat{p}_x$ операторы үзликсиз спектрге ийе деген сөз.

C константасын анықлаў ушын (3.4)-шәрттен пайдаланамыз:

$$\int \psi^*_{p'_x}(x)\psi_{p_x}(x)dx = \delta(p'_x - p_x). \tag{3.8}$$

δ-функцияның интеграллық көринисин пайдаланып (3.8)-аңлатпаның оң тәрепин түрлендиремиз (қосымшаға қараңыз). Нәтийжеде

$$\int \psi_{p'_x}^*(x)\psi_{p_x}(x)dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p'_x-p_x)x}dx = 2\pi\hbar|C|^2\delta(p'_x-p_x)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпаны (3.8)-аңлатпа менен салыстырып

$$2\pi\hbar|C|^2 = 1$$

екенлигине ҳәм буннан

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

Солай етип импульстиң x көшерине түсирилген проекциясы операторының меншикли функциялары былайынша жазылады екен:

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}.$$

3.3-мәселе. Координата операторы $\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}$ диң меншикли функцияларын табыңыз.

Шешими. $\hat{\boldsymbol{r}}$ операторының меншикли мәнислери ҳәм меншикли функциялары ушын теңлеме былайынша жазылады:

$$\hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{r}_0\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r}) \qquad (3.9)$$

Бул теңлемеде $\boldsymbol{r}$ арқалы өзгериўши, ал $\boldsymbol{r}_0$ арқалы сол өзгериўши шаманың айқын(конкрет) бир мәниси белгиленген. $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{r}_0$ болған жағдайда $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$ функциясы нолге тең болыўы керек, ал $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{r}_0$ болған жағдайда $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})$ функциясы анық мәниске ийе емес. (3.9)-аңлатпадан

$$\int \hat{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0\int \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \qquad (3.10)$$

теңлиги келип шығады. Бул аңлатпада $d\boldsymbol{r}$ шамасы $d\boldsymbol{r} = dxdydz$ көлем элементин аңлатады. (3.10)-теңлемениң шешими төмендегидей түрге ийе:

$$\psi_{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{r}) = C\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0).$$

Бул аңлатпада C арқалы нормировкалаўшы константа белгиленген. Бул константаның мәнисин (3.4)-шәрттен анықлаймыз (координата операторы $\hat{\boldsymbol{r}}$ диң спектриниң үзликсиз болатуғынлығы айқын):

$$\int \psi_{\boldsymbol{r}'_0}^*(\boldsymbol{r})\psi_{\boldsymbol{r}_0}^*(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{r}'_0-\boldsymbol{r}_0).$$

Дельта-функциясының қәсийетлеринен

$$|C|^2\int \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'_0)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)d\boldsymbol{r} = |C|^2\delta(\boldsymbol{r}'_0-\boldsymbol{r}_0) = \delta(\boldsymbol{r}'_0-\boldsymbol{r}_0)$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан $C = 1$ екенлиги келип шығады.

Солай етип $\hat{\boldsymbol{r}}$ координата операторының меншикли мәнислери ушын дельта-функцияны аламыз:

$$\psi_{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0). \qquad (3.11)$$

(3.11)-функциялар улыўмаласқан функциялар болып табылады ҳәм усы ўақытқа шекем қарап шығылған классикалық функциялардың ҳеш бир классына кирмейди.

3.4-мәселе. $f(z)$ функциясын Тейлор қатарына жайылатуғын функция деп есаплап $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери ҳәм меншикли функциялары белгили болған жағдайда $f(\hat{F})$ операторлық функциясының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыңыз.

Шешими. Мейли $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери ҳәм меншикли функциялары сәйкес F_n ҳәм ψ_n болсын. $f(\hat{F})$ операторлық функциясы формаллық дәрежели қатарға жайыў сыпатында түсиниледи:

$$f(\hat{F}) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{F}^k.$$

Бул аңлатпада c_k арқалы қатарға жайыў коэффициентлери белгиленген. Бул қатарды есапқа алып $f(\hat{F})$ операторы менен ψ_n функциясына тәсир етемиз:

$$f(\hat{F})\psi_n = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{F}^k \psi_n = \sum_{k=0}^{\infty} c_k (F_n)^k \psi_n = f(F_n)\psi_n.$$

Буннан $f(\hat{F})$ операторның меншикли функцияларының ψ_n функциясына сәйкес келетуғынлығы, ал меншикли мәнислериниң $f(F_n)$ екенлиги келип шығады.

3.5-мәселе. Система

$$\Psi(\varphi) = C(1 + \cos 3\varphi)$$

толқын функциясы менен тәрийипленеди. Бул аңлатпада φ арқалы поляр мүйеш белгиленген. Нормировкалаў константасы C ны ҳәм бул ҳалдағы импульс моментиниң проекцияларының бақланатуғын мәнислерин табыңыз.

Шешими. Эйлер формуласынан пайдаланып (бул формула қосымшада келтирилген) $\Psi(\varphi)$ толқын функциясын былайынша жазамыз:

$$\Psi(\varphi) = C\left(1 + \frac{e^{i3\varphi} + e^{-i3\varphi}}{2}\right). \qquad (3.12)$$

$\hat{L}_z$ операторының меншикли функциялары [3.1-мәселеге қараңыз]

$$\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}.$$

Буны есапқа алған жағдайда (3.12)-аңлатпадан мынадай аңлатпа келип шығады:

$$\Psi(\varphi) = C\left(\sqrt{2\pi}\psi_0(\varphi) + \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\psi_3(\varphi) + \frac{\sqrt{2\pi}}{2}\psi_{-3}(\varphi)\right).$$

Бул аңлатпа нолге тең емес

$$a_0 = \sqrt{2\pi}C, \qquad a_3 = a_{-3} = \frac{\sqrt{2\pi}}{2}C$$

коэффициентлерине ийе (3.5) қатарынан басқа ҳеш нәрсе емес.

$$\int_0^{2\pi} |\Psi(\varphi)|^2 d\varphi = 1$$

нормировка шәртинен

$$|C| = \frac{1}{\sqrt{3\pi}}$$

екенлигине ийе боламыз. Усының нәтийжесинде $\Psi(\varphi)$ функциясы былайынша жазылады:

$$\Psi(\varphi) = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_0(\varphi) + \sqrt{\frac{1}{6}}\psi_3(\varphi) + \sqrt{\frac{1}{6}}\psi_{-3}(\varphi).$$

Солай етип, өлшеўлерде L_z шамасының төмендегидей мәнислери алынады: $|a_0|^2 = 2/3$ итималлығы менен $L_z = 0$ ҳәм бирдей болған $\left|a_{\pm 3}\right|^2 = 1/6$ итималлықта $L_z = \pm 3\hbar$ шамасы алынады.

3.1-мәселеде L_z шамасы ушын $L_z = m\hbar$ мәнислерин алғанымызды еске түсиремиз.

$$\sum_n |a_n|^2 = |a_0|^2 + |a_3|^2 + |a_{-3}|^2$$

теңлигиниң орынланатуғынлығы көринип тур.

3.6-мәселе. Мейли системаның ҳалы нормироквалланған Ψ функциясының жәрдеминде тәрийипленетуғын, ал бул функция $\hat{F}$ эрмит операторының ψ_n меншикли функциялары бойынша қатарға жайылатуғын болсын: $\Psi = \sum_n a_n \psi_n$. $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислериниң орташа мәнисин қатарға жайыў коэффициента a_n арқалы аңлатыңыз.

Шешими. Анықлама бойынша

$$\langle F \rangle = \langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle = \int \sum_m a_m^* \psi_m^* \, \hat{F} \sum_n a_n \psi_n \, dq.$$

Буннан Ψ_n функцияларының ортонормировкаланғанын ҳәм Ψ_n функцияларының $\hat{F}$ операторының меншикли функциялары екенлигин есапқа алып, төмендегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \sum_{m,n} a_m^* \, a_n \int \psi_m^* \hat{F} \, \psi_n dq = \\ &= \sum_{m,n} a_m^* \, a_n F_n \int \psi_m^* \, \psi_n dq = \\ &= \sum_{m,n} a_m^* \, a_n F_n \delta_{m,n} = \sum_n |a_n|^2 F_n. \end{aligned} \tag{3.13}$$

3.7-мәселе. 3.5-мәселе ушын импульс моментиниң L_z проекциясының орташа мәнисин табыңыз.

Шешими. (3.13)-формула бойынша

$$\langle L_z \rangle = \frac{2}{3} 0 + \frac{1}{6} 3\hbar + \frac{1}{6}(-3\hbar) = 0$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын аңғарамыз.

3.8-мәселе. Коммутаторы нолге тең болған жағдайда ғана еки $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ эрмит операторларының меншикли функциялардың улыўмалық жыйнағына ийе болатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими. Дәлиллеўди дискрет спектр болған жағдай ушын әмелге асырамыз. Дәслеп зәрүрли екенлигин дәлиллеймиз. Мейли $\psi_n = 0, 1, 2, \ldots$ функциялары $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ операторларының меншикли функцияларының толық жыйнағынан туратуғын, яғный

$$\hat{F}\psi_n = F_n \psi_n, \qquad \hat{G}\psi_n = G_n \psi_n$$

теңликлери орынлы болсын. $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ операторларының улыўмалық анықланыў областынан алынған ықтыярлы Ψ функциясын (3.5) түринде былайынша жазамыз:

$$\Psi = \sum_n a_n \psi_n.$$

Соңғы қатнасты есапқа алып $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ операторларының коммутаторы ушын мына аңлатпаны аламыз:

$$[\hat{F}, \hat{G}]\Psi = (\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})\sum_n a_n \psi_n = \sum_n a_n\,(F_n G_n - G_n F_n)\psi_n = 0.$$

Демек

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлилледик.

Енди жеткиликли екенлигин дәлиллеўге өтемиз. Әпиўайылық ушын $\hat{F}$ ҳәм $\hat{G}$ операторларының спектрлери азғынған емес деп есаплайық. Мейли $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери менен меншикли функциялары F_n менен ψ_n болсын ($n = 0, 1, 2, \ldots$). (3.15)-аңлатпаны есапқа алып мынаны аламыз:

$$\hat{G}(\hat{F}\psi_n) = \hat{F}(\hat{G}\psi_n).$$

Екинши тәрептен

$$\hat{G}(\hat{F}\psi_n) = F_n(\hat{G}\psi_n).$$

Соңғы аңлатпалардан

$$\hat{F}(\hat{G}\psi_n) = F_n(\hat{G}\psi_n)$$

теңлигиниң орынлы екенлигин аңғарамыз. Буннан $\hat{G}\psi_n$ функциясының $\hat{F}$ операторының F_n меншикли мәнисине сәйкес келетуғын меншикли функциясы екенлиги келип шығады. F_n меншикли мәниси азғынған емес болғанлықтан $\hat{G}\psi_n$ меншикли функциясы ψ_n меншикли функциясынан тек санлы көбейтиўши менен ғана айрылады. Бул көбейтиўшини G_n арқалы белгилеп мынаған ийе боламыз:

$$\hat{G}\psi_n = G_n \psi_n.$$

Буннан Ψ_n функциясының $\hat{G}$ операторының меншикли функциясы екенлиги келип шығады.

Егер операторлар азғынған меншикли мәнислерге ийе болатуғын болса, онда $\hat{F}$ операторының ψ_n^i ($i = 0, 1, 2, \ldots,$ s арқалы азғыныўдың еселиги белгиленген) меншикли функцияларынан барлық ўақытта да

$$\varphi_n^m = \sum_{i=1}^{s} c_m^i \psi_m^i$$

түриндеги [яғный (3.2)-аңлатпа түриндеги] сызықлы комбинаңия дүзиўге болады. Олар $\hat{G}$ операторының меншикли функциялары болып табылады (ψ_m^i функциясының өзлери $\hat{G}$ операторының меншикли функциялары болып табылмаса да).

Ескертиў: Операторларда меншикли функциялардың толық жыйнағанаң болыўы усындай операторларға сәйкес келиўши физикалық шамалардың бир ўақытта өлшениўиниң мүмкин екенлигин билдиреди.

3.9-мәселе. Унитар операторлардың меншикли мәнислериниң модуллери бойынша 1 ге тең екенлигин дәлиллеңиз.

Шешими. Дәлиллеўди 1 ге нормировкаланған ψ функциялары ушын жүргиземиз. $\widehat{U}$ унитар операторының меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын табыў мәселесин жазамыз:

$$\widehat{U}\psi = \lambda\psi. \tag{3.16}$$

Бул теңликтиң еки тәрепине де $\widehat{U}^{+}$ операторы менен тәсир етемиз. Нәтийжеде мынаны аламыз:

$$\widehat{U}^{+}\widehat{U}\psi = \widehat{U}^{+}\lambda\psi = \lambda\widehat{U}^{+}\psi.$$

Бул аңлатпаның еки бөлимин де ψ^{*} функциясына көбейтемиз ҳәм барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз:

$$\int \psi^{*}\widehat{U}^{+}\widehat{U}\psi dq = \lambda \int \psi^{*}\widehat{U}^{+}\psi\, dq. \tag{3.17}$$

Эрмитлик-түйинлес оператордың анықламасынан пайдаланып кейинги теңликтиң оң тәрепин түрлендиремиз:

$$\lambda \int \psi^{*}\widehat{U}^{+}\psi\, dq = \lambda \int \left(\widehat{U}\psi\right)^{*}\psi dq =$$
$$= \lambda\lambda^{*} \int \psi^{*}\psi\, dq = \lambda\lambda^{*} = |\lambda|^{2}.$$

Екинши тәрептен (3.17)-аңлатпаның шеп тәрепинде турған интеграл 1 ге тең. Себеби унитар оператор ушын анықлама бойынша $\widehat{U}^{+}\widehat{U} = \widehat{1}.$ Демек $|\lambda|^{2} = 1$ теңлигине ийе боламыз.

Нормировкаланбаған функциялар ушын да шешим тап усындай жоллар менен алынады.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Эрмит операторының меншикли мәнислериниң ҳақыйқый екенлигин дәлиллеңиз.

2. Эрмит операторларының меншикли функцияларының ортогоналлық екенлигин дәлиллеңиз.

3. $\widehat{K}$ комплексли түйинлес оператордың меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыңыз:

$$\widehat{K}\psi = \psi^{*}.$$

4. Импульс операторы болған $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ операторының меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын табыңыз.

5. Импульстиң ҳәм координатаның бирдей атамадағы қураўшыларының операторларының сызықлы комбинациясы болған $\widehat{F} = \alpha\hat{p}_{x} + \beta\hat{x}$ операторының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыңыз. Бул аңлатпадағы α

менен β ҳақыйқый параметрлер. Меншикли функциялар системасының толық екенлигин дәлиллеңиз.

6. $\hat{F} = \sin\frac{d}{d\varphi}$ операторының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табыңыз. Бул аңлатпада φ арқалы поляр мүйеш белгиленген.

7. $\hat{F}^3 = c^2\hat{F}$ қатнасын қанаатландыратуғын $\hat{F}$ эрмит операторының меншикли мәнислерин табыңыз. Бул аңлатпада c арқалы ҳақыйқый параметр белгиленген.

Өз бетинше шешиў ушын берилген мәселелердиң жуўаплары

2.

$\psi_K = e^{i\alpha}f, K = e^{-2i\alpha}$ арқалы ықтыярлы ҳақыйқый функция, ал α арқалы ықтыярлы ҳақыйқый сан белгиленген.

3. $\mathbf{p}$ ықтыярлы ҳақыйқый вектор.

$$\psi_{\mathbf{p}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p},\mathbf{r})}.$$

4. F арқалы ықтыярлы ҳақыйқый сан белгиленген.

$$\psi_F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{(\beta x - F)^2}{2\alpha\beta\hbar}}.$$

5.

$$F = \sin(im)\,, \psi_F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

6.

$$F_1 = 0, \qquad F_{2,3} = \pm c.$$

4. Шредингер теңлемеси. Квантлық ҳаллардың ўақытқа байланыслы өзгериўи

Методикалық көрсетпелер. Системаның $\Psi(q,t)$ толқын функциясы Шредингер теңлемеси болған

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(q,t) \tag{4.1}$$

түринде жазылатуғын теңлемени қанаатландырады. Бул теңлемедеги $\hat{H}$ операторы Гамильтон операторы ямаса гамильтониан деп аталады. Егер тек бир бөлекше бар болса, онда квантлық системаның координаталарының жыйнағы q бөлекшениң радиус-векторы $\mathbf{r} = \{x, y, z\}$ болып табылады. Әпиўайы жағдайларда (релятивистлик эффектлер есапқа алынбаған жағдайларда) квантлық механикадағы $\hat{H}$ гамильтонианы классикалық $H(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ Гамильтон функциясының улыўмалық қағыйдаларына сәйкес координаталарды ҳәм улыўмаласқан импульстиң декарт қураўшыларын сәйкес операторлар менен алмастырыў, яғный $\mathbf{r} = \hat{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{r}$, $\mathbf{p} = \hat{\mathbf{p}} \equiv i\hbar\nabla$ түриндеги алмастырыўлар жолы менен алынады. Потенциал майданда жайласқан бир бөлекше жағдайында Гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + U(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla + U(\mathbf{r},t) \tag{4.2}$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада $U(\mathbf{r},t)$ арқалы бөлекшениң потенциал энергиясы, M арқалы оның массасы белгиленген.

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

арқалы Лаплас операторы - лапласиан белгиленген.

Бөлекшелердиң саны n болған жағдайда $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, t)$ толқын функциясы гамильтонианы

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\widehat{\mathbf{p}}_i^2}{2M_i} + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, t) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{\hbar^2}{2M_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, t)$$

болған (4.1)-Шредингер теңлемесин қанаатландырады. Бул аңлатпада M_i арқалы i −бөлекшениң массасы белгиленген. $\Delta_{\mathbf{r}_i}$ Лаплас операторындағы дифференциаллаў i −бөлекшениң координаталары бойынша жүргизиледи. $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, t)$ системаның потенциал энергиясы болып табылады. Бул потенциал энергия өз ишине бөлекшелер арасындағы өз-ара тәсирлесиў энергиясын қамтыйды.

$\widehat{\mathbf{p}}$ операторының Эрмит операторы екенлигине байланыслы $\widehat{H}$ операторы да Эрмит операторы болып табылады.

4.1-мәселе. Гелий атомының гамильтонианын жазыңыз.

Шешими. Мейли M_1 еки электронның ҳәр қайсысының массасы, ал M_2 гелий атомының ядросының массасы болсын. Ядроның радиус-векторын $\mathbf{R}$ арқалы, ал электронлардың радиус-векторларын $\mathbf{r}_1$ ҳәм $\mathbf{r}_2$ арқалы белгилеймиз. Системаның потенциал энергиясы электронлардың ядро ҳәм бир бири менен тәсирлесиў энергияларынан турады (ядроның заряды $Z = 2e$). Бундай жағдайда

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{2e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада e арқалы электронның заряды белгиленген.

(4.2)-аңлатпаға сәйкес гелий атомының гамильтонианы

$$\widehat{H} = \frac{\hbar^2}{2M_2} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2M_1} \left(\Delta_{\mathbf{r}_1} + \Delta_{\mathbf{r}_2}\right) - \frac{2e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

туринде жазылады.

4.2-мәселе. Массасы M болған бөлекшениң координатасының ҳәм импульсиниң орташа мәнислерин сәйкес $\langle x \rangle$ ҳәм $\langle p_x \rangle$ арқалы белгиленгенде

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p_x \rangle}{M} \tag{4.3}$$

қатнасының орынланатуғынлығын дәлиллеңиз.

Шешими. Координатаның орташа мәнисиниң аңлатпасы болған

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx$$

аңлатпасы ўақыт бойынша дифференциаллайық.

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} x \Psi dx + \int \Psi^* x \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx. \tag{4.4}$$

(4.1)-теңлемеден комплексли түйинлес Ψ^* функциясының

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \widehat{H}^* \Psi^* \tag{4.5}$$

теңлемесин қанаатландыратуғынлығы келип шығады.

(4.4)-аңлатпадағы $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ ҳәм $\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$ туўындыларын (4.1)- ҳәм (4.5)-аңлатпалардың жәрдеминде аңғартып мынаған ийе боламыз:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i}{\hbar}\int \hat{H}^*\Psi^* x\Psi dx-\frac{i}{\hbar}\int \Psi^* x\hat{H}\Psi dx. \tag{4.6}$$

$\hat{H}$ операторының Эрмит операторы екенлигинен пайдаланып, (4.6)-аңлатпаны былайынша көширип жазамыз:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i}{\hbar}\int \Psi^*\,\hat{H}x\Psi dx-\frac{i}{\hbar}\int \Psi^*\,x\hat{H}\Psi dx=\frac{i}{\hbar}\int \Psi^*\left[\hat{H},x\right]\Psi dx. \tag{4.7}$$

Гамильтониан ушын (4.1)-аңлатпаны пайдаланып ҳәм $\hat{p}_x^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ екенлигин есапқа алып төмендегини табамыз:

$$\begin{gathered}\left[\hat{H},x\right]\Psi=\hat{H}(x,\Psi)-x\left(\hat{H},\Psi\right)=\\=-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2(x\Psi)}{\partial x^2}+Ux\Psi+\frac{\hbar^2}{2M}x\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-xU\Psi=\frac{\hbar^2}{M}\frac{\partial\Psi}{\partial x}.\end{gathered} \tag{4.8}$$

(4.8)- ҳәм (4.7)- аңлатпаларды есапқа алып

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{i\hbar}{M}\int \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx\equiv\frac{1}{M}\int \Psi^*\,\hat{p}_x\Psi dx. \tag{4.9}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Биз усыны дәлиллеўимиз керек еди.

Тап сол сыяқлы үш өлшемли жағдайда

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^*\,\hat{\mathbf{r}}\,\Psi d\mathbf{r}=\frac{1}{M}\frac{d}{dt}\int \Psi^*\,\hat{\mathbf{p}}\,\Psi d\mathbf{r},$$

яғный

$$\frac{d\langle\mathbf{r}\rangle}{dt}=\frac{\langle\mathbf{p}\rangle}{M} \tag{4.10}$$

4.3-мәселе. Координатаның ҳәм күштиң проекциясының орташа мәнислери ушын (оларды $\langle x\rangle$ ҳәм $\langle F_c\rangle$ арқалы белгилеймиз)

$$M\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2}=\int \Psi^*\left(-\frac{\partial U}{\partial x}\right)\Psi dx \tag{4.1}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлиллеңиз. Бул аңлатпада M арқалы бөлекшениң массасы белгиленген.

Шешими. (4.9)-аңлатпаны ўақыт бойынша дифференциаллаймыз:

$$M\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2}=\int \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\hat{p}_x\Psi dx+\int \Psi^*\hat{p}_x\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx. \tag{4.12}$$

(4.1) менен (4.5) лерди пайдаланып ҳәм $\hat{H}$ операторының Эрмит операторы екенлигинен пайдаланып, (4.12)-аңлатпаны төмендегидей түрде қайтадан көширип жазамыз:

$$\begin{gathered}i\hbar M\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2}=-\int \hat{H}^*\Psi^*\hat{p}_x\Psi dx+\int \Psi^*\hat{p}_x\hat{H}\Psi dx=\\=\int \Psi^*\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]\Psi\,dx.\end{gathered} \tag{4.13}$$

Буннан кейин

$$\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]\Psi=\hat{p}_x\hat{H}\Psi-\hat{H}\hat{p}_x\Psi=$$

$$= \frac{\hat{p}_x^3}{2M}\Psi + \hat{p}_x(U\Psi) - \frac{\hat{p}_x^3}{2M}\Psi - \hat{p}_x(U\Psi) =$$
$$= -i\hbar U\frac{\partial\Psi}{\partial x} - i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}\Psi + i\hbar U\frac{\partial\Psi}{\partial x} = -i\hbar\frac{\partial U}{\partial x}\Psi.$$

екенлигин табамыз. Бундай жағдайда (4.13)-аңлатпадан

$$M\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \int \Psi^*\left(-\frac{\partial U}{\partial x}\right)\Psi dx$$

аңлатпасы келип шығады.

Анықлама бойынша

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x}.$$

ҳәм сонлықтан

$$M\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \int \Psi^* F_x \Psi dx.$$

Үш өлшемли жағдайда (4.11)-аңлатпа мынадай түрге енеди:

$$M\frac{d^2\langle \mathbf{r}\rangle}{dt^2} = \int \Psi^*(-\nabla U)\Psi d\mathbf{r} \equiv \langle \mathbf{F}\rangle \tag{4.14}$$

(4.3)-, (4.10)-, (4.11)- ҳәм (4.14)- теңликлер Эренфест теоремаларының мазмунын қурайды. Бул теоремалар бойынша квантлық механикада бөлекшениң қозғалысын характерлейтуғын шамалардың (координаталардың, импульстиң, энергияның) орташа мәнислери, соның менен бирге бөлекшеге тәсир ететуғын күштиң орташа мәниси бир бири менен классикалық механиканың теңлемелерине сәйкес келетуғын теңлемелер менен байланысқан. Классикалық орташа мәнислерге сәйкес келетуғын орташа мәнислер арасындағы қатнаслар 4.9- ҳәм 4.10-мәселелерде келтирилген

4.4-мәселе. Бөлекшениң итималлығының тығызлығы болған $|\Psi|^2$ шамасының ўақыттың өтиўи менен өзгерисин тәрийиплейтуғын аңлатпаны келтирип шығарыңыз (квантлық механикадағы үзликсизлик теңлемеси).

Шешими. Шексиз үлкен көлем бойынша емес, ал базы бир шекли көлем V бойынша алынған

$$\int_V |\Psi|^2 d\mathbf{r}$$

интегралын қараймыз. Бул интеграл бөлекшени берилген көлемде табыўдың итималлығын береди. Бул итималлықтың ўақыт бойынша туўындысын есаплаймыз:

$$\frac{d}{dt}\int_V |\Psi|^2 d\mathbf{r} = \frac{d}{dt}\int_V \Psi^*\Psi d\mathbf{r} = \int_V \left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) d\mathbf{r}. \tag{4.15}$$

(4.1)-, (4.2)- ҳәм (4.5)-аңлатпаларға сәйкес (4.15)-аңлатпаны

$$\frac{d}{dt}\int_V |\Psi|^2 d\mathbf{r} = -\int_V \frac{\hbar}{2iM}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*)d\mathbf{r} +$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\int_V (\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*)d\mathbf{r}$$

түринде көширип жазамыз. Бул жерде екинши интеграл нолге тең. Биринши интегралды былайынша жазыўға болады:

$$-\int_V \frac{\hbar}{2iM}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*)d\mathbf{r} =$$

$$= -\int_V \frac{\hbar}{2iM}\nabla(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*)d\mathbf{r}.$$

Ҳақыйқатында да дифференңиаллаў қағыйдалары бойынша

$$\nabla(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*) = \Psi^*\nabla^2\Psi + \nabla\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^* - \nabla\Psi\nabla\Psi^* =$$
$$= \Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^* = \Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*.$$

Солай етип,

$$\frac{d}{dt}\int_V |\Psi|^2 d\mathbf{r} = -\int_V \nabla\left[\frac{\hbar}{2iM}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*)\right]d\mathbf{r}. \quad (4.16)$$

Остроградский-Гаусс теоремасы бойынша бул аңлатпаның оң тәрепин V көлемин шеклеп турған S туйық бети бойынша интеграл менен алмастырыў мүмкин. Бундай өзгертиўлер мына формулаға алып келеди

$$\frac{d}{dt}\int_V |\Psi|^2 d\mathbf{r} = -\oint_S \frac{\hbar}{2iM}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*)d\mathbf{s}.$$

Бул аңлатпаның оң тәрепинде турған интеграл V көлеминде бөлекшени табыўдың итималлығынын кемейиў тезлигин беретуғынлығы көринип тур. Сонлықтан бул интеграл S бети бойынша итималлықтың ағымына тен. Усыған байланыслы

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2iM}(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*) \quad (4.17)$$

векторын итималлық ағысының тығызлығы деп түсинемиз.

(4.17)-формуладан пайдаланып (4.16)-формуланы былайынша жазамыз:

$$\frac{d}{dt}\int_V |\Psi|^2 d\mathbf{r} = \int_V \frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}d\mathbf{r} = -\int_V \nabla\cdot\mathbf{j}d\mathbf{r}.$$

Егер $\rho = |\Psi|^2$ белгилеўин қабыл етсек V көлеминин ықтыярлы түрде алынатуғынлығына байланыслы кенисликтин ҳәр бир ноқатында

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\,\mathbf{j} = 0$$

шәртиниң орынланыўының керек екенлигин анғарамыз. Бул аңлатпада

$$\nabla\cdot\mathbf{j} \equiv \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z}$$

скаляр көбейме екенлиги есапқа алынған. j_x, j_y, j_z арқалы $\mathbf{j}$ векторының декарт координаталарына түсирилген проекциялары белгиленген. Алынған қатнасты үзликсизлик теңлемеси деп атаймыз. Бул қатнас классикалық үзликсизлик теңлемесине уқсас. Мысалы электродинамикада үзликсизлик теңлемеси

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\,\mathbf{j} = 0$$

түрине ийе. Бул аңлатпада ρ арқалы зарядтын тығызлығы, ал $\mathbf{j}$ арқалы электр тоғынын тығызлығы белгиленген.

4.5-мәселе. Квантлық механикада F шамасынын ўақыт бойынша алынған туўындысы ҳаққында гәп еткенде орташа мәниси орташа мәнисинен ўақыт бойынша алынған туўындыға тең шаманы түсинеди, яғный мынадай теңликтин орынланыўы керек:

$$\langle\frac{dF}{dx}\rangle = \frac{d}{dt}\langle F\rangle.$$

Усындай анықламадан келип шығып $\hat{F}$ операторын табыңыз.

Шешими. Анықлама бойынша

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{d}{dt}\int \Psi^*\hat{F}\Psi dq = \int \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\hat{F}\Psi dq +$$

$$+\int \Psi^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial x}\Psi dq + \int \Psi^*\hat{F}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dq.$$

Бул аңлатпада $\frac{\partial\hat{F}}{\partial x}$ арқалы $\hat{F}$ операторынан ўақыт бойынша туўынды алыўдың нәтийжесинде алынған оператор белгиленген. $\hat{F}$ операторы ўақыттан параметр сыпатында ғәрезли бола алады.

(4.1) менен (4.5) аңлатпаларын қайтадан еске түсиремиз:

$$i\hbar\frac{d\Psi(q,t)}{dt} = \hat{H}\Psi(q,t)$$

ҳәм

$$i\hbar\frac{d\Psi^*(q,t)}{dt} = \hat{H}^*\Psi^*(q,t).$$

Усы аңлатпаларды есапқа алып

$$\frac{d}{dt}\langle F\rangle = \frac{i}{\hbar}\int\left(\hat{H}^*\Psi^*\right)\hat{F}\Psi dq +$$

$$+\int \Psi^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}\Psi dq = \frac{i}{\hbar}\int \Psi^*\hat{F}\hat{H}\Psi dq.$$

аңлатпасына ийе боламыз. $\hat{H}$ операторы Эрмит операторы болғанлықтан ҳәм усыған сәйкес

$$\int\left(\hat{H}^*\Psi^*\right)\hat{F}\Psi dq = \int \Psi^*\hat{H}\,\hat{F}\Psi dq. \tag{4.18}$$

Екинши тәрептен

$$\langle\frac{dF}{dt}\rangle = \int \Psi^*\,\hat{\dot{F}}\Psi dq. \tag{4.19}$$

(4.18)-аңлатпа менен (4.19)-аңлатпаны бир бири менен теңлестирип мынаны аламыз:

$$\hat{\dot{F}} = \frac{\partial\hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}\,\hat{F} - \hat{F}\hat{H}\right) = \frac{\partial\hat{F}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{F}\right] \tag{4.20}$$

(4.20)-аңлатпадан егер F физикалық шаманың операторы $\hat{F}$ анық түрде ўақыттан ғәрезсиз ҳәм гамильтониан менен коммутацияланатуғын болса, онда $\hat{\dot{F}} = 0$ ҳәм бунық

$$\langle \frac{dF}{dt} \rangle = \frac{d}{dt} \langle F \rangle = 0$$

екенлигин аңғартады. Буннан $\langle F \rangle = const$ нәтийжесин аламыз. Басқа сөз бенен айтқанда шаманың орташа мәниси ўақыттың өтиўи менен турақлы болып қалады екен. Демек берилген ҳалда F шамасын белгили бир мәниске ийе болса, онда ўақыттың буннан кейинги моментлеринде де усы шама сондай мәниске ийе болады екен.

Базы бир методикалық көрсетпелер: Мейли системаның гамильтонианы ўақыттан ғәрезсиз болсын. Бундай жағдайда (4.20)-аңлатпаға сәйкес $\hat{\dot{H}} = 0$ ҳәм Гамильтон функциясын сақланады деп есаплаўға болады. Бул жағдай классикалық физика бойынша системанын улыўмалық энергиясының сақланыўын аңғартады. Ал квантлық механикада болса энергиянын белгили бир анық мәниске ийе болыўы шәрт емес. Энергияның сақланыў нызамының мәниси бул жағдайда мынадан ибарат: егер берилген ҳалда энергия анық мәниске ийе болатуғын болса, онда энергиянын бул мәниси ўақыттын өтиўи менен өзгериске ушырамайды.

Энергиясы анық мәниске ийе болатуғын ҳалларды системаның стационар ҳаллары деп аталады. Стационар ҳаллар

$$\hat{H}\Psi(q,t) = E\Psi(q,t)$$

теңлемесин қанаатландырады. Бул теңлемеде $\Psi(q,t)$ арқалы стационар ҳаллардың толқын функциялары, ал E арқалы энергиянын меншикли мәнислери белгиленген. Усыған сәйкес стационар ҳаллардын $\Psi(q,t)$ толқын функциялары ушын жазылған (4.1) теңлемеси

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(q,t) = E\Psi(q,t)$$

ўақыт бойынша тиккелей интегралланыўы мүмкин. Интегралланыўдың нәтийжесинде

$$\Psi(q,t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)\psi(q)$$

функциясына ийе боламыз. Бул аңлатпада $\psi(q)$ арқалы тек координаталардың функциясы белгиленген.

Киши ҳәриплер менен биз ўақытлық көбейтиўшисиз стационар ҳаллардын толқын функцияларын белгилеймиз. Бул функциялар ҳәм меншикли мәнислердиң мәнислери

$$\hat{H}\psi(q) = E\psi(q) \qquad (4.21)$$

теңлемесинин жәрдеминде анықланады. Бул теңлемени стационар ҳаллар ушын Шредингер теңлемеси ямаса қысқа түрде Шредингер теңлемеси деп атайды. (4.21)-теңлемени шешиў арқалы $\hat{H}$ операторының меншикли мәнислери ҳәм меншикли функциялары анықланады. Сонлықтан бул операторға 3-параграфта айтылып өтилген Эрмит операторының барлық меншикли мәнислери менен меншикли функцияларының барлық қәсийетлери тән.

Егер (4.21)- Шредингердиң стационар теңлемесинин шешимлери белгили болса, онда (4.1)-теңлемениң шешимин дискрет спектрге ийе жағдайда

$$\Psi_n(q,t) = \sum_n a_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)\psi_n(q) \tag{4.22}$$

ямаса үзликсиз спектр орын алған жағдайда

$$\Psi(q,t) = \int a_E \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)\psi_E(q)dE \tag{4.23}$$

түринде жазамыз.

(4.22)- ҳәм (4.23)- аңлатпалардағы коэффициентлерди анықлаў ушын ўақыттың басланғыш моментиндеги толқын функциясын бериў керек:

$$a_{n(E)} = \int \psi^*_{n(E)}(q)\Psi(q,t=0)dq \tag{4.24}$$

4.6-мәселе. Кеңлиги a болған бир өлшемли шексиз терең потенциал шуқырдағы бөлекшениң стационар ҳаллары төмендегидей толқын функциялары менен тәрийипленеди:

$0 < x < a$ интервалында $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)$,

$x \leq 0$ ямаса $x \geq a$ областларында $\psi_n(x) = 0$.

Бул толқын функциялары энергияның

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2Ma^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

меншикли мәнислерине сәйкес келеди. Бул формулада M арқалы бөлекшениң массасы белгиленген. Мейли ўақыттың басланғыш моментинде бөлекшениң толқын функциясы

$$\Psi(x,t=0) = \frac{4}{\sqrt{5a}}\sin^3\frac{\pi x}{a}$$

түрине ийе болған болсын. Ўақыттың қәлеген ықтыярлы моменти ушын толқын функциясын табыңыз.

Шешими. Қәлеген ўақыт моментинде толқын функциясы (4.22)-теңликтиң жәрдеминде анықланады. Бул жағдайда a_n қатарға жайыў коэффициентлерин (4.24)-интегралды тиккелей есаплаў жолы менен емес, ал

$$\sin^3\frac{\pi x}{a} = \frac{3}{4}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \frac{1}{4}\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

тригонометриялық формуласын пайдаланып анықлаған қолайлы. (4.27)

Бундай жағдайда$\Psi(x,t=0) = \frac{4}{\sqrt{5a}}\sin^3\frac{\pi x}{a} = \frac{3}{\sqrt{5a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \frac{1}{\sqrt{5a}}\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$.

Екинши тәрептен (4.22)-аңлатпаға сәйкес

$$\Psi(x,t=0) = \sum_n a_n\psi_n(x) = \sum_n a_n\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right). \tag{4.26}$$

(4.25)- ҳәм (4.26)- аңлатпаларды салыстырып биз тек

$$a_1 = \frac{3}{\sqrt{10}} \text{ ҳәм } a_3 = \frac{1}{\sqrt{10}}$$

коэффициентлериниң ғана нолге тең емес екенлигин көремиз Энергияның сәйкес мәнислери

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2Ma^2} \text{ ҳәм } E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2Ma^2}.$$

Солай етип ең ақырғы аңлатпамыз мынадай түрге ийе болады екен:

$$\Psi(x,t) = \frac{3}{\sqrt{5a}}\exp\left(-\frac{i\pi^2\hbar}{2Ma^2}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) -$$
$$-\frac{1}{\sqrt{5a}}\exp\left(-\frac{9i\pi^2\hbar}{2Ma^2}\right)\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right).$$

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын арналған мәселелер

1. Декарт координаталар системасында еки өлшемли гармоникалық осциллятордың гамильтонианын жазыңыз. Осциллятордың массасы M ге, ал жийилиги ω ға тең болсын.

2. Массалар орайы системасында водород атомының гамильтонианын жазыңыз. Водород атомының массасы M_1 ге, ал электронның массасы M_2 ге тең.

3. $\mathbf{L} = [\mathbf{rp}]$ импульс моментиниң ҳәм $\mathbf{M} = [\mathbf{rF}]$ күш моментиниң кеңисликлик орташа мәнислери ушын

$$\frac{d\langle\mathbf{L}\rangle}{dt} = \langle\mathbf{M}\rangle$$

қатнасының орынланатуғынлығын көрсетиңиз.

4. Мейли $\langle F\rangle$ арқалы $\hat{F}$ операторының $\Psi(q,t)$ ҳалдағы ўақыттан анық түрде ғәрезсиз болған орташа мәниси белгиленген болсын.

$$\frac{d\langle F\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{F}]\rangle$$

теңлигиниң орынлы екенлигин көрсетиңиз. Усы нәтийжени пайдаланып

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \langle\frac{\partial H}{\partial p_x}\rangle, \frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = -\langle\frac{\partial H}{\partial x}\rangle$$

қатнасының дурыс екенлигин дәлиллеңиз.

5. Массасы M болған бөлекшениң халы $\Psi(\mathbf{r},t) = C\exp\left(i,\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et}{\hbar}\right)$ толқын функциясы менен берилген болсын. Бул аңлатпада $\mathbf{p}$ арқалы бөлекшениң импульси, $E = p^2/2M$ арқалы бөлекшениң энергиясы, ал C арқалы нормировкалаўшы константа белгиленген. Бул бөлекшениң тарқалыўының итималлығының ағысын ҳәм итималлығының ағысын табыңыз.

6. Егер стационар системаның гамильтонианы λ параметринен ғәрезли болса, онда ықтыярлы E стационар ҳалында

$$\left\langle\Psi\middle|\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda}\middle|\Psi\right\rangle = \frac{\partial E}{\partial\lambda}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлиллеңиз. Бул теңликте Ψ арқалы системаның толқын функциясы белгиленген.

7. Стационар ҳалларда итималлық тығызлығы менен итималлық ағысының тығызлығының орташа мәнислериниң ўақыттан ғәрезсиз екенлигин көрсетиңиз.

8. Кернеўлиги $\mathbf{E}_0$ болған бир текли электр майданындағы заряды e болған бөлекше ушын $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{p}} - \mathbf{E}_0/t$ операторының сақланатуғын шаманың операторы екенлигин көрсетиңиз. Көрсетпе: Бөлекшениң гамильтонианы $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} - e\mathbf{E}_0\mathbf{r}$ түринде жазылады.

9. Бөлекшениң еркин қозғалысының стационар ҳаллары

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right)$$

толқын функциялары менен тәрийипленеди. Бул толқын функциялары энергияның

$$E = \frac{p_x^2}{2M}$$

меншикли мәнислерине сәйкес келеди. Мейли ўақыттың басланғыш моментиндеги еркин бөлекшениң толқын функциясы

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{(\pi a^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{\frac{i p_0 x}{\hbar} - \frac{x^2}{2a^2}\right\}$$

түринде жазылатуғын болсын. Бул аңлатпада $a > 0$, p_0 шамалары ҳақыйқый параметрлер. Қәлеген ўақыт моменти ушын толқын функцияларын табыңыз.

Өз бетинше шешиў ушын арналған мәселелердиң жуўаплары

1.

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{M\omega^2(x^2 + y^2)}{2}.$$

2.

$$\widehat{H} = \frac{\hbar^2}{2(M_1 + M_2)} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{r};$$

$$\mathbf{R} = \frac{M_1 \mathbf{r}_1 + M_2 \mathbf{r}_2}{M_1 + M_2}, \qquad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2},$$

$\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ арқалы сәйкес ядро менен электронның радиус-векторлары белгиленген.

5. $\mathbf{j} = |C|^2 \frac{\mathbf{p}}{m}$.

9.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(a^2\pi)^{1/4}\sqrt{1 + i\frac{\hbar t}{Ma^2}}} \exp\left(-\frac{x^2 - 2ia^2 \frac{p_0}{\hbar} x + \frac{it}{M\hbar} p_0^2 a^2}{2a^2\left(1 + i\frac{\hbar t}{Ma^2}\right)}\right).$$

5. Бир өлшемли қозғалыс. Үзликсиз спектр

Бир өлшемли қозғалыс деп бир еркинлик дәрежесине ийе системаның қозғалысына айтамыз. Системаның қозғалысын тәрийиплейтуғын кеңисликлик координатаны x арқалы белгилеймиз. Мейли системаның гамильтонианы ўақыттан анық ғәрезсиз болсын. Бул жағдайда системанын толқын функциясын анықлаў мәселеси (4.21)-Шредингер теңлемесин шешиўге алып келинеди. Бул теңлеме $U(x)$ потенциал майданы бар жағдайда мына түрде жазылады:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2M}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi(x) = 0. \tag{5.1}$$

Бул теңлемениң шешими $\psi(x)$ толқын функциясы 3-параграфта атап өтилген толқын функцияларының барлық қәсийетлерин қанаатландырады. Мысалы бул функцияның үзликсиз, бир мәнисли ҳәм шекли болыўы керек. Усының менен бирге

$U(x)$ потенциал энергиясы ҳеш орында шексизликке айланбайтуғын болса, онда ҳәр бир ноқатта $\frac{d\psi(x)}{dx} \equiv \psi'(x)$ туўындысының үзликсиз болып қалыўы керек.

Бул бөлимде биз үзликсиз энергия спектри менен характерленетуғын бөлекшениң қозғалыўы менен байланыслы болған мәселелерди қарап шығамыз. Классикалық механикада бундай қозғалыстың аналогы сыпатында инфинитлик қозғалысты көрсетиўге болады.

5.1-мәселе. Массасы M болған бөлекшениң бир өлшемли қозғалысының стационар ҳалларының энергиясының мәнислери менен толқын функцияларын табыңыз.

Шешими. Қозғалыс еркин болғанлықтан

$$U(x) = 0, \widehat{H} = \widehat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

ҳәм (5.1)-теңлемеден мынаған ийе боламыз:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2M}{\hbar^2} E\psi(x) = 0.$$

Бул теңлемениң дара шешимин

$$\psi_{p_x}^{(1,2)} = C_{1,2} \exp\left(\pm i \frac{p_x}{\hbar} x\right) \tag{5.2}$$

түринде жазыўға болады. Бул аңлатпада $C_{1,2}$ арқалы ықтыярлы константалар белгиленген. $p_x = \sqrt{2ME}$ арқалы бөлекшениң x көшери бағытындағы импульси белгиленген.

$C_1 \exp\left(i \frac{p_x}{\hbar} x\right)$ шешими x көшери бағытында қозғалыўшы бөлекшеге сәйкес келеди (x көшери оң тәрепке қарай бағытланған деп есаплаймыз).

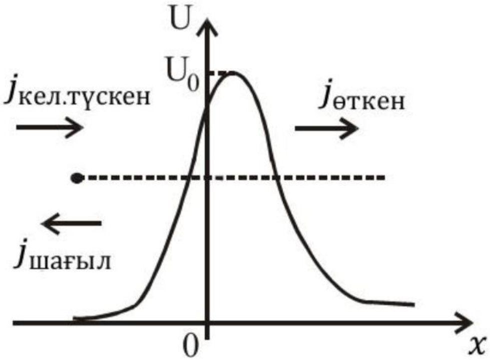
$C_2 \exp\left(-i \frac{p_x}{\hbar} x\right)$шешими болса шеп тәрепке қарай қозғалыўшы бөлекшеге сәйкес келеди. Солай етип E энергиясына ийе стационар ҳал еки қайтара азғынған.

(5.2)-шешимлер p_x импульсиниң қәлеген мәнислеринде бир мәнисли, үзликсиз ҳәм бир мәнисли болады. Демек (5.2)-шешимлер $E > 0$ қәлеген хақыйқый мәнислеринде бир мәнисли, үзликсиз ҳәм бир мәнисли болады деген сөз. Бул өз гезегинде бөлекшениң еркин қозғалысының спектриниң үзликсиз болатуғынлығын көрсетеди.

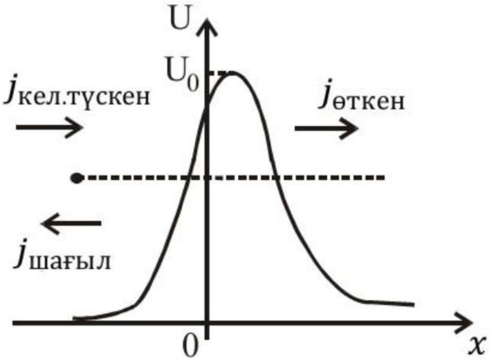
3.2-мәселеде табылған нормировкалаўшы коэффициенти есапқа алғанда еркин бөлекшеуушынтолқын функциясы былайыншажазылады:

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i \frac{p_x}{\hbar} x\right).$$

Бул функция импульстиң $\hat{p}_x$ проекциясы операторының да меншикли функциясы болып табылады (3.2-мәселеге қараңыз). Бул факт еркин бөлекшениң $\widehat{T} = \hat{p}_x^2$ кинетикалық энергиясын анықлайтуғын p_x импульсин бир ўақытта өлшеўдиң мүмкин екенлигиниң нәтийжеси болып табылады ($\widehat{T}$ ҳәм $\hat{p}_x$ операторлары коммутацияланады).



5.1-сүўрет.



5.2-сүўрет.

Базы бир методикалық көрсетпелер: Биз потенциал энергияның координатадан ғәрезлигин 5.1-сүўреттегидей деп есаплайық. Бул жағдайда функциясы бир максимумға ийе болады ҳәм усы максимумның оң ҳәм шеп тәреплеринде бир қәлипте (монотонлы түрде) киширейеди. $U(x)$ потенциал энергияның усындай ғәрезлигин потенциаллық барьер деп атайды. Мейли шеп тәрептен потенциаллық барьерге шексизликтен бөлекшелердиң бир текли ағысы келип түсетуғын болсын. Квантлық механикада улыўма жағдайда бөлекшениң барьерде шағылысыўының да (бөлекшениң энергиясы $E > U_0$ болған жағдайда да), бөлекшениң барьер арқалы өтиўиниң де (бөлекшениң энергиясы $E < U_0$ болған жағдайда да) итималлығы бар. Солай етип, потенциаллық барьер арқалы өткенде бөлекшелердиң үш ағысы болады екен: келип түсиўши, өтиўши ҳәм шағылысқан бөлекшелер ағыслары Бул процессти төмендегидей коэффициентлер менен тәрийиплеген қолайлы:

Шағылысыў коэффициенти:

$$R = \frac{|j_{shaǵıl}|}{|j_{kel.túsken}|}. \tag{5.3}$$

Өтиў коэффициенти:

$$D = \frac{|j_{ónken}|}{|j_{kel.túsken}|}. \tag{5.4}$$

(5.3)- ҳәм (5.4)-формулаларда $|j_{kel.túsken}|$, $|j_{shaǵıl}|$ ҳәм $|j_{ónken}|$ шамалары арқалы сәйкес (4.17)-формула менен анықланған келип түскең шағылысқан ҳәм өткен бөлекшелердиң итималлық ағысының тығызлығы белгиленген. $|j_{kel.túsken}|$, $|j_{shaǵıl}|$ шамалары $x \to -\infty$ болған жағдайда, ал $|j_{ónken}|$ шамасы $x \to +\infty$ болған жағдай ушын есапланады. Бул жерде қарап атырылған стационар жағдайда (бөлекшелердиң ағысы толығы менен қәлиплескеннен кейин) итималлықтың ағысының тығызлығы ўақытқа байланыслы болмайды ҳәм стационар ҳаллардың толқын функциялары $\psi(x)$ пенен анықланады:

$$j = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx}\right). \tag{5.5}$$

Солай етип шағылысыў ҳәм өтиў коэффициентлерин анықлаў ушын Шредингер теңлемесин шешиў ҳәм буннан кейин $|j_{kel.túsken}|$, $|j_{shaǵıl}|$ ҳәм $|j_{ónken}|$ шамаларын анықлаў керек екен. Физикалық көз-қараслардан шағылысыў ҳәм өтиў коэффициентлериниң қосындысы 1 ге тең болыўы керек, яғный

$$R + D = 1.$$

5.2-мәселе. "Потенциал текшеге" ушып келиўши бөлекше ушын шағылысыў коэффициентин табыңыз.

$x < 0$ теңсизлиги орынланғанда $U(x) = 0$,

$x < 0$ теңсизлиги орынланғанда $U(x) = U_0$.

Бөлекшениң энергиясы $E < U_0$ (5.2-сүўрет).

Шешими: Текшениң шеп тәрепиндеги областты (бул областта $x < 0$) I арқалы ҳәм усы областқа тийисли болған барлық шешимлерди 1 индекси менен белгилеймиз. Текшениң оң тәрепиндеги областты II арқалы белгилеймиз ҳәм усы областқа тийисли болған барлық шешимлерди 2 индекси менен айырып көрсетемиз.

Усындай күш майданындағы бөлекше ушын (5.1)-Шредингер теңлемеси төмендегидей түрге ийе:

I областта

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

ҳәм II областта

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

Енди

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}, \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}$$

белгилеўлерин киргиземиз ҳәм I менен II областлар ушын Шредингер теңлемесин жаңа белгилеўлерде жазамыз:

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_1(x) = 0,$$
$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2\psi_2(x) = 0.$$

Бул теңлемелердиң шешимлери

$$\psi_1(x) = A_1\exp(ik_1x) + B_1\exp(-ik_1x),$$
$$\psi_2(x) = A_2\exp(k_2x) + B_2\exp(-k_2x).$$

функциялары болып табылады.

$\psi_1(x)$ толқын функциясындағы биринши қосылыўшы x көшери бойы менен -∞ тен (минус шексизликтен) текшеге қарап тарқалатуғың яғный шеп тәрептен оң тәрепке қарай тарқалатуғын толқынды тәрийиплейди (келип түсиўши толқын). Тап сол сыяқлы екинши қосылыўшы x көшери бойы менен қарама-қарсы бағытта тарқалатуғын толқынды тәрийиплейди (шағылысқан толқын).

Толқын функциясы шекленген болыўы керек болғанлықтаң ал $\psi_2(x)$ толқын функциясындағы биринши қосылыўшы x тың мәниси шексизликке умтылғанда шексиз үлкейетуғынлығына байланыслы бул қосылыўшының алдындағы A_2 коэффициентиниң нолге тең болыўын талап етиў керек.

Потенциал текшениң бийиклиги шекли болғанлықтан I ҳәм II областлар арасындағы шегарада толқын функциясы тек үзликсиз емес, ал тегис те болыўы керек (яғный үзликсиз туўындыға ийе болыўы керек). Еки областтың шегарасындағы толқын функцияларын ҳәм олардың туўындыларын теңлестириў тигиў шәрти деп аталады. Бул жағдайда тигиў шәрти төмендегидей түрге ийе:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

ҳәм

$$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0}$$

ямаса

$$A_1 + B_1 = B_2, \qquad ik_1A_1 - ik_1B_1 = -k_2B_2 \tag{5.6}$$

(5.6)-теңлемелер B_1 ҳәм B_2 коэффициентлерин келип түсиўши толқынның амплитудасы арқалы аңлатыўға мүмкиншилик береди. Биз қарап атырғандай мәселелерде физикалық мәниске ийе барлық шамалар (мысалы шашыратыў, өтиў коэффициентлери ҳәм тағы басқалар) B_1 ҳәм B_2 коэффициентлериниң A_1 ге қатнасы (ямаса соған усаған қатнаслар) түринде анықланатуғын болғанлықтан улыўмалықты жоғалтпай $A_1 = 1$ деп есаплаўға болады. Бундай жағдайда (5.6)-аңлатпадан B_1 ҳәм B_2 коэффициентлери ушын мыналарды аламыз:

$$B_1 = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}, \qquad B_2 = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}.$$

Солай етип бөлекшениң толқын функциялары мынадай болады екен:

$$\psi_1(x) = \exp(ik_1x) + \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\exp(-ik_1x)\,, \qquad x < 0,$$

$$\psi_2(x) = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}\exp(-k_2x).$$

(5.6)-теңлемелер системасының k_1 ҳәм k_2 шамаларының қәлеген мәнислеринде, яғный энергия E ниң қәлеген мәнислеринде шешимлерге ийе болады. Бул бөлекшениң үзликсиз энергиялық спектрге ийе болатуғынлығын аңғартады.

(5.5)-аңлатпаны пайдаланып итималлық ағысының тығызлығын табамыз:

$$j_{tús} = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\psi^*_{tús}\frac{d\psi_{tús}}{dx} - \psi_{tús}\frac{d\psi^*_{tús}}{dx}\right) = \frac{\hbar k_1}{M},$$

$$j_{shaǵ} = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\psi^*_{shaǵ}\frac{d\psi_{shaǵ}}{dx} - \psi_{shaǵ}\frac{d\psi^*_{shaǵ}}{dx}\right) = \frac{\hbar k_1}{M}\left|\frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\right| = \frac{\hbar k_1}{M}.$$

Бул аңлатпада

$$j_{tús} = \exp(ik_1x),$$

$$j_{shaǵ} = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}\exp(-ik_1x).$$

Шағылыстырыў коэффициенти мынадай мәнислерди қабыл етеди:

$$R = \frac{|j_{shaǵ}|}{|j_{tús}|} = 1.$$

Алынған нәтийже классикалық механикада бөлекшелердиң барлығының потенциал текшеде шағылысатуғынлығын аңғартады (жүз процентлик итималлық пенен). Бул жерде классикалық жағдайдан айырма бөлекшениң II областта, яғный барьердиң астында болыўының итималлығының нолге тең емес екенлигинде. Ҳақыйқатында да $\psi_2(x)$ толқын функциясы ҳәм соның менен бирге барьер областында бөлекшени табыўдың итималлығының тығызлығы $|\psi_2(x)|^2$ нолге тең емес ҳәм x тың өсиўи менен экспоненциаллық нызам бойынша киширейеди. Сонлықтан шағылысыў толық болатуғын болса да, бул шағылысыўдың I ҳәм II областлардың шегарасында жүзеге келиўи шәрт емес. Қандай да бир анық итималлық пенен бөлекше II областқа кире алады ҳәм буннан кейин бул областты таслап кетеди[1].

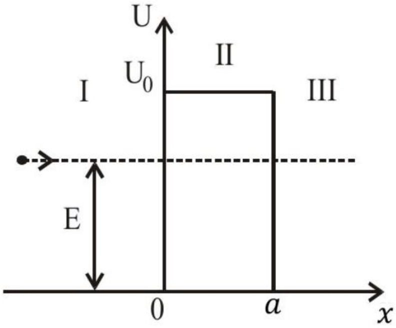
5.3-мәселе.

$x < 0$ ҳәм $x > a$ теңсизликлери орынланғанда $U(x) = 0$,

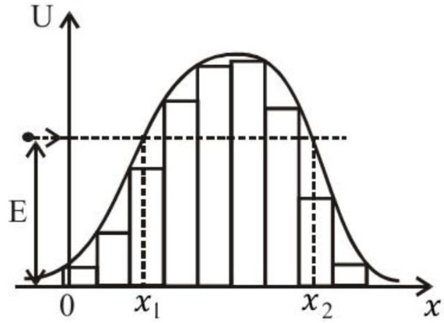
$0 < x < a$ теңсизликлери орынланғанда $U(x) = U_0$

шәртин қанаатландыратуғын бийиклиги U_0 ҳәм кеңлиги a болған туўры мүйешли потенциал барьер бар болған жағдайда бөлекше ушын шағылыстырыў ҳәм өтиў коэффицинтлерин есаплаңыз. Бөлекшениң энергиясы $E < U_0$ (5.3-сүўрет).

Шешими. Барьердиң шеп тәрепин I арқалы, оң тәрепин II арқалы, ал $0 < x < a$ областын III саны арқалы белгилеймиз. Бул областлардағы толқын функцияларын сәйкес 1, 2 ҳәм 3 индекслери арқалы бир биринен айырамыз. Барьерге бөлекше x координатасының терис мәнислери тәрепинен келип жетеди, яғный шеп тәрептен оң тәрепке қарай қозғалады деп есаплаймыз.



5.3-сүўрет.



5.4-сүўрет.

I, II ҳәм III областлар ушын Шредингер теңлемеси мынадай түрлерге ийе болады:

I область:

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

II область:

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

III область:

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + k_1^2\psi_3(x) = 0,$$

Бул аңлатпаларда

$$k_1 = \sqrt{2ME/\hbar^2}, \qquad k_2 = \sqrt{2M(U_0 - E)/\hbar^2}.$$

Бул теңлемелердиң шешимлери болған толқын функцияларын былайынша жазамыз:

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(i\,k_1 x) + B_1 \exp(-i\,k_1 x), \psi_2(x) = A_2 \exp(\,k_2 x) + B_2 \exp(-\,k_2 x),$$

$$\psi_3(x) = A_3 \exp(i\,k_1 x) + B_3 \exp(-i\,k_1 x),$$

$\psi_1(x)$ функциясындағы биринши қосылыўшы барьерге келип түсетуғын толқынға сәйкес келеди. Мәселениң улыўмалықлығын төменлетпей $A_1 = 1$ деп есаплаймыз (5.2-мәселеде де тап сондай амплитуданы қабыл еттик). $B_1 \exp(-i\,k_1 x)$ ағзасы бойынша шағылысқан толқынға, ал $A_3 \exp(i\,k_1 x)$ ағзасы барьер арқалы

[1] Бул эффекттиң оптикадағы аналогы толық ишки шағылысыў болып табылады.

өткен толқынға сәйкес келеди. $\psi_3(x)$ функциясындағы екинши қосылыўшы оң тәрептен шеп тәрепке қарай қозғалыўшы тегис толқын болып табылады. Бирақ III областта тек өткен толқын ғана болатуғынлығын есапқа алсақ, онда коэффициентин нолге тең деп есаплаў керек болады (себеби барьер арқалы өткен толқынның алдында басқа барьер жоқ).

Барьердиң шегараларындағы (яғный $x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларындағы) толқын функцияларының ҳәм олардың туўындыларының үзликсизлик шәртлери B_1, A_2, B_2, A_3 төрт белгисиз коэффициентлери ушын төрт теңлемелер системасына алып келеди:

$$\begin{cases} 1 + B_1 = A_2 + B_2, \\ ik_1 - ik_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2, \\ A_2 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = A_3 e^{ik_1 a}, \\ k_2 A_2 e^{k_2 a} - k_2 B_2 e^{-k_2 a} = ik_1 A_3 e^{ik_1 a}. \end{cases} \tag{5.7}$$

Бул теңлемелер системасы k_1 менен k_2 шамаларының қәлеген мәнислеринде, яғный бөлекшениң қәлеген E энергиясы ушын шешимлерге ийе болады. Демек бөлекшениң энергиялық спектри үзликсиз болады деген сөз.

(5.7)-теңлемелер системасын шешип өткен толқынның амплитудасы A_3 ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$A_3 = \frac{4ik_1 k_2 \exp(-ik_1 a)}{(k_1 + ik_2)^2 \exp(k_2 a) - (k_1 - ik_2)^2 \exp(-k_2 a)}$$

Енди барьерге келип түсиўши ҳәм барьер арқалы өтиўши толқынлар ушын итималлықлар ағысының тығызлықларын есаплаймыз:

$$|j_{tús}| = \frac{\hbar k_1}{M}, \qquad |j_{ótken}| = \frac{\hbar k_1}{M} |A_3|^2.$$

Барьер арқалы өтиў коэффициенти:

$$D = \frac{|j_{ótken}|}{|j_{tús}|} |A_3|^2 = \sqrt{1 + \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\right)^2 sh\ (k_2 a)}.$$

Шағылыстырыў коэффиңинети:

$$R = 1 - D.$$

Барьердиң кеңлиги a шамасы $k_2 a$ >>1, $\exp(-k_2 a) \ll 1$ шәртлерин қанаатландыратуғын болса гиперболалық синусты экспонента менен алмастырыўға болады:

$$sh\ (k_2 a) \approx \frac{1}{2} \exp(k_2 a)$$

ҳәм бөлекшениң барьер арқалы өтиў коэффициенти мына түрге ийе болады:

$$D = \frac{16 k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2} \exp(-k_2 a).$$

Бул аңлатпаға k_1 менен k_2 шамаларының мәнислерин қойып,

$$D = D_0 \exp\left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2M(U_0 - E)}\right] \tag{5.8}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул аңлатпада

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

коэффициенти $\frac{E}{U_0}$ қатнасының әсте-ақырынлық пенен өзгеретуғын функциясы болып табылады. Ал $\frac{E}{U_0}$ қатнасының мәниси әмелий жақтан барлық әҳмийетли жағдайларда 1 ге жақын.

Солай етип D коэффициентине тийкарғы үлести (5.8)-аңлатпадағы экспонента береди. Буннан өтиў коэффиңенти D шамасының барьердиң a кеңлигинен, бөлекшениң массасы M нен ҳәм $E-U_0$ айырмасынан күшли ғәрезли (экспоненциаллық) екенлигин көремиз.

Бийиклиги бөлекшениң энергиясынан үлкен болған потенциал барьер арқалы өтиўин туннеллик эффект деп атаймыз.

5.4-мәселе. (5.8)-формуланы пайдаланып бөлекшенин ықтыярлы формаға ийе потенциал барьерден өтиўи коэффициенти ушын аңлатпаны алыңыз.

Шешими. Потенциал барьерди избе-из қойылған енсиз, биринен сон бири жайласқан туўры мүйешли потенциал барьерлерден турады деп есаплаймыз (5.4-сүўрет). Барьер жеткиликли дәрежеде бир тегис формаға ийе болсын. Демек оның бийиклиги бөлекшениң де Бройль толқыны узынлығындай (яғный $\lambda=\frac{2\pi\hbar}{p}$ шамасындай, бул аңлатпада $p=\sqrt{2ME}$ бөлекшениң импульси) аралықларда сезилерликтей өзгериске ушырамайды деген сөз. Соның менен барьер үстиндеги бөлекшенин шағылысыўын есапқа алмаймыз.

i-туўры мүйешли барьер арқалы өткен бөлекше $(i+1)$- барьерге келип түсиўши бөлекше болып табылады ҳ.т.б. Избе-из жайласқан барьерлер дизбегинен бөлекшенин өтиўинин итималлығы бөлекшенин ҳәр бир барьерден өтиўинин итималлықларының көбеймесине тен. Солай етип өтиў коэффициенти D ҳәр бир барьерден өтиў коэффициентлерининн көбеймесине тең

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

$$=\exp\left[-\sum_i\frac{2\Delta x_i}{\hbar}\sqrt{2M(U(x_i)-E)}\right].$$

Бул аңлатпада Δx_i арқалы i - барьердиң кеңлиги, ал $U(x_i)$ арқалы оның бийиклиги белгиленген. Ең соңғы формулада $\Delta x_i\to 0$ шегинде суммалаўдан интегралллаўға өтемиз:

$$D=\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2M(U(x_i)-E)}\,dx\right].$$

Бул аңлатпада x_1 менен x_2 арқалы $U(x)=E$ теңлиги орынланатуғын координаталардың мәнислери белгиленген (5.4-сүўретке қараңыз).

Студентлердиң өз бетинше шешиуи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Қозғалысы $x>0$ болғанда $U(x)=0$, $x<0$ болғанда $U(x)=\infty$ өткермейтуғын дийўал арқалы шекленген еркин бөлекше ушын стационар ҳаллардың толқын функцияларын табыңыз.

2. $x<0$ болғанда $U(x)=0$ ҳәм $x>0$ болғанда $U(x)=\infty$ "потенциал текшеге"

ушып келетуғын бөлекше ушын шағылысыў ҳәм өтиў коэффициентлерин табыңыз. Бөлекшениң энергиясы $E > U_0$ шамасына тең.

3. Бийиклиги U_0, ени a шамасына тең туўры мүйешли потенциал барьер бар болған жағдайда бөлекше ушын өтиў коэффициентин табыңыз:

$x < 0$ ҳәм $x > a$ теңсизликлери орынланғанда $U(x) = 0$, $0 < x < a$ теңсизликлери орынланғанда $U(x) = \infty$.

Бөлекшениң энергиясы $E > U_0$ шамасына тең. Бөлекше берилген барьер арқалы шағылыспай өтетуғын жағдайдағы усы бөлекшениң энергиясын табыңыз.

4. Берилген энергияға ийе бөлекшениң күш орайына келип түскенде шағылысыў коэффициентиниң бөлекшениң қозғалыс бағытынан ғәрезсизлигин дәлиллеңиз.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын арналған мәселелердиң жуўаплары

1.

$$\psi(x) = \left(\frac{2M}{\pi^2\hbar^2 E}\right)^{\frac{1}{4}} \sin\left(\frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}x\right).$$

2.

$$R = \left(\frac{1-\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}}{1+\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}}\right)^2, \qquad D = 4\frac{\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}}{1+\sqrt{1-\frac{U_0}{E}}}.$$

3.

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2Ma^2} + U_0$$

теңлиги орынланғанда

$$D = \frac{1}{1+\frac{U_0^2\sin^2(ka)}{4E(E-U_0)}}, \qquad k = \frac{\sqrt{2M(E-U_0)}}{\hbar}.$$

6. Потенциал шуқырлардағы бөлекшелер

Бул ҳәм буннан кейинги параграфларда биз бөлекшениң спектри дискрет болған жағдайларды қараймыз. Бундай ҳалдың классикалық механикадағы аналоги финитлик қозғалыс болып табылады.

6.1-мәселе. Кеңлиги a шамасына тең бийиклиги шексиз болған потенциал шуқырда жайласқан бөлекшениң энергиясы менен меншикли функцияларын табыңыз:

$x < 0$ ҳәм $x > a$ теңсизликлери орынланғанда $U(x) = \infty$,

$0 < x < a$ теңсизликлери орынланғанда $U(x) = 0$.

Шешими. Потенциал шуқырдың ишинде ($0 < x < a$) Шредингер теңлемеси мынадай түрге ийе болады:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Оның шешимин

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

түринде жазамыз. Бул аңлатпада A менен B анықланыўы керек болған константалар.

Шексиз бийик потенциал дийўаллар ийтерисиў күшлериниң тәсиринде бөлекше $0 < x < a$ областынан шыға алмайтуғын ситуацияны моделлестиреди. Сонлықтан бөлекшениң толқын функциялары $x = 0$ ҳәм $x = a$ ноқатларында нолге айланады.

$$\psi(0) = 0$$

шәртинен $B = 0$ екенлиги, ал

$$\psi(a) = 0$$

шәртинен

$$\sin ka = 0$$

екенлигине ийе боламыз. Буннан

$$ka = \pi n, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

теңлигин аламыз.

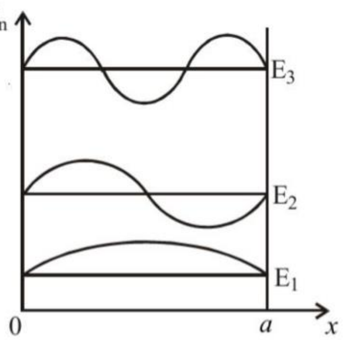
Бул жерде $n = 0$ мәниси таслап кетилген. Себеби бундай жағдайда бөлекшениң толқын функциясы нолге тең болады.

$$k^2 = 2mE/\hbar^2$$

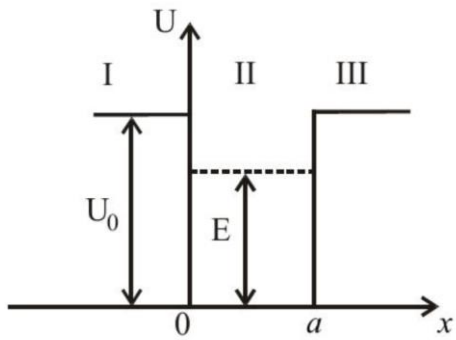
екенлигин есапқа алып бөлекшениң энергиясының меншикли мәнислерин табамыз:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma_2}.$$

Солай етип бөлекшениң энергиялық спектри дискрет екен. Энергияның қәддилериниң саны шексиз көп. Потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясын анықлайтуғын n санын квантлық саң ал усы квантлық санға сәйкес келиўши энергияның мәниси E_n ди "энергияның қәдди" деп атайды.



6.1-сүўрет.



6.2-сүўрет.

Бөлекшениң энергиясының мәниси ең киши болған ҳалын тийкарғы ҳал деп атайды. Бул мәселеде

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma_2}.$$

Басқа ҳаллардың барлығы да қозған ҳаллар деп аталады: $n = 2$ мәниси биринши қозған ҳалға, $n = 2$ екинши қозған ҳалға сәйкес келеди ҳ.т.б.

A коэффициентин анықлаў ушын дискрет спектр ушын нормаллаў шәртинен пайдаланамыз:

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2\left(\frac{\pi n}{a}x\right) dx = 1.$$

Буннан

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

аңлатпасын аламыз. Демек бөлекшениң нормалланған толқын функцияларын былайынша жазады екенбиз:

$$\psi_n = \sqrt{2/a}\sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right). \qquad (6.2)$$

Бул мәселедеги биринши үш ҳалға сәйкес келиўши толқын функциялары 6.1-сүўретте көрсетилген.

6.2-мәселе. Кеңлиги a ҳәм шексиз бийик дийўаллары бар потенциал шуқырда жайласқан бөлекшениң координатасы x пенен импульси p ның дисперсиясын табыңыз.

Шешими. Орташа мәнистиң анықламасын пайдаланып ҳәм шексиз терең потенциал шуқырдағы бөлекшениң толқын функциясының (6.2) түрине ийе болатуғынлығын есапқа алып төмендегилерге ийе боламыз:

$$\langle x\rangle = \langle\psi_n|x|\psi_n\rangle = \int_0^a \psi_n x\psi_n dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\left(\frac{\pi n}{a}x\right) dx = \frac{a}{2},$$

$$\langle x^2\rangle = \langle\psi_n|x^2|\psi_n\rangle = \int_0^a \psi_n x^2\psi_n dx = \frac{2}{a}\int_0^a x^2\sin^2\left(\frac{\pi n}{a}x\right) dx = \frac{a^3}{2} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2}.$$

Координатаның дисперсиясы:

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2}.$$

Енди

$$\langle p\rangle = \langle\psi_n|p|\psi_n\rangle = -i\hbar\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\frac{d}{dx}\left[\sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\right] dx = 0,$$

$$\langle p^2\rangle = \langle\psi_n|p^2|\psi_n\rangle = \hbar^2\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\frac{d^2}{dx^2}\left[\sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\right] dx = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2}$$

екенлигин табамыз ҳәм демек

$$\langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{a^2}.$$

6.3-мәселе. Бийиклиги шекли болған дийўалларға ийе потенциал шуқырдағы бөлекшениң байланысқан ҳалларының энергиясының меншикли мәнислерин табыңыз (6.2-сүўрет).

$x < 0$ ҳәм $x > a$ теңсизликлери орынлы болғанда $U(x) = U_0$.

$0 < x < a$ теңсизликлери орынланғанда $U(x) = 0$.

Шешими. Бөлекшениң байланысқан ҳалларының (дискрет спектрге ийе ҳаллардың) болыўы ушын усы бөлекшениң толық энергиясы U_0 ден киши болыўы керек.

Потенциалды сүўретте көрсетилгендей етип I, II ҳәм III арқалы белгиленген үш областқа бөлемиз. I, II ҳәм III областлардағы толқын функцияларын 1, 2 ҳәм 3 индекслери менен белгилеймиз. Ҳәр бир областъ ушын Шредингер теңлемеси төмендегидей түрлерге ийе:

I областъ ушын

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} - k_1^2\psi_1(x) = 0,$$

II областъ ушын

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

ҳәм III областъ ушын

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} - k_1^2\psi_3(x) = 0.$$

Бул аңлатпаларда

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

Бул теңлемелердиң шешимлери болған бөлекшениң толқын функцияларын былайынша жазамыз:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} + B_1 e^{-k_1 x},$$
$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-i2x},$$
$$\psi_3(x) = A_3 e^{k_1 x} + B_3 e^{-k_1 x}.$$

Толқын функциялары шекли болатуғын болғанлықтан $B_1 = 0$ ҳәм $A_3 = 0$ болатуғынлығын күтиў керек. Ҳақыйқатында да I областта $x \to -\infty$ шегинде $B_1 e^{-k_1 x}$ ағзасы шексиз үлкейеди, ал III областта $x \to +\infty$ шегинде $A_3 e^{k_1 x}$ шексизликке умтылады.

Буннан кейин I ҳәм II, II ҳәм III областлардың шегараларындағы (яғный x = 0 ҳәм $x = a$ теңликлери орынланғандағы) толқын функциясының ҳәм оның биринши туўындысының үзликсизлигинен пайдаланамыз. Бул шәртлерди жазамыз:

$$\psi_1\rfloor_{x=0} = \psi_2\rfloor_{x=0}, \qquad \psi_1'\rfloor_{x=0} = \psi_1'\rfloor_{x=0},$$
$$\psi_2\rfloor_{x=a} = \psi_3\rfloor_{x=a}, \qquad \psi_2'\rfloor_{x=a} = \psi_3'\rfloor_{x=a}$$

ямаса

$$A_1 = A_2 + B_2, \tag{6.3}$$
$$k_1 A_1 = ik_2 A_2 - ik_2 B_2, \tag{6.4}$$
$$A_2 e^{ik_2 a} + B_2 e^{-ik_2 a} = B_3 e^{-k_1 a}, \tag{6.5}$$
$$ik_2 A_2 e^{ik_2 a} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 a} = -k_1 B_3 e^{-k_1 a}. \tag{6.6}$$

(6.3) пенен (6.4) тен мынаны аламыз:

$$B_2 = \frac{ik_2 - k_1}{ik_2 + k_1} A_2. \tag{6.7}$$

Екинши тәрептен (6.5)- ҳәм (6.6)-теңлемелер мынаған алып келеди:

$$B_2 = \frac{ik_2 + k_1}{ik_2 - k_1} e^{2ik_2 a} A_2. \tag{6.8}$$

(6.7)- ҳәм (6.8)-теңлемелердиң оң бөлимлерин теңлестирип

$$\frac{ik_2 - k_1}{ik_2 + k_1} = \frac{ik_2 + k_1}{ik_2 - k_1} e^{2ik_2 a}$$

ямаса

$$\frac{ik_2 - k_1}{ik_2 + k_1} e^{-ik_2 a} = \frac{ik_2 + k_1}{ik_2 - k_1} e^{ik_2 a}$$

аңлатпасын аламыз. Буннан кейин әпиўайы алгебралық түрлендириўлерден кейин

$$tg(k_2 a) = -\frac{2k_1 k_2}{k_1^2 - k_2^2} \tag{6.9}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Егер ҳәм шамалары ушын киргизилген белгилеўлерди есапқа алсақ (6.9)-қатнас мына түрге енеди:

$$tg\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a\right) = -\frac{2\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0 - 2E}.$$

Бул теңлемеден системаның энергия E ниң мәнислери анықланады. Бул теңлеме трансцендент теңлеме болып табылады. Оның шешимин әдетте графикалық жоллар менен табады. Буның ушын (6.9)-теңлемеден пайдаланған қолайлы. Тригонометриялық формуланы пайдаланып (6.9)-аңлатпаның шеп тәрепин былайынша жазамыз:

$$tg(k_2 a) = \frac{2tg\left(\frac{k_2 a}{2}\right)}{1 + tg^2\left(\frac{k_2 a}{2}\right)}.$$

Енди (6.9)-теңлемени $tg\left(\frac{k_2 a}{2}\right)$ шамасына қарата шешип, төмендлегидей еки шешим табамыз:

$$tg\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = \frac{k_1}{k_2}, \tag{6.10}$$

$$ctg\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = -\frac{k_1}{k_2}. \tag{6.11}$$

Буннан кейин

$$\cos\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = \pm\frac{1}{\sqrt{1 + tg^2\ \left(\frac{k_2 a}{2}\right)}} = \pm\frac{k_2}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} = \pm\sqrt{\frac{2\hbar^2}{mU_0 a^2}}\frac{k_2 a}{2},$$

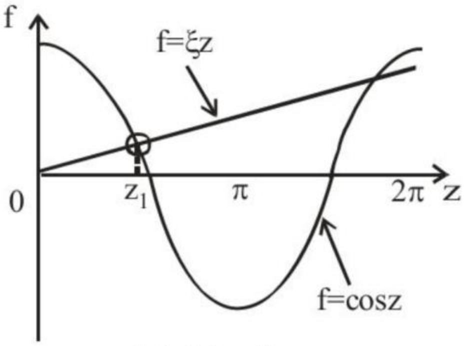
$$\sin\left(\frac{k_2 a}{2}\right) = \pm\frac{1}{\sqrt{1 + ctg^2\ \left(\frac{k_2 a}{2}\right)}} = \pm\frac{k_2}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} = \pm\sqrt{\frac{2\hbar^2}{mU_0 a^2}}\frac{k_2 a}{2}$$

теңликлеринен пайдаланамыз ҳәм $\xi = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{mU_0 a^2}}$ менен $z = \frac{k_2 a}{2}$ белгилеўлерин киргиземиз. Нәтийжеде (6.10)- ҳәм (6.11)-аңлатпалардан мынадай теңликлерди аламыз:

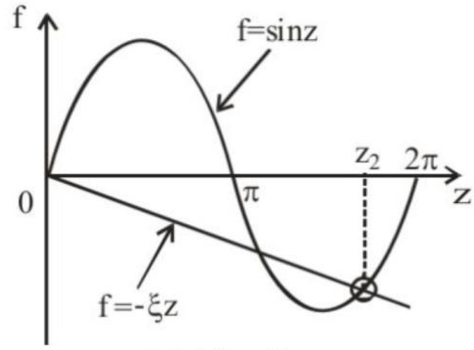
$$\cos z = \pm\xi z, \tag{6.12}$$

$$\sin z = \pm\,\xi z. \tag{6.13}$$

(6.10)- менен (6.11)-аңлатпалар бойынша биринши теңлемениң түбирлери $tgz > 0$ теңсизлиги орынланатуғын областта, ал екинши теңлемениң түбирлери $tgz > 0$ теңсизлиги орынланатуғын областта алыныўы керек. (6.12)- ҳәм (6.13)-теңлемелердиң областындағы графикалық шешимлери сәйкес 6.3-(а) ҳәм 6.3-(б) сүўретлерде көрсетилген. Тақ қәддилер (биринши, үшинши, бесинши ҳәм басқалар) (6.12)-теңлемениң, ал жуп қәддилер (екинши, төртинши ҳәм басқалар) (6.13)-теңлемениң жәрдеминде анықланады. 6.3-(а) сүўретте көринип турғанындай, бир өлшемли жағдайда (шуқырдың қәлеген параметринде - кеңлигинде ҳәм тереңлигинде) ең кеминде бир энергия қәдди болады (бир шешим). Усының менен бирге ($\xi \neq 0$ болған жағдайда) қәддилер саны шекли.



6.3-(а) сүўрет.



6.3-(б) сүўрет.

Егер z_n (n=1, 2, 3, ...) шамалары (6.12)- ҳәм (6.13)-теңлемелердиң түбирлери болып табылатуғын болса, онда биз киргизген белгилеўлерге сәйкес энергияның меншикли мәнислери шамасына тең болады.

$$E_n = \frac{2\hbar^2 z_n^2}{ma^2}.$$

Методикалық көрсетпе:

$x < 0$ ҳәм $x > a$ болғанда $U(x) = 0$,

$0 < x < a$ болғанда $U(x) = U_0$

бир өлшемли потенциал шуқыр $\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} \ll 1$ шәрти орынланғанда $U(x) = -\gamma\delta(x)$ түриндеги δ-шуқырдың жәрдеминде аппроксимаңияланады. Бул аңлатпада

$$-\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} U(x)dx < 0.$$

6.4-мәселе. δ-тәризли $U(x) = -\gamma\delta(x)$ потенциал шуқырдағы бөлекше ушын байланысқан ҳал энергиясын ҳәм сәйкес толқын функциясын табыңыз.

Шешими: Бизди байланысқан ҳал кызықтыратуғын болғанлықтан бөлекшениң толық энергиясы нолден киши болыўы керек. Бундай жағдайда бөлекше ушын

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(-|E| + \gamma\delta(x))\psi = 0 \qquad (6.14)$$

Шредингер теңлемеси $x = 0$ ноқатынан басқа барлық орынларда

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - k^2\psi = 0 \qquad (6.25)$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада

$$k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}.$$

(6.5)-теңлемениң шешими

$$\psi = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

түринде жазылады.

Толқын функциясының шекли болыўы ушын $x > 0$ областында $A = 0$, ал $x < 0$ областында $B = 0$ теңликлериниң орынланыўы керек. Солай етип

$x > 0$ теңсизлиги орынланғанда $\psi = Be^{-kx}$ ҳәм $x < 0$ теңсизлиги орынланғанда $\psi = Ae^{kx}$ толқын функцияларына ийе боламыз.

Толқын функциясының үзликсизлиги $x = 0$ ноқатында

$$\psi(+0) = \psi(-0)$$

шәртине алып келеди ҳәм буннан

$$A = B \tag{6.16}$$

теңлигиниң орынлы екенлигине ийе боламыз. Бирақ толқын функциясының биринши туўындысы $\frac{d\psi(x)}{dx} \equiv \psi'(x)$ үзликсиз бола алмайды, себеби $x = 0$ ноқатында энергия шексизликке айланады (5-параграфты қараңыз). Толқын функциясының биринши туўындысына қойылатуғын шәртти табыў ушын $x = 0$ ноқатының ε-әтирапы бойынша (6-14)-аңлатпаны интеграллаймыз ҳәм ε шамасын нолге умтылдырамыз ($\varepsilon \to 0$). Нәтийжеде

$$\psi'^{(+0)} = \psi'(-0) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$$

ямаса

$$-kA - kB = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}A$$

аңлатпасына ийе боламыз. Буннан (6.16)-аңлатпаны есапқа алып мынаны аламыз:

$$k = \frac{m\gamma}{\hbar^2},$$

демек

$$E = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$$

аңлатпасы алынады екен.

Солай етип δ тәризли потенциал шуқырда тек бир (бирден артық емес) энергияның қәдди болады екен.

$x > 0$ областта да, $x < 0$ областта да орынлы болған толқын функция ушын аңлатпа мына түрге ийе болады:

$$\psi = Ae^{-k|x|}.$$

A коэффициентин табыў ушын нормировка шәртинен пайдаланамыз:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-2k|x|}dx = 1$$

ҳәм

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-2k|x|}dx = |A|^2\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{2k|x|}\,dx + \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2k|x|}\,dx\right) = \frac{|A|^2}{k}$$

теңликлери орынланғанлықтан

$$A = k$$

теңлигин аламыз. Демек бөлекшениң толқын функциясы былайынша жазылады екен:

$$\psi = \sqrt{k}e^{-k|x|} = \sqrt{\frac{m\gamma}{\hbar}}\exp\left(\frac{m\gamma}{\hbar^2}|x|\right).$$

Методикалық көрсетпе: Егер системаның потенциал энергиясы ҳәр бири координаталардың биринен ғәрезли болған функциялардың қосындысына тең болатуғың яғный

$$U(x, y, z) = U(x) + U(y) + U(z)$$

болған жағдайдағы системаның кеңисликтеги қозғалысы ҳаққындағы мәселе де бир өлшемли мәселелер қатарына киреди. Бундай жағдайда энергияның меншикли мәнислери ҳәр бир координата бойынша алынған шамаларының қосындысынан турады:

$$E = E_x + E_y + E_z, \tag{6.17}$$

ал системаның толқын функциясы $\psi(x), \psi(y), \psi(z)$ бир өлшемли толқын функцияларының көбеймесинен турады:

$$\psi = \psi(x)\psi(y)\psi(z). \tag{6.18}$$

Бул қәсийеттиң дискрет спектр ушын да, узликсиз спектр ушын да орынлы екенлигин атап өтемиз.

6.5-мәселе. Дийўаллары шексиз бийик болған уш өлшемли потенциал шуқырдағы бөлекшениң энергиясының меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын табыңыз $0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c$ болғанда $U = 0$ ҳәм бул областтан тыста $U = \infty$).

Шешими: (6.1)- ҳәм (6.2)-формулаларға сәйкес

$$E_x \equiv E_{n_1} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_1^2}{2ma^2}, E_y \equiv E_{n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_2^2}{2mb^2}, E_z \equiv E_{n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_3^2}{2mc^2},$$

$$\psi_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi n_1}{a}x\right), \psi_{n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{\pi n_2}{b}y\right),$$

$$\psi_{n_3}(z) = \sqrt{\frac{2}{c}}\sin\left(\frac{\pi n_3}{c}z\right).$$

(6.17)- ҳәм (6.18)-аңлатпаларды пайдаланып системаның энергиясының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын табамыз:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right),$$

$$\psi_{n_1,n_2,n_3} = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z) =$$

$$= \sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\left(\frac{\pi n_1}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi n_2}{b}y\right)\sin\left(\frac{\pi n_3}{c}z\right).$$

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Бир өлшемли қозғалыста дискрет спектрдиң ҳалының азғынбағын екенлигин дәлиллеңиз.

2. Егер дискрет спектрге ийе системаның гамильтонианы

$$\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$$

шәртин қанаатландыратуғын болса, онда системаның толқын функциясы белгили жуплыққа ийе болатуғынлығын, яғный тек жуп ямаса тек тақ болатуғынлығын дәлиллеңиз.

3. Бөлекше шекли бийикликке ийе дийўалларға ийе потенциал шуқырда жайласқан:

$x < 0$ ҳәм $x > a$ областларында $U(x) = U_0$,

$0 < x < a$ областында $U(x) = 0$.

Биринши уш энергия қәдди ушын бөлекшениң $\psi(x)$ толқын функцияларын ҳәм итималлықлардың тығызлығы $|\psi(x)|^2$ шамасының тарқалыўын табыңыз.

4. Бөлекше

$x < 0$ областында $U(x) = \infty$,

$0 < x < a$ областында $U(x) = 0$,

$x > a$ областында $U(x) = U_0$

шәртлери орынланатуғын потенциал майданда жайласқан. Бөлекшениң байланысқан ҳалларының энергияларының мәнислерин табыңыз.

5. δ түриндеги $U(x) = -\gamma\delta(x)$ $(\gamma > 0)$ потенциал шуқырда жайласқан бөлекше ушын потенциал ҳәм кинетикалық энергиялардың мәнислерин табыңыз.

6. Бөлекше

$x < 0$ ҳәм $x > a$ областларында $U(x) = \infty$,

$0 < x < a$ областында $U(x) = -\gamma\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)$

потенциалда жайласқан. Потенциал шуқырдың a кеңлигиниң қандай мәнислеринде энергиясын $E < 0$ болған байланысқан ҳалдың болмайтуғынлығын (яғный δ тәризли шуқырда энергия қәдди болмайтуғынлығын) табыңыз.

7. а) еки өлшемли квадрат, б) үш өлшемли кублық потенциал шуқырда жайласқан бөлекше ушын 5-квантлық қәддиниң азғыныў еселигин табыңыз.

8. Бөлекше абсолют өткермейтуғын ($0 < x < a$, $0 < y < a$ областында $U = 0$, бул областтан тысты $U = \infty$) дийўаллары бар еки өлшемли квадрат потенциал шуқырда екинши азғынған ҳалда тур. $0 < x < \frac{a}{3}, 0 < y < \frac{a}{3}$ областында бөлекшени табыўдың итималлығы P ны табыңыз.

Өз бетинше шешиу ушын усынылған мәселелердиң жуўаплары

4.

$$E_n = \frac{\hbar^2 z_n^2}{2m}, n = 0, 1, 2, \ldots$$

Бул аңлатпада z_n арқалы теңлемениң түбири белгиленген.

$$tg\ (za) = -\frac{z}{\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - z^2}}.$$

5.

$$\langle U \rangle = -\frac{m\gamma^2}{\hbar^2}, \langle T \rangle = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}.$$

6.

$$\beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2}\ th\left(\sqrt{\frac{\beta\alpha}{2}}\right), \beta = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}(\alpha\delta)\left(x - \frac{a}{2}\right) - |E|}.$$

7. а) $k = 2$;б) $k = 1$.

8. $P = \left(\frac{1}{3} + \frac{\sqrt{3}}{8\pi}\right)^2$.

7. Гармоникалық осциллятор

Методикалық көрсетпелер: Гармоникалық осциллятор деп массасы m болған ҳәм

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

потенциал майданында бир өлшемли қозғалатуғын бөлекшеге айтады. Бул аңлатпада k арқалы квазисерпимли күш коэффициенти белгиленген. $\omega = \sqrt{k/m}$ шамасы осциллятордың меншикли жийилиги деп аталады.

Көпшилик жағдайларда бир өлшемли киши амплитуда менен тербелетуғын бөлекшени сызықлы гармоникалық осциллятор деп атайды. Бундай бөлекшениң потенциаллық энергиясы $m\omega^2 x^2/2$ шамасына тең. Бул аңлатпадағы ω шамасын классикалық механикада тербелислердиң меншикли жийилиги деп атайды. Усыған сәйкес осциллятордың гамильтонианы

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

түринде жазылады. Потенциаллық энергия $x = \pm\infty$ шеклеринде шексизликке айланатуғын болғанлықтан бөлекшениң қозғалысы тек финитлик болып табылады. Усыған байланыслы осциллятордың энергия спектри дискрет болады.

Гармоникалық осциллятордың энергия қәддилери Шредингер тәрепинен толқынлық теңлеме ашылмастан бурын 1925-жылы матрицалық усылдың жәрдеминде Гейзенберг тәрепинен табылды.

7.1-мәселе. Гармоникалық осциллятордың энергиясынын меншикли мәнислерин ҳәм толқын функцияларын табыңыз.

Шешими. x координатасы $\pm$ шексизликке умтылғанда (яғный $x \to \pm\infty$ шеклеринде) потенциал энергия шексизликке айланатуғын болғанлықтан бөлекшениң қозғалысы финитлик ҳәм сонлықтан осциллятордың энергиялық спектри дискрет болады.

Бул жағдайда Шредингер теңлемеси былайынша жазылады:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi = 0$$

x координатасынын орнына өлшем бирлиги жоқ

$$\xi = x/x_0 \qquad (7.1)$$

шамасын киргиземиз. Бул аңлатпада x_0 арқалы координатанын масштабын беретуғын базы бир шама белгиленген[2].

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \qquad (7.2)$$

Нәтийжеде төмендегидей дифференциаллық теңлемеге ийе боламыз:

[2] x_0 шамасы осциллятордың тийкарғы ҳалы ушын классикалық шегара мәнисине ийе.

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-\xi^2\right)\psi=0. \qquad (7.3)$$

ξ ($\xi\to\pm\infty$) шамасының үлкен мәнислери ушын $e^{\pm\xi^2/2}$ функциясы бул теңлемениң асимптотикалық шешимлери болып табылады. Бунының дурыслығына орнына қойыў жолы менен исениўге болады. Ҳақыйқатында да

$$\frac{d^2\left(e^{\pm\xi^2/2}\right)}{d\xi^2}=(\xi^2+1)e^{\pm\xi^2/2}\approx\xi^2e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}.$$

Бул жерде биз $\xi\to\pm\infty$ шегинде $\xi^2\gg1$ екенлигин есапқа алдық. Енди (7.3)-аңлатпада ξ^2 ағзасына салыстырғанда $2E/\hbar\omega$ ағзасын есапқа алмасақ, онда

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\left(\frac{2E}{\hbar\omega}-\xi^2\right)\psi\approx\xi^2e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}-\xi^2e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}=0$$

теңлигин аламыз.

Бизди тек шекли шешимлер қызықтыратуғын болғанлықтан плюс белгиси бар дәрежеге ийе экспонентаны таслап кетиўге болады. Сонлықтан (7.3)-теңлемениң шешими $\xi\to\pm\infty$ шегинде $e^{-\xi^2/2}$ функциясындай болып өзгереди. Усыған байланыслы ықтыярлы ξ лар ушын шешимди

$$\psi=e^{-\frac{\xi^2}{2}}f(\xi) \qquad (7.4)$$

түринде излейди екенбиз.

(7.4)-аңлатпаны (7.3)-аңлатпаға қойып

$$\frac{d^2f(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{df(\xi)}{d\xi}+\lambda f(\xi)=0 \qquad (7.5)$$

теңлемесин аламыз. Бул теңлемеде

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}-1 \qquad ()$$

белгилеўи қолланылған.

ψ функциясының шеклилиги талабынан ξ шамасының барлық шекли мәнислеринде $f(\xi)$ функциясынын шекли болыўынын кереклиги келип шығады. Бөлекшенин қозғалысы финитлик болғанлықтан шексизликте (7.4) толқын функциясы нолге айланыўы керек. Бундай шәртлерди қанаатландыратуғын (7.5)-теңлеменин шешимлери тек (4-қосымшаға қараңыз)

$$\lambda=2n,\qquad n=0,1,2,\ldots$$

теңлиги орынланған жағдайда ғана орын алады. (7.6)-аңлатпадан бундай жағдайда энергиянын меншикли мәнислериниң

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad n=0,1,2,\ldots \qquad (7.7)$$

шамаларына тең екенлигин көремиз.

Гармоникалық осциллятордың энергиясының қәддилери эквидистантлы, яғный қәлеген қоңсылас қәддилер арасындағы қашықлық турақлы ҳәм

$$\Delta E=E_{n-1}-E_n=\hbar\omega$$

шамасына тең.

Квантлық осциллятордың классикалық осциллятордан төмендегидей айырмашылықларын атап өтиў мүмкин:

1. Квантлық осциллятордың энергия спектри дискрет, яғный квант осцилляторы классикалық осциллятордай болып энергияның қәлеген мәнисине ийе бола

алмайды;

2. Квантлық осциллятордың тийкарғы ҳалының энергиясы нолге тең емес ҳәм $\hbar\omega/2$ шамасына тең;

3. Классикалық осциллятордың энергиясы тербелистиң амплитудасынан ғәрезли, ал квант осцилляторының энергиясы жийиликке байланыслы. Квантлық осциллятордың амплитудасы пүткиллей анықланбаған.

(7.5)-теңлемениң меншикли функциялары (Қ4.12)-формула менен анықланатуғын Эрмит полиномлары болып табылады:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

(7.4)-аңлатпаға сәйкес осциллятордың меншикли функциялары

$$\psi_n = C_n e^{-\xi^2} H_n(\xi) \tag{7.8}$$

түрине ийе болады. Бул аңлатпада C_n арқалы нормировкалаўшы турақлылар белгиленген.

(7.8)-аңлатпа өлшем бирлиги жоқ шамаларындажазылған. x өзгериўшилерине қайтып келиў барысында

$$\psi_n = C_n e^{\frac{-x^2}{2x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

екенлигин табамыз.

Гармоникалық осциллятордың спектри дискрет болғанлықтан ψ_n меншикли функциялары 1 ге нормировкаланған болыўы керек, яғный

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |C_n|^2 \, e^{\frac{-x^2}{2x_0^2}} \left(H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)\right)^2 dx = 1.$$

(Қ4.14)-аңлатпаны пайдаланып

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \, x_0\sqrt{\pi}}}$$

екенлигине исенемиз.

Солай етип гармоникалық осциллятордың толқын функциялары былайынша жазылады екен:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \, x_0\sqrt{\pi}}} e^{\frac{-x^2}{2x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right).$$

Энергия E_n ниң ҳәр бир мәнисине тек бир ψ_n толқын функциясы сәйкес келетуғын болғанлықтан, осциллятордың энергия қәддилери азғынбаған деп жуўмақ шығарамыз.

7.2-мәселе. Тегис изотроп осциллятордың энергия қәддилери менен толқын функцияларын табыңыз.

Тегис изотроп осциллятор деп

$$U(x, y) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$$

потенциал майданында қозғалатуғын бөлекшеге айтамыз. Энергия қәддилериниң азғыныў еселигин табыңыз.

Шешими. Потенциал энергия ҳәр қайсысы тек координаталардың биреўинен ғәрезли болған функциялардың суммасынан туратуғын болғанлықтан, яғный түрине ийе болғанлықтан

$$U(x, y) = U(x) + U(y)$$

түрине ийе болғанлықтан, бул аңлатпада

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \text{ ҳәм } U(y) = \frac{m\omega^2 y^2}{2}.$$

Энергияның меншикли мәнислери E_{n_1} ҳәм E_{n_2} меншикли мәнислериниң қосындысынан турады (E_{n_1}ҳәм E_{n_2} арқалы x ҳәм y координаталары бойынша алынған потенциал энергиялар белгиленген). Ал толқын функциялары болса $\psi(x)$ ҳәм $\psi(y)$ толқын функцияларының көбеймесине тең (бул ҳаққында 6-параграфта гәп етилди).

7.1-мәселениң нәтийжелерин пайдаланып мыналарды жаза аламыз:

$$E_{n_1} = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right), \qquad E_{n_2} = \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right), n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi_{n_1}(x) = \frac{1}{\sqrt{e^{n_1} n_1!\, x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_{n_1}\left(\frac{x}{x_0}\right),$$

$$\psi_{n_2}(y) = \frac{1}{\sqrt{e^{n_2} n_2!\, x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{y^2}{2x_0^2}} H_{n_2}\left(\frac{y}{x_0}\right).$$

Бундай жағдайда тегис изотроп осциллятордың энергиясы мыналарға тең болады:

$$E_N = E_{n_1} + E_{n_2} = \hbar\omega(N + 1), N = n_1 + n_2,$$

ал оның толқын функциялары болса

$$\psi_{n_1,n_2}(x, y) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y) =$$

$$= \frac{1}{x_0\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^{n_1+n_2} n_1!\, n_2!}} e^{-\frac{x^2+y^2}{2x_0^2}} H_{n_1}\left(\frac{x}{x_0}\right) H_{n_2}\left(\frac{y}{x_0}\right).$$

N шамасының берилген мәнисине сәйкес келиўши E_N қәддине $N + 1$ дана ғәрезсиз ψ_{n_1,n_2} функциялары сәйкес келеди (бул жағдайда $n_1 = 0, 1, 2, \dots, N$, $n_2 = 0, 1, 2, \dots, N - n_1$. Сонлықтан E_N қәдди $N + 1$ есе азғынған болып шығады.

Базы бир методикалық көрсетпелер:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} + i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right) \tag{7.9}$$

операторын ҳәм оған эрмитлик-түйинлес болған

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right) \tag{7.10}$$

еки операторын киргиземиз. Бул аңлатпаларда[3]

$$p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}. \tag{7.11}$$

[3] Гармоникалық осциллятор ҳаққындағы классикалық мәселедеги x_0 шамасы сыяқлы p_0 шамасы $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ энергияға ийе ҳал ушын импулстиң максималлық мәниси болып табылады.

$\hat{a}$ операторын төменлетиў операторы, ал $\hat{a}^+$ операторын жоқарылатыў операторы деп атайды. Гейпара жағдайларда еки операторды да баспалдақ операторлар деп атайды.

7.3-мәселе. Төменлетиў операторы $\hat{a}$ ҳәм жоқарылатыў операторы $\hat{a}^+$ арқалы гармоникалық осциллятордың гамильтонианын аңлатыңыз.

Шешими: $x_0 p_0 = \hbar$ екенлигин атап өтемиз. $\hat{a}^+\hat{a}$ көбеймесин қараймыз:

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{x_0^2} + \frac{\hat{p}_x^2}{p_0^2} + \frac{i}{\hbar}(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\right).$$

Коммутатор $[x\hat{p}_x] = x\hat{p}_x - \hat{p}_x x = i\hbar$ болғанлықтан (1.6)-мәселеге қараңыз) $\hat{a}^+\hat{a}$ көбеймеси ушын

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{x_0^2} + \frac{\hat{p}_x^2}{p_0^2} + 1\right)$$

аңлатпасын жазыў мүмкин ямаса x_0 менен p_0 шамалары ушын(7.2)-ҳәм (7.11)-анық аңлатпаларын пайдаланып, мынаны аламыз:

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right) - \frac{1}{2}.$$

Алынған аңлатпаның әпиўайы қаўсырмасының ишинде гармоникалық осциллятордың Гамильтон операторы $\widehat{H}$ турыпты. Бул $\widehat{H}$ операторын $\hat{a}^+\hat{a}$ арқалы аңлатып

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{7.12}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

7.4-мәселе.

$$\hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}, \hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$$

қатнасларының дурыс екенлигин дәлиллеңиз. Бул қатнасларда ψ_n арқалы гармоникалық осциллятордың толқын функциялары белгиленген.

Шешими: (7.1)-формулаға сәйкес x координатасының орнына f шамасын, ал p_0 шамасын (7.11)-аңлатпа арқалы аңлатамыз. Бундай жағдайда жоқарылатыў ҳәм төменлетиў операторларын былайынша жазамыз:

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right), \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right).$$

Енди (Қ4.12)-аңлатпаны пайдаланып (7.8)-функцияларды анық түрде жазамыз:

$$\psi_n = (-1)^n C_n e^{\xi^2/2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \tag{7.13}$$

$\hat{a}^+$ операторы менен (7.13)-функцияға тәсир етемиз ҳәм мынаған ийе боламыз:

$$\hat{a}^+\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\psi_n =$$

$$= (-1)^n\frac{C_n}{\sqrt{2}}\left[\xi e^{\frac{\xi^2}{2}}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} - \frac{d}{d\xi}\left(e^{\frac{\xi^2}{2}}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}\right)\right] =$$

$$= (-1)^n \frac{C_n}{\sqrt{2}} \left[-e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \right] =$$
$$= (-1)^{n+1} \frac{C_n}{\sqrt{2}} - e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}.$$

7.1-мəселеге муўапық
$$\frac{C_{n+1}}{C_n} = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}.$$

Усы катнасты есапқа алып мынаны жазамыз:
$$\hat{a}^+ \psi_n = \sqrt{n+1} (-1)^{n+1} C_{n+1} e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^{n+1} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n+1}} =$$
$$= \sqrt{n+1} \psi_{n+1}.$$

Солай етип биринши қатнас дəлилленди.

Екинши қатнасты дəлиллеў ушын (7.13)-аңлатпадағы ψ_n функциясына төменлетиў операторы $\hat{a}$ менентəсир етемиз:
$$\hat{a}\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_n =$$
$$= (-1)^n \frac{C_n}{\sqrt{2}} \left[\xi e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} + \frac{d}{d\xi} \left(e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \right) \right] =$$
$$= (-1)^n \frac{C_n}{\sqrt{2}} \left[2\xi e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} + e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(\frac{d e^{-\xi^2}}{d\xi} \right) \right] =$$
$$= (-1)^n \frac{C_n}{\sqrt{2}} \left[2\xi e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} - 2 e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(\xi e^{-\xi^2} \right) \right] =$$
$$= (-1)^{n-1} \sqrt{2} C_n n e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} \left(\xi e^{-\xi^2} \right).$$

Бул дизбектиң ең кейинги теңлигинде
$$\frac{d^n}{d\xi^n} \left(\xi e^{-\xi^2} \right) = \xi \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} + n \frac{d\xi}{d\xi} \frac{d^{n-1} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-1}} + \frac{n(n-1)}{2!} \frac{d^2\xi}{d\xi^2} \frac{d^{n-2} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-2}} +$$
$$+ \frac{n(n-1)(n-2)}{3!} \frac{d^3\xi}{d\xi^3} \frac{d^{n-3} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-3}} + \cdots +$$
$$+ e^{-\xi^2} \frac{d^n \xi}{d\xi^n} = \xi \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} + n \frac{d^{n-1} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-1}}$$

екенлигин биз есапқа алдық.
$$\frac{C_{n-1}}{C_n} = \sqrt{2n}$$

болғанлықтан биз
$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n} (-1)^{n-1} C_{n-1} e^{\xi^2/2} \frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} \left(\xi e^{-\xi^2} \right) = \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

екенлигин аңсат табамыз. Усының менен екинши қатнас та дəлилленди.

7.5-мəселе. $\hat{a}$ ҳəм $\hat{a}^+$ операторларының жəрдеминде гармоникалық осциллятордың меншикли мəнислерин ҳəм меншикли функцияларын табыңыз.

Шешими. Гармоникалық осциллятор ушын Шредингердиң стационар теңлемеси

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{7.14}$$

турине ийе. (7.12)-аңлатпаны пайдаланып Шредингер теңлемесин былайынша жазамыз:

$$\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\psi_n = E_n\psi_n.$$

Бул теңлемениң еки тәрепин де ψ_n^* ға көбейтемиз ҳәм гармоникалық осциллятордың x координатасының өзгериўиниң барлық областы бойынша интеграллаймыз:

$$\left\langle\psi_n\right|\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\left|\psi_n\right\rangle = \langle\psi_n|E_n|\psi_n\rangle \tag{7.15}$$

Гармоникалық осциллятордың толқын функцияларын 1 ге нормировкалаў шәрти болған $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$ шәртинен (7.15)-теңлемениң оң тәрепин табамыз:

$$\langle\psi_n|E_n|\psi_n\rangle = E_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle = E_n.$$

Енди (7.15)-теңлемениң шеп тәрепин жазамыз:

$$\left\langle\psi_n\right|\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\left|\psi_n\right\rangle = \hbar\omega\langle\psi_n|\hat{a}^+\hat{a}|\psi_n\rangle + \frac{1}{2}\langle\psi_n|\psi_n\rangle =$$

$$= \hbar\omega\sqrt{n}\langle\psi_n|\hat{a}^+|\psi_{n-1}\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} =$$

$$= \hbar\omega n\langle\psi_n|\psi_n\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Солай етип гармоникалық осциллятордың энергиясы мынаған тең екен:

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

Гармоникалық осциллятордың толқын функцияларын табыў ушын $\hat{a}$ операторы менен тийкарғы ҳалдың толқын функциясы ψ_0 ге тәсир етемиз. Энергиясы тийкарғы ҳалдың энергиясынан киши болған ҳаллар болмайтуғын болғанлықтан (басқа сөз бенен айтқанда терис мәнисли n ге ийе ψ_n толқын функциялары болмайды)

$$\hat{a}\psi_0 = 0$$

ямаса

$$\left(\frac{x}{x_0} + i\frac{\hat{p}_x}{p_0}\right)\psi_0 = 0. \tag{7.16}$$

$\hat{p}_x$ операторының анық түрин есапқа алып (7.16)-аңлатпаны

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{x}{x_0^2}\psi_0$$

түринде жазамыз. Бул теңлемени интеграллап тийкарғы ҳал ушын толқын функциясын табамыз:

$$\psi_0 = C_0 \exp\left(-\frac{x}{2x_0^2}\right).$$

Бул аңлатпадағы C_0 константасы нормировка шәртинен табылады.

Буннан кейин

$$\hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$$

теңлиги орыналатуғын болғанлықтан $\hat{a}^+$ операторы менен ψ_0 функциясына n рет тәсир етип толқын функциясын анықлаймыз.

7.6-мәселе. Координата операторы ушын тек

$$\langle\psi_{n+1}|x|\psi_n\rangle = x_0\sqrt{\frac{n+1}{2}} \text{ ҳәм } \langle\psi_{n-1}|x|\psi_n\rangle = x_0\sqrt{\frac{n}{2}}. \tag{7.17}$$

$$\langle\psi_{n+1}|\hat{p}_x|\psi_n\rangle = ip_0\sqrt{\frac{n+1}{2}} \text{ ҳәм } \langle\psi_{n-1}|\hat{p}_x|\psi_n\rangle = -ip_0\sqrt{\frac{n}{2}}. \tag{7.18}$$

интеградларының нолге тең болмайтуғынлығын дәлиллеңиз. Бул аңлатпаларда ψ_n арқалы гармоникалық осциллятордың толқын функциялары белгиленген.

Шешими: (7.9)- ҳәм (7.10)-формулалардан

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a}) \tag{7.19}$$

екенлигин табамыз.

$$\langle\psi_k|x|\psi_n\rangle$$

интегралын қараймыз. (7.19)-аңлатпаны пайдаланып мынаған ийе боламыз:

$$\langle\psi_k|x|\psi_n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle\psi_k|\hat{a}^+ + \hat{a}|\psi_n\rangle =$$

$$= \frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle\psi_k|\hat{a}^+|\psi_n\rangle + \frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle\psi_k|\hat{a}|\psi_n\rangle =$$

$$= x_0\sqrt{\frac{n+1}{n}}\langle\psi_k|\psi_{n+1}\rangle + x_0\sqrt{\frac{n}{n}}\langle\psi_k|\psi_{n-1}\rangle =$$

$$= x_0\sqrt{\frac{n+1}{n}}\delta_{k,n+1} + x_0\sqrt{\frac{n}{n}}\delta_{k,n-1},$$

ал буннан (7.17)-аңлатпа келип шығады.

Тап сондай жоллар менен

$$\hat{p}_x = \frac{ip_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a})$$

теңлигине ийе боламыз. Демек:

$$\langle\psi_k|\hat{p}_x|\psi_n\rangle = \frac{ip_0}{\sqrt{2}}\langle\psi_k|\hat{a}^+ - \hat{a}|\psi_n\rangle =$$

$$= \frac{ip_0}{\sqrt{2}}\langle\psi_k|\hat{a}^+|\psi_n\rangle - \frac{ip_0}{\sqrt{2}}\langle\psi_k|\hat{a}|\psi_n\rangle =$$

$$= ip_0\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{k,n+1} + ip_0\sqrt{\frac{n}{n}}\delta_{k,n-1},$$

ал бул аңлатпа болса (7.18)-қатнасқа алып келеди.

7.7-мәселе.

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{7.20}$$

осцилляторлық потенциалы бар жағдайдағы меншикли мәнислерди ҳәм меншикли функцияларды табыңыз.

Шешими.

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ ҳәм } \lambda = \frac{m\omega}{\hbar} \tag{7.21}$$

белгилеўлерин киргизиў арқалы Шредингер теңлемесин былайынша жазыўға болады

$$\frac{d^2u}{dx^2}+(k^2-\lambda^2x^2)u=0. \tag{7.22}$$

Бул дифференңиаллық теңлемениң шешимлери $|x|\gg\frac{k}{\lambda}$ шәрти орынланғанда $\exp\left(\pm\frac{1}{2}\lambda x^2\right)$ нызамы бойынша өзгереди. Егер

$$u(x)=e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}v(x) \tag{7.23}$$

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

$$v''-2\lambda xv'+(k^2-\lambda)v=0 \tag{7.24}$$

теңлемесин қанаатландыратуғын $u(x)$ функциясы полином болады ямаса $e^{\lambda x^2}$функциясына пропорционал болады. (7.24)-теңлемени

$$v(x)=\sum_{j=1}^{\infty}a_j\,x^j \tag{7.25}$$

қатарға жайыўының жәрдеминде шешип

$$a_{j+1}=\frac{\lambda(2j+1)-k^2}{(j+2)(j+1)}a_j \tag{7.26}$$

рекуррентли қатнасын аламыз.

$j\to\infty$ шегинде $e^{\lambda x^2}$ функциясын дәреже бойынша қатарға жайыўға сәйкес келетуғын $a_{j+2}=\frac{2\lambda}{j}a_j$ асимптоталық қатнасы орын алады. Солай етип егер (7.25)-қатары ең ақырғы ағзада үзилиске түспейтуғын болса (7.23) шешимин нормализациялыўға болмайды екен. Ал (7.25)-қатардың ең ақырғы ағзада үзилиске түсиўи $a_{n+2}=0$ болғанда, яғный

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

теңлиги орынланғанда орын алады. Бул жағдайда (7.21)-аңлатпаға сәйкес

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad n=0,1,2,3,\dots \tag{7.27}$$

формуласына ийе боламыз.

$u_n(x)$ меншикли функцияларын (7.26)-қатнастың жәрдеминде алыўға ҳәм

$$\int_{-\infty}^{+\infty}u_n^2(x)dx=1 \tag{7.28}$$

шәрти менен нормировкалаў мүмкин.

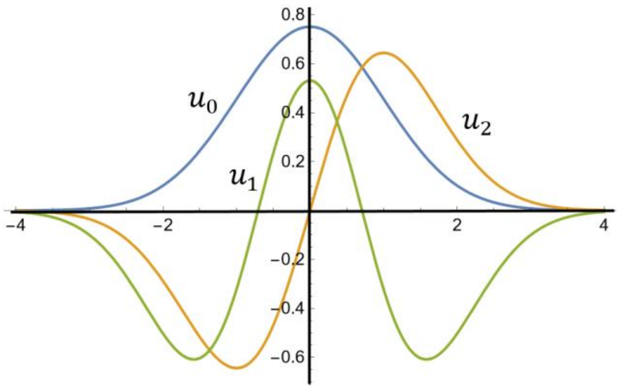
Дәслепки меншикли функциялардың бир қаншасы төменде келтирилген:

$$\begin{gathered}
u_0=C_0e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_1=C_1xe^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_2=C_2(1-2\lambda x^2)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_3=C_3\left(1-\frac{2}{3}\,\lambda x^3\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_4=C_4\left(1-4\lambda x^2+\frac{4}{3}\,\lambda^2x^4\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},\\
u_5=C_5\left(x-\frac{4}{3}\,\lambda x^3+\frac{4}{15}\,\lambda^2x^5\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2},
\end{gathered} \tag{7.29}$$

ал сәйкес нормировкалаў коэффициентлери төменде келтирилген:

$$C_n = \left(\frac{\lambda}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} c_n, c_0 = 1, c_1 = \sqrt{2\lambda}, c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}},$$
$$c_3 = \sqrt{3\lambda}, c_4 = \sqrt{\frac{3}{8}}, c_5 = \sqrt{\frac{15\lambda}{4}}. \qquad (7.30)$$

Ең дәслепки үш меншикли функциялар 19-сүўретте көрсетилген.



Гармоникалық осциллятор ушын дәслепки үш толқынлық функциялар (7.29)-аңлатпалар бойынша есапланған).

Меншикли функциялардың анық жуплыққа ийе болатуғынлығын аңсат көриўге болады. Потенциалдың симметрияға ийе болыўынын себебинен $V(-x) = V(x)$ шәрти орыланады, ал $u_n(-x)$ функциясы $u_n(x)$ функциясы менен бир қатарда дифференңиаллық теңлемениң тап сол (7.27)-меншикли мәниске сәйкес келетуғын шешими болып табылады. Азғыныў болмағанлықтан сол еки шешим бир биринен тек турақлы f көбейтиўши менен ғана айрылады. Усынын менен бирге нормировка шәртинен $|f|^2 = 1$ теңлигине ийемиз. x тың белгисин және бир рет өзгертсек, биз дәслепки шешимге қайтып келемиз, сонлықтан $f^2 = 1$ ямаса $f = \pm 1$. Демек қәлеген меншикли функция я жуп, я тақ болады деген сөз.

Егер (7.24)-теңлемеге x тың орнына

$$y = \lambda x^2 \qquad (7.31)$$

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

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

түриндеги азғынған гипергеометриялық функция ушын дифференңиаллық теңлемени қанаатландырады. Егер

$$a = \frac{1}{4} - \frac{k^2}{4\lambda} = \frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega} \qquad (7.32)$$

түриндеги белгилеўди қабыл етсек бул теңлемениң улыўмалық шешими

$$v = A\,{}_1F_1\left(a, \frac{1}{2}; y\right) + By^{1/3}\ {}_1F_1\ \left(a + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; y\right) \qquad (7.33)$$

түринде болады. Азғынған геометриялық қатар ${}_1F_1$ А пүтин функция болғанлықтан (7.33)-шешимдеги x өзгериўшисине қатнасы бойынша биринши қосылыўшы жуп, ал екинши қосылыўшы тақ. $y \to \infty$ шегинде еки қосылыўшы да $e^y y^{a-1/2}$ сыяқлы тарқалады ҳәм егер қатарлар жоғалмаса ҳәм үзилиске түспесе шешимди нормировкалаўға болмайды. Биринши аргументи пүтин терис санға тең болса гипергеометриялық қатар үзиледи. Сонлықтан бизде еле де еки мүмкиншилик бар. Егер

$$a = -n \text{ ямаса } E_{2n} = \hbar\omega\left(2n + \frac{1}{2}\right) \tag{7.34a}$$

болса биринши қатар үзиледи ҳәм меншикли функциялар ушын

$$u_{2n}(x) = \ A_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \tag{7.35a}$$

функциясын аламыз.

Егер

$$a + \frac{1}{2} = -n \text{ ямаса } E_{2n+1} = \hbar\omega\left(2n + \frac{3}{2}\right) \tag{7.34b}$$

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

$$u_{2n+1}(x) = Bx\ \ {}_1F_1\ \left(-n, \frac{3}{2}; \lambda x^2\right)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}. \tag{7.35b}$$

Бул нәтийжелер меншикли мәнислер ушын алынған (7.27)- ҳәм меншикли функциялар ушын алынған (7.29)-формула менен толық сәйкесликке ийе.

(7.35а)- ҳәм (7.35б)-теңликлер менен алынған көп ағзалыларды Эрмит полиномлары деп атайды. Азғынған гипергеометриялық функция менен олар

$$H_{2n}(\xi) = (-1)^n\frac{(2n)!}{n!}\ {}_1F_1\ \left(-n, \frac{1}{2}, \xi^2\right),$$
$$H_{2n+1}(\xi) = (-1)^n\frac{(2n+1)!}{n!}2\xi\ {}_1F_1\ \left(-n, \frac{1}{2}, \xi^2\right) \tag{7.36}$$

қатнаслары менен байланысқан. Усының менен бир қатарда және

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \tag{7.37}$$

формуласы орын алады.

Солай етип улыўма жағдайда нормалланған меншикли функциялар [(7.28)-аңлатпаға қараңыз]

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}}H_n(\sqrt{\lambda}x)e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} \tag{7.38}$$

түрине ийе болады.

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

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

түринде жазамыз. Бундай жағдайда (7.28)-шәртке байланыслы

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

теңлигиниң орынланыўы керек. Енди $H_n(\xi)$ полиномларының бирин оның (7.37)-аңлатпасы менен алмастырамыз. Буннан кейин алынған

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

аңлатпасын бөлеклерге бөлип n рет интегралласақ ең ақырында

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

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

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

яғный

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

ҳәм (7.38)-формула менен толық сәйкес келетуғын

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

аңлатпасына ийе боламыз.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Гармоникалық осциллятор тийкарғы ҳалда турыпты. Бөлекшени классикалық шеклердиң сыртында, яғный $-x_0 < x < +x_0$ областынан сыртта табыўдың итималлығы P ны табыңыз.

2. Гармоникалық осциллятордың координатасы менен импульсиниң дисперсиясын табыңыз.

3. Гармоникалық осциллятор биринши қозған ҳалда тур. Осциллятордың потенциал $\langle U \rangle$ ҳәм кинетикалық $\langle T \rangle$ энергияларының орташа мәнислерин табыңыз.

4. Массасы m ҳәм заряды e болған гармоникалық осцилляторға тербелис сызығы бойлап кернеўлиги болған турақлы бир текли электр майданы тәсир етеди. Гармоникалық осциллятордың стационар ҳалларының энергияларын ҳәм оларға сәйкес келиўши толқын функцияларын табыңыз.

5. Үш өлшемли изотроп осциллятордың n- энергия қәддиниң еселигин табыңыз. Үш өлшемли изотроп осциллятор деп

$$U(x, y, z) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$$

потенциал майданда қозғалыўшы бөлекшеге айтамыз.

6.

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

теңлигиниң дурыс екенлигин дәлиллеңиз.

Өз бетинше шешиў ушын усынылған мәселелердиң жуўаплары

1.

$$2/\sqrt{\pi} \int_1^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi \approx 0{,}157.$$

2.

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right), \langle(\Delta p)^2\rangle = \hbar m\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), n = 0, 1, 2, \dots$$

3.

$$\langle U\rangle = \langle T\rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega.$$

4.

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{e\mathcal{E}}{2m\omega^2},$$

$$\psi_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\psi_n^{oscil}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x - \frac{e\mathcal{E}}{2m\omega^2}\right)\right),$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

ψ_n^{oscil} арқалы зарядланбағын осциллятордың толқын функциялары белгиленген.

5.

$$k = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

8. Импульс моменти теориясының элементлери

Методикалық көрсетпелер. Классикалық механикада импульс моменти $\mathbf{L}$ бөлекшениң радиус-векторы менен оный, импульсиниң көбеймеси түринде анықланады, яғный $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$. Квантлық механиканын операторларын жазыўдың улыўмалық қағыйдаларына сәйкес ($\mathbf{p}\to\hat{\mathbf{p}}$, $\mathbf{r}\to\hat{\mathbf{r}}$) импульс моменти операторы былайынша табылады:

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar r\times\nabla.$$

Импульс моментинин x, y ҳәм z көшерлерине түсирилген проекцияларына сәйкес келетуғын операторлар былайынша жазылады:

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),$$

$$\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

Импульс моменти квадраты операторы

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.$$

8.1-мәселе. Төмендегидей коммутаторларды табыңыз:

$$a)\ [\hat{L}_x, \hat{L}_y], b)\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z], c)\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x].$$

Шешими. $a)$ Коммутаторларды ашыўдың қағыйдаларын пайдаланып, төмендегилерге ийе боламыз:

$$\begin{aligned}[\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = \\ &= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x - x\hat{p}_z] = \\ &= [y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] - [y\hat{p}_z, x\hat{p}_z] - [z\hat{p}_y, z\hat{p}_x] + [z\hat{p}_y, x\hat{p}_z].\end{aligned} \tag{8.1}$$

(8.1)-аңлатпанын оң тәрепиниң екинши ҳәм үшинши ағзалары нолге тең. Себеби координата операторы менен басқа координатаға түсирилген импульс моментиниң операторы бир бири менен коммутацияланады. Соның менен бирге импульс проекциялары операторлары да коммутацияланады (1.4- ҳәм 1.5-мәселелерге қараңыз).

Енди (8.1)-теңликтиң он тәрепинин биринши ҳәм ақырғы ағзаларының мәнислерин табамыз:

$$
\begin{gathered}
[y\hat{p}_z, z\hat{p}_x] = y\hat{p}_z z\hat{p}_x - z\hat{p}_x y\hat{p}_z = \\
= y(-i\hbar + z\hat{p}_z)\hat{p}_x - z\hat{p}_x\, y\hat{p}_z = \\
= -i\hbar y\hat{p}_x + zy\hat{p}_z\hat{p}_x - zy\hat{p}_z\hat{p}_x = -i\hbar y\hat{p}_x,
\end{gathered} \tag{8.2}
$$

$$
\begin{gathered}
[z\hat{p}_y, x\hat{p}_z] = z\hat{p}_y\, x\hat{p}_z - x\hat{p}_x\, z\hat{p}_y = \\
= z\hat{p}_y\, x\hat{p}_z - x(-i\hbar + z\hat{p}_z)\hat{p}_y = \\
= xz\hat{p}_z\hat{p}_y + i\hbar x\hat{p}_y - xz\hat{p}_z\hat{p}_y = i\hbar x\hat{p}_y.
\end{gathered} \tag{8.3}
$$

(8.2)- ҳәм (8.3)-аңлатпаларда биз $[\hat{p}_z, z] = -i\hbar$ екенлигин есапқа алдық.

Солай етип, ең ақырында

$$
[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = -i\hbar\hat{L}_z \tag{8.4}
$$

аңлатпасына ийе боламыз. Тап сондай жоллар менен

$$
\begin{gathered}
b)\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \\
c)\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y
\end{gathered}
$$

аңлатпаларын да аламыз.

(8.4)-(8.6) аңлатпалар ҳәр қыйлы координаталардағы импульс моментиниң проекциялары операторларының бир бири менен коммутацияланбайтуғынлығын көрсетеди.

8.2-мәселе. Импульс моментиниң проекцияларының ҳәр бир операторының импульс моментиниң квадраты операторы менен коммутацияланатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими: Мысал ретинде $[\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2]$ операторын қараймыз:

$$
\begin{gathered}
[\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{L}_x, \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2] = \\
= [\hat{L}_x, \hat{L}_x^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z^2].
\end{gathered} \tag{}
$$

Бул аңлатпаның оң бөлиминде турған коммутаторлар мыналарға тең:

$$
\begin{gathered}
[\hat{L}_x, \hat{L}_x^2] = 0, \\
[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] = \hat{L}_x\hat{L}_y^2 - \hat{L}_y^2\hat{L}_x = \hat{L}_x\hat{L}_y\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y + \\
+\hat{L}_y\hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_y\hat{L}_x = \\
= [\hat{L}_x, \hat{L}_y]\hat{L}_y + \hat{L}_y[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \\
= i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z = i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_y), \\
[\hat{L}_x, \hat{L}_z^2] = \hat{L}_x\hat{L}_z^2 - \hat{L}_z^2\hat{L}_x = \hat{L}_x\hat{L}_z\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z + \\
+\hat{L}_z\hat{L}_x\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_z\hat{L}_x = \\
= [\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{L}_z + \hat{L}_z[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z - i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y = \\
= -i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_y).
\end{gathered}
$$

Демек

$$
[\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] = i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_y) - i\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_z + \hat{L}_z\hat{L}_y) = 0
$$

теңлигин аламыз. Тап усындай жоллар менен $[\hat{L}_y, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$ ҳәм $[\hat{L}_z, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$ теңликлериниң орынлы екенлигин көрсетиў мүмкин.

Көрсетпелер: Квантлық механиканың бир катар мәселелерин шешкенде $\hat{L}_+$ ҳәм

$\hat{L}_-$ операторларынан пайдаланған қолайлы. Бул операторлар $\hat{L}_x$ ҳәм $\hat{L}_y$ операторларының сызықлы комбинациясынан турады:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \qquad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y.$$

8.3-мәселе. $a)$ $[\hat{L}_+, \hat{L}_z], b)$ $[\hat{L}_-, \hat{L}_z], c)$ $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$ коммутаторларын есаплаңыз.

Шешими:

$$a)\ [\hat{L}_+, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x, \hat{L}_z] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_z] =$$
$$= i\hbar\hat{L}_y - \hbar\hat{L}_x = -\hbar\hat{L}_+.$$
$$b)\ [\hat{L}_-, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x - i\hat{L}_y, \hat{L}_z] =$$
$$= [\hat{L}_x, \hat{L}_z] - i[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = -i\hbar\hat{L}_y + \hbar\hat{L}_x = -\hbar\hat{L}_-.$$
$$c)\ [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = [\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_x - i\hat{L}_y] = [\hat{L}_x, \hat{L}_x] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] +$$
$$+[\hat{L}_y, \hat{L}_y] = -2i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = 2\hbar\hat{L}_z.$$

$\hat{L}_x$ ҳәм $\hat{L}_y$ операторлары $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторы менен коммутацияланатуғын болғанлықтан

$$[\hat{L}_+, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] + i[\hat{L}_y, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0,$$
$$[\hat{L}_-, \hat{\mathbf{L}}^2] = [\hat{L}_x, \hat{\mathbf{L}}^2] - i[\hat{L}_y, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0.$$

8.4-мәселе. Сфералық координаталар системасындағы $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z, \hat{L}_+, \hat{L}_-$ ҳәм $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторларының анық түрин табыңыз.

Шешими: Декарт ҳәм сфералық координаталар системаларын байланыстыратуғын формулаларды жазамыз:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi\,, y = r\sin\theta\sin\varphi\,, z = r\cos\theta.$$

$\psi(x,y,z)$ функциясын қараймыз ҳәм оның φ азимуталлық мүйеши бойынша дара туўындысын табамыз:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} =$$
$$= -\frac{\partial\psi}{\partial x}r\sin\theta\sin\varphi + \frac{\partial\psi}{\partial y}r\sin\theta\cos\varphi = \tag{8.7}$$
$$= x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}.$$

(8.7)-аңлатпаға сәйкес $\psi(x,y,z)$ функциясына $\hat{L}_z$ операторы менен тәсир етип мына аңлатпаға ийе боламыз:

$$\hat{L}_z\psi = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}.$$

Солай етип сфералық координаталар системасында

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$$

формуласына ийе болады екенбиз. Буннан кейин $\psi(x,y,z)$ функциясының поляр мүйеш θ бойынша туўындысын табамыз:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta} =$$
$$= r\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial x} + r\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial\psi}{\partial y} - r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z} = \tag{8.8}$$

$$= ctg\,\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - y\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) - tg\,\theta z\frac{\partial\psi}{\partial z}.$$

$\hat{L}_+$ операторының тәсири мынаған алып келеди:

$$\hat{L}_+\psi = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)\psi = -\hbar\left(y\frac{\partial\psi}{\partial z} - z\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) + \hbar\left(z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) =$$
$$= \hbar\left(iz\frac{\partial\psi}{\partial y} + z\frac{\partial\psi}{\partial x} - (x+iy)\frac{\partial\psi}{\partial z}\right).$$

Енди

$$x + iy = r\sin\theta\,(\cos\varphi + i\sin\ \varphi) = re^{i\varphi}\sin\theta,$$
$$x - iy = r\sin\theta\,(\cos\varphi - i\sin\ \varphi) = re^{-i\varphi}\sin\theta$$

екенлигинен пайдаланамыз. Бундай жағдайда

$$\hat{L}_+\psi = \hbar e^{i\varphi}\left(ire^{-i\varphi}\cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial y} + re^{-i\varphi}\cos\theta\frac{\partial\psi}{\partial x} - r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) =$$
$$= \hbar e^{i\varphi}\left(i(x-iy)\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial y} + (x-iy)\,\mathrm{ctg}\,\theta\frac{\partial\psi}{\partial x} - r\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial z}\right) = \qquad (8.9)$$
$$= \hbar e^{i\varphi}\left[\mathrm{ctg}\,\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} + y\frac{\partial\psi}{\partial y}\right) - \mathrm{tg}\,\theta\,z\frac{\partial\psi}{\partial x} + i\,\mathrm{ctg}\,\theta\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right].$$

(8.7)- ҳәм (8.8)-аңлатпаларды есапқа алып (8.9)-аңлатпада $\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$ ҳәм $\frac{\partial\psi}{\partial\theta}$ шамаларын айырып алыўға ҳәм солай етип сфералық координаталарында

$$\hat{L}_+ = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,ctg\theta\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (8.10)$$

операторын алыў мүмкин. Тап сол сыяқлы есаплаўлар

$$\hat{L}_- = -\hbar e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\,ctg\theta\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (8.11)$$

операторын береди.

(8.10)- ҳәм (8.11)-аңлатпалардың жәрдеминде $\hat{L}_x$ ҳәм $\hat{L}_y$ операторлары ушын аңлатпаларды алыўға болады:

$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ + \hat{L}_-}{2} = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} +\ ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$
$$\hat{L}_x = \frac{\hat{L}_+ - \hat{L}_-}{2i} = i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} -\ ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

Ең ақырында импульс моментинин квадраты ушын төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 =$$
$$= -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}.$$

Базы бир методикалық көрсетпелер: 8.1- ҳәм 8.2-мәселелерде алынған коммутациялық қатнаслар импульс моментинин бир ўақытта еки проекциясын дәл өлшеўдин мүмкин емес екенлигин көрсетеди. Бирақ импульс моментинин бир проекциясынын ҳәм импульс моментинин квадратынын мәнисин бир ўақытта дәл өлшеў мүмкин екен[4]. Импульс моментиниң проекцияларынын биринин операторы

[4] $\mathbf{L} = 0$ болған жағдай буған кирмейди. Себеби, бул жағдайда импульс моментиниң үш проекцияларының барлығы нолге тең болады.

ретинде әдетте $\hat{L}_z$ операторын сайлап алады. $\left[\hat{L}_z, \hat{\mathbf{L}}^2\right]$ коммутаторының нолге тең болыўы еки оператордың меншикли функциялардың улыўмалық системасына ийе болатуғынлығын аңғартады.

Сфералық координаталар системасында $\hat{L}_z$ ҳәм $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторларынын меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын анықлаў мәселеси мына түрге ийе:

$$\hat{L}_z Y(\theta,\varphi) = -i\hbar \frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi} = L_z Y(\theta,\varphi), \tag{8.12}$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y(\theta,\varphi) = \\ = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y(\theta,\varphi)}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y(\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2} \right\} = \lambda Y(\theta,\varphi). \tag{8.13}$$

Бул аңлатпаларда L_z ҳәм λ шамалары $\hat{L}_z$ ҳәм $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторларының сәйкес меншикли мәнислери болып табылады. Ал, $Y(\theta,\varphi)$ функциясы арқалы биз қарап атырған операторлардын улыўмалық функциялары белгиленген. Бул мәселе өзгериўшилерди айырыўға мүмкиншилик береди ҳәм усыған байланыслы $Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ теңлигин жаза аламыз. Бул функциялардың бири $\Theta(\theta)$ тек поляр мүйеш θ дан, ал екиншиси $\Phi(\varphi)$ тек азимутал мүйеш φ ден ғәрезли. Бундай жағдайда (8.12)-теңлеме былайынша жазылады:

$$i\hbar \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = L_z \Phi(\varphi).$$

Бул теңлемениң меншикли мәнислери ҳәм нормировкаланған меншикли функциялары 3.1-мәселеде табылды ҳәм сәйкес төмендегилерге тең:

$$L_z = \hbar m, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$$

Енди (8.13)-аңлатпаға

$$Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

аңлатпасын қойып

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{m^2}{\sin^2\theta} \Theta(\theta) + \frac{\lambda}{\hbar^2} \Theta(\theta) = 0 \tag{8.14}$$

теңлемесин аламыз. (8.14)-теңлемениң шешимлери бир мәнисли, шекли ҳәм

$$\int_0^\pi |\Theta(\theta)|^2 \sin\theta \, d\theta = 1$$

нормировка шәртине бағынатуғын болыўы керек. Бундай шешимлер тек

$$\lambda = \hbar^2 l(l+1), \qquad l = 0, 1, 2, \ldots$$

теңлиги орынланғанда орын алатуғын ҳәм

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{8.15}$$

теңлиги менен анықланатуғынлығын көрсетиўге болады. (8.15)-теңлемеде

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} \sin^{|m|}\theta \frac{d^{l+|m|}(d\cos^2\theta - 1)^l}{(d\cos\theta)^{l+|m|}}.$$

Бул аңлатпада $|m| \leq 1, P_l^{|m|}(\cos\theta)$ функциялары Лежандрдың бириктирилген полиномлары деп аталады.

$\hat{L}_z$ ҳәм $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторларының

$$Y(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) =$$

$$= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$$

түринде жазылатуғын улыўмалық функциялары шар функциялар (ямаса сфералық функциялар) деп аталады (бул формулада $|m| \leq l$). Шар функциялар ортонормировкаланған:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin\theta \, d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

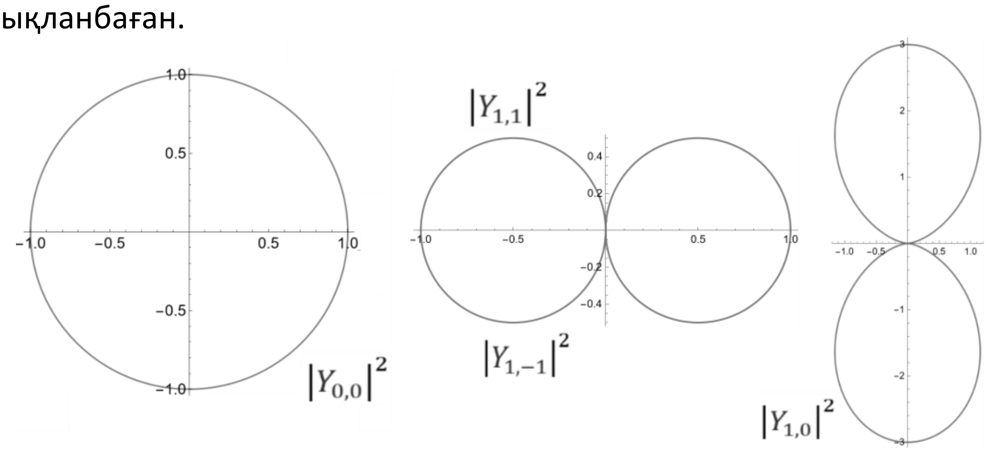
m санын магнит квант саны, ал l санын азимутал квант саны деп атайды. 8.1-кестеде l = 0 ҳәм l = 1 болған жағдайлар ушын шар функциялар берилген. Бул кестеде L_x, L_y, L_z (L_x, L_y шамалары $\hat{L}_x$ ҳәм $\hat{L}_y$ операторларының меншикли мәнислери болып табылады) шамаларынын мәнислери де, λ шамасынын мәнислери де берилген. Mathematica универсаллық компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде $l = 0$ ҳәм $l = 1$ болған жағдайлар ушын алынған Y_{lm} функциясының поляр диаграммалары 8.1-сүўретте келтирилген.

$l = 0$ болған ҳалды s-ҳал, ал $l = 1$ болған ҳалды p-ҳал деп атайтуғынын атап өтемиз.

8.1-кесте.

Ҳал	l	m	Шар функциялар	Шар функциялардың түри	L_z	$\mathbf{L}^2$	L_x, L_y
s	0	0	$Y_{0,0}$	$1/\sqrt{4\pi}$	0	0	0, 0
p	1	-1	$Y_{0,-1}$	$-\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{-i\varphi}$	$-\hbar$	$2\hbar^2$	*)
	1	0	$Y_{1,0}$	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta$	0	$2\hbar^2$	*)
	1	1	$Y_{1,1}$	$\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, e^{-i\varphi}$	$+\hbar$	$2\hbar^2$	*)

*) анықланбаған.



8-1 сүўрет.

8.5-мәселе. Кеңисликтеги инерция моменти I болған ротатордын энергия спектрин ҳәм толқын функцияларын табыңыз. Энергия қәддилеринин айғыныў еселиги қандай?

Шешими. Ротатор деп берилген $r = a = const$ радиусқа ийе сфера бойынша қозғалатуғын бөлекшеге айтамыз. Ротаторға мысал ретинде атомлары арасындағы қашықлық a өзгермейтуғын еки атомлы молекуланы көрсетиўге болады. Бундай молекуланын инерция моменти $I = ma^2$ шамасына тең [бул аңлатпада m арқалы молекулалардын келтирилген массасы белгиленген). Классикалық механикада ротатордын Гамильтон функциясын

$$H = \frac{\mathbf{L}^2}{2I}$$

түринде жазады.

Квантлық механикада операторларды дүзиўдиң улыўмалық қағыйдасы бойынша ротатордың гамильтонианы былайынша жазылады

$$\widehat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I}.$$

Демек ротатор ушын Шредингердиң стационар теңлемеси мына түрге ийе болады:

$$\frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I}\psi = E\psi.$$

$\hat{\mathbf{L}}^2$ операторының меншикли мәнислери менен меншикли функцияларын билип, ротатордың энергия қәддилерин табыў мүмкин

$$E = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I},$$

ал оның меншикли функциялары

$$\psi_{lm} = Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада $l = 0, 1, 2, \ldots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm l$.

l квант санынының берилген мәнисинде m магнит квантлық саны $2l + 1$ мәниске ийе болатуғын болғанлықтан, тийкарғы ҳалдан (тийкарғы ҳалда $l = 0$) басқасының барлығында ҳал $(2l + 1)$ есе азғынған болады.

8.6-мәселе. Ротатордың ҳалын тәрийиплейтуғын толқын функциясы

$$\psi = C(2\sin\theta\sin\varphi + 3i)$$

түринде жазылатуғын жағдай ушын өлшеўлерде анықланыўы мүмкин болған нормировкалаўшы көбейтиўши C ны, $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторының меншикли мәнислери болған L_z, λ шамаларын ҳәм E ни, олардың жүзеге келиўиниң итималлықлары болған P_{L_z}, P_λ, P_E шамаларын табыңыз.

Шешими. Берилген функцияны $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторының меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз:

$$\psi = C\left[2\left(\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\frac{1}{2i}e^{i\varphi} - \sqrt{\frac{8\pi}{3}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\frac{1}{2i}e^{-i\varphi}\right) + 3i\sqrt{4\pi}\,\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\right] =$$

$$= C\left[-i\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,1} + i\sqrt{\frac{8\pi}{3}}Y_{1,-1} + 3i\sqrt{4\pi}Y_{0,0}\right].$$

Буннан кейин

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|\psi|^2 \sin\theta\, d\theta d\varphi = 1$$

нормировка шәртинен $C=\sqrt{\frac{3}{124\pi}}$ екенлигин табамыз. Нормировкаланған ψ функциясы

$$\psi = -i\sqrt{\frac{2}{31}}Y_{1,1} + i\sqrt{\frac{2}{31}}Y_{1,-1} + i\sqrt{\frac{27}{31}}Y_{0,0}$$

түринде жазылады.

8.2-кесте.

L_z	P_{L_z}	λ	P_λ	E	P_E
$-\hbar$	2/31	$2\hbar^2$	4/31	$\hbar^2/I$	4/31
$\hbar$	2/31				
0	27/31	0	27/31	0	27/31

φ функциясын қатарға жайыў мүмкин болған меншикли функциялардың жыйнағы экспериментте анықланыўы мүмкин болған L_z, λ ҳәм E шамаларынын мәнислерин береди. Бул шамалардын ψ функциясына кириўши меншикли функцияларға жуўап беретуғын операторлардың меншикли мәнислери екенлигин еске түсирип өтемиз. Экспериментте анаў ямаса мынаў шаманың табылыўының итималлығы меншикли функциялар бойынша жайылған қатардағы коэффициентлердиң модуллериниң квадратлары менен анықланады. Шамалардың мәнислери ҳәм олардың итималлықлары 8.2-кестеде берилген.

8.7-мәселе. $\hat{L}_z$ операторының меншикли функциясы болған Φ_m функциясына $\hat{L}_+$ ҳәм $\hat{L}_-$ операторлары менен тәсир еткенде $\hat{L}_z$ операторының меншикли функцияларының да алынатуғынлығын көрсетиңиз.

Шешими. 8.3-мәселедеги коммутациялық қатнасларды пайдаланып

$$\hat{L}_z\hat{L}_+\Phi_m = \hat{L}_+\hat{L}_z\Phi_m + \hbar\hat{L}_+\Phi_m =$$
$$= \hat{L}_+\hbar m\Phi_m + \hbar\hat{L}_+\Phi_m = \hbar(m+1)\hat{L}_+\Phi_m$$

аңлатпасын жазыў мүмкин. Бул теңлик $\hat{L}_+\Phi_m$ функциясының $\hat{L}_z$ операторының меншикли функциясы болатуғынлығын көрсетеди. Соның менен бирге $\hat{L}_z$ операторына $L_z = \hbar(m+1)$ меншикли мәнислери сәйкес келеди. Солай етип $\hat{L}_+$ операторы жоқарылатыўшы оператор болып хызмет етеди. Тап усындай жоллар менен $\hat{L}_-\Phi_m$ функциясының $L_z = \hbar(m-1)$ мәнислерине ийе ҳалларды тәрийиплейтуғын $\hat{L}_z$ операторының меншикли функциясы екенлигин дәлиллеўге болады.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. $a)$ $[\hat{L}_x,\hat{x}], b)$ $[\hat{L}_x,\hat{y}], c)$ $[\hat{L}_x,\hat{z}]$ коммутаторларын табыңыз.
2. $a)$ $[\hat{L}_x,\hat{p}_x], b)$ $[\hat{L}_x,\hat{p}_y], c)$ $[\hat{L}_x,\hat{p}_z]$ коммутаторларын табыңыз.
3. $a)$ $[\hat{L}_x,\hat{\mathbf{r}}^2], b)$ $[\hat{L}_x,\hat{\mathbf{p}}^2]$ коммутаторларын табыңыз.

4. $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_z + \hat{L}_z^2$ теңлигиниң дурыс екенлигин дәлиллеңиз.

5. $\hat{L}_+$ ҳәм $\hat{L}_+$ операторларын пайдаланып $\hat{\mathbf{L}}^2$ операторының меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын табыңыз.

6. Инерция моменти I болған тегис ротатордың стационар ҳалларының энергия спектрин толқын функцияларын табыңыз. Энергия қәддилериниң азғыныўының еселиги k ның қандай екенлигин көрсетиңиз.

7. Кеңисликтиги ротатордың ҳалын тәрийиплейтуғын толқын функциясы $\psi = C(3\sin\theta\cos\varphi + 2i)$ түрине ийе. Өлшеўлерде табылатуғын C нормировкалаўшы көбейтиўшисин, L, λ ($\hat{\mathbf{L}}^2$ операторының меншикли мәнислери) ҳәм E шамасын табыңыз.

8. Кеңисликлик ротатордың s ҳалындағы $\langle\cos\theta\rangle$ ҳәм $\langle\cos^2\theta\rangle$ шамаларын табыңыз.

9. Кеңисликлик ротатордың p ҳалындағы $\langle\cos^2\theta\rangle$ шамасын табыңыз.

Студентлердиң өз бетинше шешиуи ушын усынылған мәселелердиң шешимлери

1. a) $0, b)\ i\hbar z, c)\ -i\hbar y$.
2. a) $0, b)\ i\hbar\hat{p}_z, c)\ i\hbar\hat{p}_y$.
3. a) $0, b)\ 0$.
6. $\Phi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$

$m \neq 0$ болғанда $k = 2$

$m = 0$ болғанда $k = 1$.

7. $C = \frac{1}{\sqrt{28\pi}}$, L_z шамасы $+\hbar$, 0, $-\hbar$ мәнислерин сәйкес 3/14, 4/7 ҳәм 3/14 итималлықлары менен қабыл етеди. λ шамасы болса $2\hbar^2$, 0 мәнислерин сәйкес 3/7 ҳәм 4/7 итималлықлары менен қабыл етеди. E шамасы болса $\hbar^2/I$ ҳәм 0 мәнислерин сәйкес 3/7 ҳәм 4/7 итималлықлары менен қабыл етеди.

8. 0 ҳәм 1/3.

9. $m = 0$ ушын 3/5 ҳәм $m = \pm1$ ушын 1/5.

9. Орайлық майдандағы қозғалыс

Орайлық майданда бөлекшенин потенциал энергиясы тек ғана бөлекше менен күш орайы арасындағы қашықлыққа байланыслы, яғный $U = U(r)$. Демек гамильтониан мынадай түрге ийе болады:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r).$$

Бөлекше орайлық майданда қозғалғанда толқын функциясынын сфералық мүйешлерден ғәрезлиги потенциал энергиянын түриниң айқын түрде сайлап алыныўынан ғәрезли емес. Орайлық майдандағы толқын функциясының мүйешлик бөлими $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ шар функциялары менен бериледи.

Күш майданынын орайлық симметрияға ийе болыўына байланыслы гамильтонианды сфералық координаталарда жазған мақсетке муўапықболады:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\right) + U(r) \qquad (9.1)$$

(9.1)-аңлатпадағы фигуралық қаўсырмада $-\hbar^2$ шамасына бөлинген $\hat{\mathbf{L}}^2$ мүйешлик моменттин квадраты операторы тур. Сонлықтан гамильтонианды былайынша жазыўға болады:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + U(r). \qquad (9.2)$$

$\hat{\mathbf{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторларының орайлық күшлер майданындағы бөлекшенин $\widehat{H}$ операторы менен коммутацияланатуғынлығын аңсат көрсетиўге болады. Демек бундай бөлекше бир ўақытта энергияның мүйешлик моменттиң квадратының ҳәм бул моменттин айырып алынған z бағытына түсирилген проекциясынын анық мәнисине ийе бола алады екен. Бул ҳаллардын толқын функциялары бир ўақытта жоқарыда атлары аталған барлық операторлардың меншикли функциялары болады. ψ толқын функциясынын $\hat{\mathbf{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторларының меншикли функциясының болыўы талабы онын мүйешлерден ғәрезлигин анықлайды, ал атап айтқанда орайлық майданда бөлекшенин толқын функциясынын мүйешлик бөлими $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ шар функцияларының жәрдеминде тәрийипленеди.

(9.2)-гамильтонианға ийе Шредингер теңлемесинин шешимин

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (9.3)$$

түринде излеў керек. Бул аңлатпада $R(r)$ арқалы $U(r)$ потенциал энергияның түри менен анықланатуғын радиаллық толқын функциясы белгиленген. (9.3)-функциясының $\hat{\mathbf{L}}^2$ ҳәм $\hat{L}_z$ операторларының меншикли функциялары болып табылатуғынлығы түсиникли.

(9.3)-аңлатпаны (9.2)-гамильтонианға ийе Шредингердиң стационар теңлемесине қойып ҳәм оның

$$\hat{\mathbf{L}}^2\psi = \hbar^2 l(l+1)$$

екенлигин есапқа алып? Шредингердин радиаллық теңлемеси деп аталатуғын теңлемени аламыз:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(R) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]E = 0. \qquad (9.4)$$

Егер $U(R)$ потенциал энергиясы барлық орынларда шекли болса, онда $R(r)$ функциясының r диң 0 ден от ∞ ке шекемги мәнислеринде шекли мәнислерге ийе болыўы керек. Күш орайынан шексиз қашықлықта шегаралық шәртлер мәселенин айқын түрде қойылыўына байланыслы табылады.

(9.4)-теңлемени шешиў ушын көпшилик жағдайларда $\chi(r) = rR(r)$ функциясына өткен қолайлы болады. Бул жағдайда (9.4)-теңлеме мынадай түрге енеди:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(R) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi = 0. \qquad (9.5)$$

$R(r)$ функциясы шекли болғанлықтан $r = 0$ ноқатында $\chi(r)$ функциясы нолге тең

болады, яғный

$$\chi(r) = 0.$$

(9.5)-теңлеме өзинин қурылысы бойынша бир өлшемли жағдайлардағы Шредингер теңлемесине сәйкес келеди. Бул жағдайда потенциалдың орнына

$$U_{eff}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

эффективлик потенциал энергиясын жазыў керек.

9.1-мәселе. s ҳалындағы еркин бөлекшенин толқын функциясын табыңыз.

Шешими: (9.5)-теңлемени $I = 0$ болған еркин бөлекше ушын жазамыз ($U = 0$):

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + k^2\chi = 0.$$

Бул аңлатпада

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Бундай теңлемениң шешими былайынша жазылады:

$$\chi = A\sin(kr) + B\cos(kr).$$

$\chi(0) = 0$ шәртинен $B = 0$ екенлигине ийе боламыз. Солай етип толқын функциясының радиаллық бөлими ушын мынаны аламыз:

$$R_k(r) = A\sin\frac{kr}{r}.$$

$R(r)$ функциясына ҳеш қандай қосымша шәртлер қойылмайды. Сонлықтан k шамасы да, E энергия да қәлеген (терис емес) мәнислерге ийе бола алады. Демек бөлекше үзликсиз спектрге ийе болады. Сонлықтан A коэффициенты үзликсиз спектр ушын арналған нормировка шәртинен табылады

$$\int\limits_0^\infty R_k^*(r)R_{k'}(r)r^2dr =$$

$$= |A|^2\int\limits_0^\infty \frac{\sin(kr)}{r}\frac{\sin(k'r)}{r}r^2dr = \delta(k'-k). \tag{9.6}$$

(9.6)-аңлатпадағы интегралды былайынша жазыўға болады:

$$\int\limits_0^\infty \sin(kr)\sin(k'r)\,dr =$$

$$= \frac{1}{2}\int\limits_0^\infty \cos[(k-k')r]\,dr - \frac{1}{2}\int\limits_0^\infty \cos[(k+k')r]\,dr =$$

$$= \frac{1}{4}\int\limits_0^\infty \cos[(k-k')r]\,dr - \frac{1}{4}\int\limits_0^\infty \cos[(k+k')r]\,dr.$$

$k = k'$ шәрти орынланғанда $\int_0^\infty \cos[(k+k')r]\,dr$ интегралы жыйнақлы болатуғын болғанлықтан нормировка шәртинде оны жазбаўға болады. (Қ3.10) аңлатпасына сәйкес

$$\frac{1}{4}\int\limits_0^\infty \cos[(k-k')r]\,dr = \frac{\pi}{2}\frac{1}{2\pi}\int\limits_0^\infty \cos[(k-k')r]\,dr =$$

$$= \frac{\pi}{2}\delta(k - k')$$

Бизлер бул жерде

$$\sin(kr) = -\frac{i}{2}(e^{ikr} - e^{-ikr})$$

теңлигинен пайдаландық. Бундай жағдайда (9.6)-аңлатпадан $A = \sqrt{2/\pi}$ екенлигин табамыз. $Y_{0,0}$ толқын функциясының мүйешлик бөлимин есапқа алыў бөлекшениң толқын функциясын береди:

$$\psi_{k00}(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2}\pi}\frac{\sin(kr)}{r}.$$

9.2-мәселе. Орайға қарата симметриялы болған ҳәм

$$r < a \text{ болғанда } U(x) = 0,$$
$$r > a \text{ болғанда } U(x) = \infty$$

потенциал шуқырдағы массасы m болған бөлекшениң s ҳалындағы энергиясының мүмкин болған мәнислерин ҳәм толқын функцияларын табыңыз.

Шешими. Шуқырдың ишинде ($r < a$) (9.5)-теңлеме мына түрге ийе болады:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + k^2\chi = 0.$$

Бул аңлатпада

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Жоқарыдағы теңлемениң шешими

$$\chi = A\sin(kr) + B\cos(kr)$$

функциясы болып табылады.

$\chi(0) = 0$ шәрти $B = 0$ екенлигин береди. Бөлекше $r > a$ областына өте алмайтуғын болғанлықтан

$$\chi(a) = A\sin(ka) = 0$$

теңлиги орынланады есаплаў керек. Буннан

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

екенлигине ийе боламыз.

$n = 0$ мәнисин биз қабыл етпедик. Себеби бундай жағдайда толқын функциясы тек нолге тең болады. k менен E арасындағы байланысты нәзерде тутып, бөлекшениң энергиясының мәнисин табамыз:

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

Солай етип бөлекшениң спектриниң дискрет екенлигин көремиз. A константасы нормировка шәртинен излеймиз

$$\int_0^a |R(r)|^2 r^2 dr = \int_0^a |\chi(r)|^2 dr = |A|^2 \int_0^a \sin^2(kr)dr = 1. \tag{9.7}$$

Усының менен бир қатарда

$$\int_0^a \sin^2(kr)dr = \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n}{a}\, r\right)dr = \frac{a}{2}$$

теңлиги орынлы болғанлықтан, (9.7)-аңлатпадан $A = \sqrt{2/a}$ деп жуўмақ шығарамыз.

Солай етип бөлекшениң радиаллықтолқын функциясын аламыз

$$R_n(r) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a}\,r\right)}{r}$$

Толқын функциясының мүйешлик бөлими болған $Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ шамасын есапқа алып толқын функциясы ушын

$$\psi_{n00}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}}\,\frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a}\,r\right)}{r}$$

аңлатпасын аламыз.

9.3-мәселе. Тартысыўды пайида ететуғын $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ Кулон майданында заряды e болған бөлекшениң (водород тәризли атом) байланысқан ҳаллары ушын меншикли мәнислерди ҳәм меншикли функцияларды табыңыз.

Шешими. Бул жағдайда (9.4) радиаллық функция ушын Шредингер теңлемеси былайынша жазылады

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0. \qquad (9.8)$$

Эффективлик потенциалдың r ден ғәрезлиги 9.1-сүўретте схема түринде келтирилген. Бөлекшениң байланысқан ҳалларының тек $E < 0$ болған жағдайда ғана жүзеге келетуғынлығы көринип тур.

(9.8)-теңлемени мына түрде көширип жазамыз:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[-|A| + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0.$$

Бул аңлатпада

$$\frac{mZe^2}{\hbar^2} \equiv B > 0, \frac{2mE}{\hbar^2} \equiv A < 0.$$

$\rho = 2\sqrt{|A|}r$ өзгериўшисин киргизип, мына теңлемени аламыз:

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{2B}{\sqrt{|A|}r} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0. \qquad (9.9)$$

Биз дәслеп $\rho \to \infty$ ҳәм $\rho \to 0$ шеклериндеги бул теңлемениң шешимлерин табамыз. (9.9)-теңлемеден $\rho \to \infty$ шегинде теңлемениң былайынша жазылатуғынлығын аңғарыўға болады (бул теңлемедеги квадрат қаўсырмадағы бөлиминде ρ бар барлық ағзаларды есапқа алмаймыз):

$$\frac{d^2R_\infty}{d\rho^2} - \frac{1}{4}R_\infty = 0. \qquad (9.10)$$

ал бул теңлемеде R_∞ арқалы $\rho \to \infty$ шегиндеги (9.9)-теңлемениң асимптоталық шешими белгиленген. (9.1)-теңлемениң шешимлери еки функция болып табылады: $\exp\left(\frac{\rho}{2}\right)$ ҳәм $\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)$. Бирақ «+» белгисине ийе экспонентаны таслап кетиў керек. Себеби ол ρ шексизликке умтылғанда шексиз үлкейеди. Солай етип,

$$R_\infty = \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right).$$

$\rho \to 0$ шегиндеги асимптоталық шешимин табыў ушын (9.9)-теңлеме тийкарында жаңа теңлеме жазыўымыз ҳәм бул теңлемеде $\frac{l(l+1)}{\rho}$ шамасына салыстырғанда 1/4 ҳәм $\frac{B}{\sqrt{|A|}\rho}$ шамаларын есапқа алмаўымыз керек:

$$\frac{d^2R_0}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR_0}{d\rho}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}R_0=0. \tag{9.11}$$

Бул теңлемениң шешимин

$$R_0=\rho^q \tag{9.12}$$

түринде излеймиз.

(9.12)-аңлатпаны (9.11)-теңлемеге қойсақ мынаны табамыз:

$$q(q+1)-l(l+1)=0.$$

Бул теңлеме еки шешимге ийе:

$$q_1=l, \qquad q_2=-(l+1).$$

Сонлықтан (9.11)-теңлемениң дара шешимлери $R_0=\rho^l$ ҳәм $R_0=\rho^{-(l+1)}$ аңлатпалары болып табылады. $\rho\to 0$ шегинде $R_0=\rho^{-(l+1)}$ шексиз өсетуғын болғанлықтан оны буннан былай пайдаланыўдан қалдырыўымыз керек. Усының нәтийжесинде ең ақырында мынаған ийе боламыз:

$$R_0=\rho^l.$$

Енди (9.9)-теңлемениң ықтыярлы ρ ушын шешимин табамыз. Бул теңлемеде $\chi=\rho R$ алмастырыўын орынлап

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+\left[-\frac{1}{4}+\frac{B}{\rho\sqrt{|A|}}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\chi=0. \tag{9.13}$$

Бул теңлемениң шешимин

$$\chi=\rho R_\infty R_0 u(\rho)=\rho^{l+1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)u(r)\equiv \nu(\rho)u(\rho) \tag{9.14}$$

түринде излеймиз. Бул теңлемеде $u(\rho)$ арқалы анықланыўы керек болған функция белгиленген.

$$\nu(\rho)\equiv\rho^{l+1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right).$$

Енди

$$\int_0^\infty |R(\rho)|^2\rho^2 d\rho=\int_0^\infty |\chi(\rho)|^2 d\rho$$

интегралын дыққаттан алып таслаў керек болғанлықтан (себеби биз қарап атырған бөлекшениң толқын функциясын 1 ге нормировкалаў мүмкин болмай қалады, ал дискрет спектр ушын 1 ге нормировкалаў шәрт) $u(\rho)$ функциясының

$$\int_0^\infty \rho^{2l+2}e^{-\rho}u(\rho)d\rho<\infty \tag{9.15}$$

шәртин қанаатландырыўы керек болады. Енди (9.14)-аңлатпаны (9.13)-аңлатпаға қойып,

$$u''+2u'\frac{\nu'}{\nu}+\left[\frac{\nu''}{\nu}-\frac{1}{4}+\frac{B}{\rho\sqrt{|A|}}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u=0 \tag{9.16}$$

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемедеги штрих ρ бойынша дифференңиаллаўды аңғартады.

Енди

$$\ln\nu = -\frac{1}{2}\rho + (l+1)\ln\rho$$

теңлигиниң орынлы екенлигин аңғарыўымыз керек. Бундай жағдайда

$$\frac{\nu'}{\nu} = (\ln\nu)' = -\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho},$$

яғный

$$\nu' = \left(-\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho}\right)\nu$$

теңлигине ийе боламыз. Буннан кейин

$$\nu'' = -\frac{l+1}{\rho^2}\nu + \left(-\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho}\right)^2$$

ҳәм

$$\frac{\nu''}{\nu} = \frac{1}{4} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\nu$$

теңликлериниң орынланатуғынлығын көремиз. Бул формулаларды пайдаланып (9.16)-теңлемени мынатүрге алып келемиз:

$$\rho u'' + [2(l+1) - \rho]u' + \left[\frac{B}{\sqrt{|A|}} - l - 1\right]u = 0.$$

$$k = 2l + 1 \text{ ҳәм } \lambda = \frac{B}{\sqrt{|A|}} + l$$

белгилеўлеринен пайдаланып төмендегидей аңғартпаға ийе боламыз:

$$\rho u'' + (k + 1 - \rho)u' + (\lambda - k)u = 0. \tag{9.17}$$

Бул теңлеме Лагеррдиң бириктирилген дифференциаллық теңлемеси болып табылады (5-қосымшаға қараңыз). Бул теңлеме тек

$$l = n' \text{ҳәм } n' \geq k$$

шәртлери қанаатландырылған жағдайда ғана (9.15)-шәртти қанаатландыратуғын шешимге ийе бола алады. Жоқарыдағы шәртлерде (яғный $l = n'$ҳәм $n' \geq k$ шәртлеринде) n' шамасы 0, 1, 2 ҳәм т.б. мәнислерди қабыл ете алады. Бирақ $n' \geq k = 2l + 1$ шәрти $n' = 0$ шәртин қарап шығыўдан алып таслайды. n' шамасының орнына $n' = n + 1$ теңлиги менен анықланатуғын бас квантлық санды пайдаланған қолайлы. Бас квантлық саннның $n = 1, 2, 3, \dots$ мәнислерин қабыл ететуғынлығы көринип тур.

$\lambda = n'$ шәртинен бөлекшениң энергиясының қәддилери анықланады:

$$\frac{B}{\sqrt{|A|}} + l = n + 1,$$

ал буннан

$$E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}\frac{e^2}{a_0} \tag{9.18}$$

аңлатпасына ийе боламыз. Бул формулада $a_0 = \hbar^2/me^2$ шамасы арқалы Бор радиусы деп аталатуғын шама белгиленген (водород атомы ушын $a_0 \approx 0{,}529$ Å). Биз қарап атырған майданда бөлекшениң энергиясының мәнисиниң тек бас квантлық санынан ғәрезли екенлигин аңғарамыз. $n = 1$ болған жағдайда минималлық энергияға ийе боламыз. Сонлықтан бас квантлық саны 1 ге тең болған ҳал тийкарғы ҳал болып табылады.

$n' \geq k$ теңсизлиги $n \geq l+1$ теңсизлигиниң орынланатуғынлығын аңғартады. Демек берилген бас квантлық санында $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ теңликлери орынланады екен.

(9.18)-теңлемениң шешими

$$u = CL_{n+1}^{2l+1}(\rho)$$

аңлатпасы болып табылады (n' ҳәм k шамаларының орнына n ҳәм l шамалары жазылған). Бул аңлатпада $L_{n+1}^{2l+1}(\rho)$ арқалы Чебышев-Легарр бириктирилген полиномы (5-қосымшаны қараңыз), ал C арқалы ықтыярлы константа белгиленген.

Бөлекшениң радиаллықтолқын функциясы

$$R(\rho) = \frac{\chi(\rho)}{\rho} = \frac{\nu(\rho)u(\rho)}{\rho} = C\rho^{l+1}\exp\left(-\frac{\rho}{2}\right)L_{n+1}^{2l+1}(\rho)$$

түринде жазылады ямаса r өзгериўшисине қайтып келсек төмендегидей аңлатпаны жазамыз:

$$R_{nl}(r) = C\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right)L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right).$$

$R_{nl}(r)$ ушын жазылған бул теңликте биз радиаллық толқын функциясын "n" ҳәм " l " индекслери менен тәмийинледик ҳәм усындай жоллар менен бул функцияның бас ҳәм азимуталлық квантлық санлардан ғәрезлигин айқын түрде көрсеттик.

C константасын

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = \\ = |C|^2 \int_0^\infty \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{2l} \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right)\left\{L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)\right\}^2 r^2 dr = 1 \qquad (9.19)$$

радиаллық толқын функциясы ушын нормировка шәртинен табамыз. (Қ5.6)-интегралдың мәнисин пайдаланып (9.19)-аңлатпадан C константасының

$$C = \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{3/2}$$

шамасына тең екенлигин аңсат табыўға болады.

Толқын функциясынын мүйешлик бөлиминиң шар функциясының жәрдеминде анықланатуғынлығын есапқа алсақ толқын функциясы ушын ең ақырғы

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \\ = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) L_{n+1}^{2l+1}\left(-\frac{2Zr}{na_0}\right) Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (9.20)$$

аңлатпасын аламыз.

Алынған толқын функциялары менен (9.18)- энергияның мәнислери водород атомынын (бул жағдайда $Z = 1$) ҳәм водород тәризли атомлардың (He^+ ($Z = 2$), Li^{++} ($Z = 2$) сыяқлы ионластырылған атомлардың) ҳалларын тәрийиплейди.

9.4-мәселе. Водород атомының тийкарғы ҳалы ушын

1) электрон менен ядро арасындағы ең итимал қашықлықты;

2) электронға тәсир етиўши Rулон күшиниң модулиниң орташа мәнисин;

3) ядро майданындағы электронның потенциал энергиясының орташа мәнисин табыңыз.

Шешими. (9.20)-аңлатпадан тийкарғы ҳалда турған водород атомынын толқын функциясынын былайыншажазылатуғынлығы келип шығады

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right).$$

1. Бөлекшенин r ден $r + dr$ шамасына шекемги областта жайласыўының итималлығы

$$dP = 4\pi\left|\psi_{1,0,0}(r)\right|^2 r^2 dr$$

аңлатпасының жәрдеминде анықланады. Бундай жағдайда электрон менен ядро арасындағы ең итимал қашықлық $4\pi\left|\psi_{1,0,0}(r)\right|^2 r^2$ функциясының максимумына сәйкес келеди. Бул функцияны r бойынша дифференциаллап ҳәм алынған туўындыны нолге теңлестирип $r_{itim} = a_0$ екенлигине ийе боламыз.

2. Электронға тәсир етиўши $F(r) = e^2/r^2$ Кулон күшиниң орташа мәниси төмендеги формуланын жәрдеминде анықланады:

$$\langle F(r)\rangle = 4\pi e^2 \int_0^\infty \psi_{1,0,0}^2(r) dr =$$

$$= \frac{4e^2}{a_0^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2}{a_0} r\right) dr = \frac{2e^2}{a_0^2}.$$

Ядроның майданындағы электронның потенциаллық энергиясы болған $U(r) = -\frac{e^2}{r}$ шамасының орташа мәниси тап сол сыяқлы жоллар менен табылады:

$$\langle U\rangle = -4\pi e^2 \int_0^\infty \psi_{1,0,0}^2(r)\, r\, dr =$$

$$= -\frac{4e^2}{a_0^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{2}{a_0} r\right) r\, dr = -\frac{e^2}{a_0^2}.$$

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Бөлекше сфералық симметрияға ийе болған потенциал майданда стационар ҳалда жайласқан. Бул ҳалға сәйкес келиўши толқын функциясы

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)\frac{1}{r}$$

түрине ийе. $\langle r \rangle$ шамасын табыңыз.

2. Водород тәризли атом ушын номери *n* болған қәддинин айныўынын еселиги k ны табыңыз.

3. Водород тәризли атом ушын бас квантлық санының мәниси $n = 2$ болған ҳаллардың толқын функцияларынын анық түрлерин табыңыз. Бул функциялардың 1 ге нормировкаланғанлығын көрсетиңиз.

4. Водород тәризли атомдағы $2s$ ҳалы ушын r^k ($k = -1, 0, 1, 2, \ldots$) шамаларының орташа мәнисин табыңыз.

Өз бетинше шешиў ушын усынылған мәселелердиң жуўаплары

1. $\langle r \rangle = \frac{a}{2}$.
2. $k = n^2$.
3.

$$\begin{cases} \psi_{2,0,0}(\mathbf{r}) = R_{2,0}(r)Y_{0,0}(\theta,\varphi), \\ \psi_{2,1,1}(\mathbf{r}) = R_{2,1}(r)Y_{1,1}(\theta,\varphi), \\ \psi_{2,1,0}(\mathbf{r}) = R_{2,1}(r)Y_{1,0}(\theta,\varphi), \\ \psi_{2,1,-1}(\mathbf{r}) = R_{2,1}(r)Y_{1,-1}(\theta,\varphi). \end{cases}$$

$$R_{2,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)\left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right),$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right)\left(\frac{Zr}{2a_0}\right).$$

4.

$$\frac{1}{8}\left(\frac{a_0}{Z}\right)^n (k^2 + 3k + 4)(k+2)!$$

10. Көринислер теориясының элементлери

Методикалық көрсетпелер: Биз усы параграфқа шекем квантлық системасының ҳалын координаталарға ғәрезли болған толқын функциясы пайдаланып тәрийипледик. Бирақ бундай тәрийиплеў ҳалдың тәрийиплеўдин жалғыз усылы болып табылмайды. Көпшилик жағдайларда мәселелерде системаның импульсиниң энергиясының ямаса басқа да физикалық шаманың белгили бир мәнисике ийе болыўының итималлығын табыў зәрүрлиги пайда болады. Бундай жағдайда толқын функциясын бул физикалық шаманың функциясы сыпатында қараған қолайлы болады. Толқын функциясынын модулиниң квадраты бизге усы физикалық шама бойынша итималлықтың тарқалыўын береди.

$\psi(\mathbf{r})$ толқын функциясы менен тәрийипленетуғын бөлекшениң ҳалы қараймыз.

Бул жерде $\mathbf{r}$ арқалы бөлекшениң радиус-векторы белгиленген. Мейли $\hat{F}$ арқалы дискрет спектрге ийе (анықлық ушын дисктер спектрге ийе ҳалды қараймыз) ҳәм $\psi(\mathbf{r})$ толқын функциясы анықланған кеңисликте ҳәрекет ететуғын Эрмит операторы белгиленген болсын. Бул оператордың меншикли функцияларын $\varphi_{F_n}(\mathbf{r})$ арқалы белгилейик. F_n арқалы $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери белгиленген. Эрмит операторының (3.5)-қәсийетине сәйкес $\psi(\mathbf{r})$ толқын функциясын $\varphi_{F_n}(\mathbf{r})$ функциясы бойынша қатарға жайыўға болады:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n a_{F_n}\varphi_{F_n}(\mathbf{r}).$$

Бул аңлатпадағы қатарға жайыў коэффициентлери

$$a_{F_n} \equiv a(F_n) = \int \varphi^*_{F_n}(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{10.1}$$

$a(F_n)$ қатарға жайыў коэффициентлерин F көринисиндеги толқын функциясы деп қараўға болады. Ал $\psi(\mathbf{r})$ толқын функциясы болса координаталық көринистеги ямаса $\mathbf{r}$ көринисиндеги толқын функциясы болып табылады. F көринисиндеги толқын функциясынын модулинин квадраты болған $\left|a_{F_n}\right|^2$ шамасы F_n шамасынын бақланыў итималлығына тең.

Жоқарыда айтылғанлардың барлығы үзликсиз спектрге ийе $\hat{F}$ операторы ушын да дурыс. Атап айтқанда [(3.6)-формулаға қараңыз]

$$\psi(\mathbf{r}) = \int a_F\varphi_F(\mathbf{r})dF,$$

$$a_F \equiv a(F) = \int \varphi^*_F(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{10.2}$$

Бул формулада $\varphi_F(\mathbf{r})$ арқалы $\hat{F}$ операторының меншикли функциялары белгиленгең, ал $a(F)$ болса F көринисиндеги толқын функциясы. $|a(F)|^2$ шамасы F шамасынын итималлығынын тығызлығын береди.

Солай етип бөлекшениң бир ҳалын сайлап алынған көриниске байланыслы ҳәр қыйлы толқын функциясы менен тәрийиплениўи мүмкин екен. Бундай жағдайда бир көринистеги толқын функциясының түри қәлеген басқа көринистеги сәйкес толқын функциясының түрин бир мәнисли түрде анықлай алады [(10.1)- ҳәм (10.2)-формулалар]. Ең әҳмийетли көринислер қатарына импульслик ($F = \mathbf{p}$), энергиялық ($F = E$) ҳәм импульс моментиниң z қураўшысының көринислери киреди.

$\hat{F}$ операторының дискрет спектри жағдайында F көринисиндеги толқын функциясы $a(F_n)$ дискрет өзгериўшиге ғәрезли болғанлықтан (2.2)-функциясының скаляр көбеймесин тапқанда q үзликсиз өзгериўшиси бойынша интеграллаў F бойынша суммалаў менен алмастырылыўы керек, яғный $a(F_n)$ ҳәм $b(F_n)$ функцияларының скаляр көбеймеси мынадай қатнас пенен анықланады:

$$\langle a|b\rangle = \sum_n a^*(F_n)b(F_n). \tag{10.3}$$

10.1-мәселе. Бөлекшениң координатасы операторы болған $\hat{x}$ операторының x_0 меншикли мәнисине сәйкес келиўши координаталық көринистеги меншикли функциясы $\psi_{x_0} = \delta(x - x_0)$ түринде жазылған (3.3-мәселеге қараңыз). $\hat{x}$ операторының импульслик көринистеги меншикли функциясы болған $a_{x_0}(p_x)$ функциясын табыңыз.

Шешими. Координаталық көринистеги $\hat{p}_x$ операторының меншикли функциясы (3.2-мәселеге қараңыз)

$$\varphi_{x_0}(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$$

түринде жазылады. Усы аңлатпаны есапқа алған ҳалда (10.2)-формуладан мынаны аламыз:

$$a_{x_0}(p_x) = \int \varphi^*_{p_x}(x)\psi_{x_0}(x)dx =$$
$$= \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}\delta(x - x_0)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x_0}.$$

10.2-мәселе. p_x^0 меншикли мәнисине сәйкес келетуғын координаталық көринистеги бөлекшениң импульсиниң проекциясы операторы $\hat{p}_x$ тың меншикли функциясы

$$\psi_{p_x^0}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_x^0 x}$$

түринде жазылған (3.2-мәселеге қараңыз). $\hat{p}_x$ операторының импульслик көринистеги меншикли функциясы болған $a_{p_x^0}(p_x)$ функциясын табыңыз.

Шешими.

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip_x x}$$

теңлиги орынлы болғанлықтан (10.2)-формула бойынша мынаны табамыз:

$$a_{p_x^0}(p_x) = \int \varphi^*_{p_x}(x)\psi_{p_x^0}(x)dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x - p_x^0)x}dx = \delta(p_x - p_x^0).$$

Кейинги теңликте (Қ3.8)- ҳәм (Қ3.9)-формулалар есапқа алынған.

10.3-мәселе. Системаның ҳалы координаталық көринистеги

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}\exp\left(ik_0 x - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2\right),$$
$$k_0, a = const$$

толқын функциясы менен тәрийипленеди (толқын пакети). Бул ҳал ушын импульслик көринистеги толқын функциясын ҳәм итималлықтың импульс бойынша тарқалыўын табыңыз.

Шешими. (10.2)-аңлатпаға сәйкес импульслик көринистеги толқын пакетин тәрийиплеўши $a(p_x)$ функциясын аламыз:

$$a(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}\exp\left(ik_0 x - \frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_x x\right)dx\,. \qquad (10.4)$$

Экспонентаның көрсеткишиндеги толық квадратты айырып алып:

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + 2i\left(\frac{p_x}{\hbar} - k_0\right)x = \left(\frac{x}{a} + i\left(\frac{p_x}{\hbar} - k_0\right)a\right)^2 + \left(\frac{p_x}{\hbar} - k_0\right)^2 a^2$$

ҳәм

$$\eta = \frac{x}{a} + i\left(\frac{p_x}{\hbar} - k_0\right)a$$

алмастырыўын орынлап (10.4)-аңлатпаны төмендегидей түрде қайта жазамыз:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{p_x}{\hbar}-k_0\right)^2 a^2\right)\frac{a}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}\int d\eta\, e^{-\frac{1}{2}\eta^2}.$$

Буннан кейин

$$\int d\eta\, e^{-\frac{1}{2}\eta^2} = \sqrt{2\pi}$$

екенлигин итибарға алып (2-қосымшаға қараңыз ямаса бул интегралды Mathematica универсаллық компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде есаплаңыз) импульслик көринистеги толқын функциясының ең ақырғы түрин

$$a(p_x) = \frac{\sqrt{x_0}}{\sqrt{\hbar\sqrt{\pi}}}$$

ҳәм импульс ушын итималлықтың тарқалыўының Гаусс тарқалыўын аламыз:

$$|a(p_x)|^2 = \frac{x_0}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left(-\left(\frac{p}{\hbar}-k_0\right)^2 a^2\right).$$

Базы бир методикалық көрсетпелер: Көринис өзгертилгенде толқын функциясы менен бир қатарда физикалық шамалардың операторларының түрлери де өзгериске ушырайды. Усы ўақытқа шекем биз операторларды координаталардың функциялары, яғный $\mathbf{r}$ көринисинде қарадық. Мейли координаталық көринисте $\widehat{K}$ операторы берилген болсын. Бул оператор $\psi(\mathbf{r})$ функциясына тәсир етип $\tilde{\psi}(\mathbf{r})$ функциясын беретуғын болсын:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}) = \widehat{K}\psi(\mathbf{r}) \tag{10.5}$$

F көринисиндеги $\widehat{K}$ операторының түрин табайық. Дәслеп $\widehat{K}$ операторын дискрет спектрге ийе деп есаплайық. Ал оның меншикли функцияларын бурынғысынша $\varphi_{F_n}(\mathbf{r})$ арқалы белгилеймиз. (10.5)-аңлатпаның еки бөлимин де $\varphi_{F_n}^*(\mathbf{r})$ функциясына көбейтемиз ҳәм барлық көлем $d\mathbf{r}$ бойынша интеграллаймыз:

$$\int \varphi_{F_n}^*(\mathbf{r})\,\tilde{\psi}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int \varphi_{F_n}^*(\mathbf{r})\widehat{K}\,\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{10.6}$$

(10.1)-аңлатпаға сәйкес бул теңлемениң шеп тәрепинде $\widehat{K}$ операторының тәсиринде пайда болған F көринисиндеги $\tilde{a}(F_n)$ функциясы тур.

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_m a(F_m)\varphi_{F_m}(\mathbf{r})$$

қатарға жайыўын пайдаланып (10.6)-аңлатпаның оң тәрепин былайынша жазамыз:

$$\int \varphi_{F_n}^*(\mathbf{r})\widehat{K}\,\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \sum_m a(F_m)\int \varphi_{F_n}^*(\mathbf{r})\widehat{K}\,\varphi_{F_m}(\mathbf{r}).$$

Бундай жағдайда мынаған ийе боламыз:

$$\tilde{a}(F_n) = \sum_m a(F_m)\int \varphi_{F_n}^*(\mathbf{r})\widehat{K}\,\varphi_{F_m}(\mathbf{r}).$$

ямаса

$$\int \varphi_{F_n}^*(\mathbf{r})\widehat{K}\,\varphi_{F_m}(\mathbf{r}) \equiv \langle\varphi_{F_n}|\widehat{K}|\varphi_{F_m}\rangle$$

түринде жазылатуғын Дирак белгилеўин пайдаланып төмендегини аламыз:

$$\tilde{a}(F_n) = \sum_m \langle\varphi_{F_n}|\widehat{K}|\varphi_{F_m}\rangle a(F_m). \tag{10.7}$$

Бул теңлик F көринисиндеги (10.5)-теңликтиң өзи болып табылады. Солай етип барлық $\langle\varphi_{F_n}|\widehat{K}|\varphi_{F_m}\rangle$ шамаларын билиў арқалы биз (10.7)-формуланы пайдаланып берилген $a(F_n)$ бойынша $\tilde{a}(F_n)$ толқын функциясын таба аламыз. Сонлықтан барлық $\langle\varphi_{F_n}|\widehat{K}|\varphi_{F_m}\rangle$ шамаларының жыйнағын F көринисиндеги $\widehat{K}$ операторы деп қарай аламыз.

$\langle\varphi_{F_n}|\widehat{K}|\varphi_{F_m}\rangle \equiv K_{mn}$, $\tilde{a}(F_n) \equiv \tilde{a}_n$, $a(F_m) \equiv a_m$ белгилеўлерин киргиземиз Бундай жағдайда (10.7)-теңлик мынадай түрге ийе болады:

$$\tilde{a}_n = \sum_m K_{mn} a_m \qquad (10.8)$$

$\widehat{K}$ операторын көрсететуғын шамаларының жыйнағын квадрат матрица түринде жазылыў мүмкин (улыўма айтқанда қатарлары менен бағаналарының саны шексиз көп болған матрица түринде):

$$\widehat{K} = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1m} & \dots \\ K_{21} & K_{22} & \dots & K_{2m} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{n1} & K_{n2} & \dots & K_{nm} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \qquad (10.9)$$

шамаларының мәниси матрицаның элементлери (матрицалық элементлер) болып табылады. Ҳәр бир матрицалық элемент еки индекске ийе. Бириншиси қатардың, ал екиншиси бағананың номери болып табылады.

Матрицалық жазыўда $\tilde{a}_n$ ҳәм a_n шамаларының жыйнағын вектор-бағаналар түринде жазыў керек, яғный:

$$\tilde{a}_n = \begin{pmatrix} \tilde{a}_1 \\ \tilde{a}_2 \\ \dots \\ \tilde{a}_n \\ \dots \end{pmatrix} \qquad\qquad a_n = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \\ \dots \end{pmatrix}$$

Бундай жағдайда (10.8)-аңлатпа мына түрге енеди:

$$\begin{pmatrix} \tilde{a}_1 \\ \tilde{a}_2 \\ \dots \\ \tilde{a}_n \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1m} & \dots \\ K_{21} & K_{22} & \dots & K_{2m} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{n1} & K_{n2} & \dots & K_{nm} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \\ \dots \end{pmatrix}.$$

Ал, a_n ҳәм b_n шамаларының (10.3)-скаляр көбеймесин былайынша жазыўға болады:

$$\langle a|b\rangle = (a_1^* \quad a_2^* \quad \dots \quad a_n^* \quad \dots) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \\ \dots \end{pmatrix}.$$

10.4-мәселе. F көринисиндеги $\hat{F}$ операторы диагоналлық матрица түрине ийе. Бундай жағдайда усы матрицаның барлық диагоналлық элементлериниң $\hat{F}$ операторының меншикли мәнислери екенлигин көрсетиңиз.

Шешими. Мейли ψ_n функциясы координаталық көринистеги $\hat{F}$ операторының меншикли функциялары, ал F_m болса оның меншикли мәнислери болсын. Бундай жағдайда матрицалық элемент

$$F_{nm} = \langle\varphi_n|\hat{F}|\varphi_m\rangle = \langle\varphi_n|F_m|\varphi_m\rangle = F_m\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = F_m\delta_{mn}.$$

10.5-мәселе. Бир өлшемли гармоникалық осциллятордың Гамильтон, координата ҳәм импульс операторларының матрицасын энергиялық көринисте жазыңыз.

Шешими. Гармоникалық осциллятордың координаталық көринистеги меншикли функцияларын ψ_n арқалы жазамыз, яғный

$$\widehat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \tag{10.10}$$

Бул теңлемеде E_n арқалы осциллятордың энергиясының мәниси белгиленген. (10.10)-аңлатпаны есапқа алып мынаны табамыз:

$$H_{nm} = \langle\psi_n|\widehat{H}|\psi_m\rangle = \langle\psi_n|E_m\psi_m\rangle = E_m\langle\psi_n|\psi_m\rangle E_m\delta_{nm}.$$

Усының менен бирге

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

теңлиги орынлы болғанлықтан (7.1-мәселеге қараңыз) Гамильтон операторы энергиялық көринисте шексиз диагоналлық матрица түрине ийе болады:

$$\widehat{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \ddots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Гармоникалық осциллятор ушын энергия қәддилеринин нумераңиясы $n = 0$ мәнисинен басланатуғын болғанлықтан Гамильтон операторы матрицасының биринши қатары менен биринши бағанасы $n = 0, m = 0$ шамаларына сәйкес келеди.

Енди координата менен импульс операторларын табамыз. (7.6)-мәселеде координата менен импульстиң матрицалық элементлери ушын аңлатпалар алынған еди:

$$\langle\psi_{n+1}|x|\psi_n\rangle = x_0\sqrt{\frac{n+1}{2}}, \langle\psi_{n-1}|x|\psi_n\rangle = x_0\sqrt{\frac{n}{2}},$$

$$\langle\psi_{n+1}|\hat{p}_x|\psi_n\rangle = ip_0\sqrt{\frac{n+1}{2}}, \langle\psi_{n-1}|\hat{p}_x|\psi_n\rangle = -ip_0\sqrt{\frac{n}{2}}.$$

Бул қатнаслардың жәрдеминде мыналарды аламыз:

$$\hat{x} = x_0 \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \ddots & \sqrt{\frac{n+1}{2}} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \frac{\sqrt{n}}{2} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

ҳәм

$$\hat{p}_x = p_0 \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -i & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & i & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & i\sqrt{\frac{n+1}{2}} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & i\sqrt{\frac{n}{2}} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

10.6-мәселе. Орбиталық квантлық саны $l = 1$ болған жағдай ушын L_z көринисиндеги $\hat{L}_z$ операторын жазыңыз.

Шешими. $l = 1$ болған жағдайда $\hat{L}_z$ операторының тек үш мәниси болады. Олар $Y_{1,-1}, Y_{1,0}$ ҳәм $Y_{1,1}$ мәнислери болып табылады. $\hat{L}_z$ операторының бул функцияларға тәсири мынаған алып келинеди (8-параграф):

$$\hat{L}_z Y_{1,-1} = -\hbar Y_{1,-1},$$
$$\hat{L}_z Y_{1,0} = 0 Y_{1,0},$$
$$\hat{L}_z Y_{1,1} = +\hbar Y_{1,1}.$$

Бул қатнасларды ҳәм шар функциялардын ортогоналлық шәртин есапқа алып

$$\langle Y_{l,n} | l_z | Y_{l,m} \rangle = i\hbar \delta_{nm}; n, m = -1, 0, 1$$

екенлигин табамыз.

Солай етип $\hat{L}_z$ операторы

$$\hat{L}_z = \begin{pmatrix} -\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +\hbar \end{pmatrix}$$

матрицасы түринде жазылады екен.

Егер $\hat{L}_z$ операторы үзликсиз спектрге ийе болса онда F көринисиндеги $\hat{K}$ операторы ушын (10.7)-аңлатпаға уқсас аңлатпа дурыс болады:

$$\tilde{a}(F) = \int K(F, F')a(F')dF'. \tag{10.11}$$

Бул аңлатпада

$$K(F, F') = \langle \varphi_F | \hat{K} | \varphi_{F'} \rangle \equiv \int \varphi_F^*(\mathbf{r})\hat{K}\,\varphi_{F'}(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \tag{10.12}$$

Солай етип биз бул жерде интеграллық түрлендириўге ийе боламыз. $K(F, F')$ интеграллық түрлендириўдиң ядросы деп аталады. $K(F, F')$ функциясын бериў менен F көринисиндеги $\hat{K}$ операторы анықланады.

10.7-мәселе. Импульслик көринистеги $\hat{p}_x$ импульс операторының түрин анықлаңыз.

Шешими. (10.12)-аңлатпаға сәйкес импульслик көринистеги $\hat{p}_x$ операторының ядросы

$$\langle \varphi_{p_x} | \hat{p}_x | \varphi_{p'_x} \rangle = \langle \varphi_{p_x} | \hat{p}_x \varphi_{p'_x} \rangle = p'_x \langle \varphi_{p_x} | \varphi_{p'_x} \rangle = p'_x \delta(p_x - p'_x) \tag{10.13}$$

түринде жазылады. Бул аңлатпада φ_{p_x} арқалы координаталық көринисиндеги $\hat{p}_x$ операторының меншикли функциялары белгиленген. Солай етип p_x көринисиндеги $\hat{p}_x$ операторын (10.13)-аңлатпа менен бериўге болады екен.

Енди (10.11)-формуладан пайдаланамыз ҳәм мынаған ийе боламыз

$$\tilde{a}(p_x) = \int p_x \delta(p_x - p'_x)a(p'_x)dp'_x$$

ямаса интегралды есаплағаннан кейин

$$\tilde{a}(p_x) = p_x\, a(p_x)$$

теңлигине ийе боламыз.

Анықлама бойынша $\tilde{a}(p_x) = \hat{p}_x\, a(p_x)$ теңлиги орынланатуғын болғанлықтан импульстиң проекциясы операторы $\hat{p}_x$ импульслик көринисте тек p_x шамасына көбейтиўге алып келинеди екен.

10.8-мәселе. Импульслик көринистеги $\hat{x}$ координата операторының көринисин табыңыз.

Шешими. Буннан алдыңғы мәселедеги жағдайдағыдай, импульслик көринистеги координата операторы $\hat{x}$ тың ядросы:

$$\langle \varphi_{p_x} | \hat{x} | \varphi_{p'_x} \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x}\, x\, e^{\frac{i}{\hbar}p'_x x} dx =$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} x\, e^{-\frac{i}{\hbar}(p'_x - p_x)x} dx = \tag{10.14}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'_x} \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} x\, e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x - p'_x)x} dx \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p'_x} \delta(p_x - p'_x).$$

Биз бул жерде $\hat{p}_x$ операторының координаталық көринисинде

$$\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$$

түрине ийе екенлигин есапқа алдық (3.2-мәселеге қараңыз) ҳәм δ-функцияның (Қ3.8) ҳәм (Қ3.9) қәсийетлеринен пайдаландық. Буннан кейин (10.11)-формуладан

$$\tilde{a}(p_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial p'_x} \delta(p'_x - p_x)\right) a(p'_x) dp'_x \tag{10.15}$$

екенлигин табамыз. (10.15)-аңлатпаны бөлеклерге бөлип интеграллап

$$\begin{gathered} \tilde{a}(p_x) = -i\hbar a(p'_x)\delta(p'_x - p_x)|_{-\infty}^{+\infty} + \\ +i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p'_x - p_x) \frac{\partial}{\partial p'_x} a(p'_x) dp'_x \end{gathered} \tag{10.16}$$

аңлатпасын аламыз. δ-функцияның өзгешеликлерине байланыслы (10.16)-аңлатпадағы орнына қойыўлар нолди береди. Нәтийжеде

$$\tilde{a}(p_x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'_x}\, a(p'_x)$$

аңлатпасын аламыз.

Солай етип импульслик көринистеги $\hat{x}$ операторы (10.14)-аңлатпа түринде ямаса $i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$ түринде бериледи екен.

Өз бетинше шешиў ушын мәселелер

1. Водород тәризли атомның тийкарғы ҳалының толқын функциясын импульслик көринисте жазыңыз.

2. Эрмит операторы $\widehat{K}$ ушын

$$K_{nm} = K^*_{mn}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлиллеңиз.

3. Операторлардың $\hat{K}\hat{L}$ көбеймесиниң $(KL)_{nm}$ матрицалық элементлериниң

$$(KL)_{nm} = \sum_k K_{nl}L_{km}$$

теңлиги менен анықланатуғынлығын дәлиллеңиз.

4. Гармоникалық осциллятордың энергиялық көринистеги $\hat{x}$ ҳәм $\hat{p}$ операторларының матрицаларын пайдаланып (10.5-мәселеге қараңыз) $\hat{x}^2$ ҳәм $\hat{p}^2$ операторларын табыңыз.

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \hat{H}$$

теңлигиниң орынлы екенлигин тексерип көриңиз.

5. Гармоникалық осциллятордың энергиялық көринисиндеги

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i\frac{\hat{p}}{p_0}\right), \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i\frac{\hat{p}}{p_0}\right)$$

операторларын жазыңыз.

6. Орбиталық моменти ушын $l = 1$ теңлиги орынланатуғын система ушын L_z көринисиндеги $\hat{L}_z$ ҳәм $\hat{L}_y$ операторларын жазыңыз.

7. Орбиталық моменти ушын $l = 1$ теңлиги орынланатуғын система ушын L_z көринисиндеги $\hat{L}_+$ ҳәм $\hat{L}_-$ операторларын жазыңыз.

Өз бетинше шешиў ушын усынылған мәселелердиң жуўаплары

1.

$$a_{1,0,0}(p) = \frac{8}{\pi}\left(\frac{a_0}{2\hbar Z}\right)^{3/2}\frac{1}{(1+(a_0p/\hbar Z)^2)^2}, a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

4.

$$\hat{x}^2 = \frac{x_0^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \dots & \dots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \ddots & 0 & \sqrt{(n+1)(n+2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 2n+1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \sqrt{n(n-1)} & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{p}^2 = \frac{p_0^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 3 & 0 & -\sqrt{6} & \dots & \dots \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & \ddots & 0 & -\sqrt{(n+1)(n+2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 2n+1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & -\sqrt{n(n-1)} & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

5.

$$\hat{a}=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0&\dots\\0&0&\sqrt{2}&0&0&\dots\\0&0&0&\sqrt{3}&0&\dots\\0&0&0&0&\dots&\dots\\0&0&0&0&0&n+1\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix},$$

$$\hat{a}^{+}=\begin{pmatrix}0&0&0&0&0&\dots\\1&0&0&0&0&\dots\\0&\sqrt{2}&0&0&0&\dots\\0&0&\sqrt{3}&0&0&\dots\\0&0&0&\vdots&\ddots&n+1\\0&0&0&0&\sqrt{n}&\ddots\end{pmatrix},$$

$$n=0,1,2,\dots$$

6.

$$\hat{L}_x=\begin{pmatrix}0&-\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar&0\\-\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar&0&-\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\\0&-\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar&0\end{pmatrix},\hat{L}_y=\begin{pmatrix}0&-\frac{\sqrt{2}}{2}i\hbar&0\\\frac{\sqrt{2}}{2}i\hbar&0&-\frac{\sqrt{2}}{2}i\hbar\\0&\frac{\sqrt{2}}{2}i\hbar&0\end{pmatrix}.$$

7.

$$\hat{L}_-=\begin{pmatrix}0&-\sqrt{2}\hbar&0\\0&0&-\sqrt{2}\hbar\\0&0&0\end{pmatrix},\hat{L}_+=\begin{pmatrix}0&0&0\\-\sqrt{2}\hbar&0&0\\0&-\sqrt{2}\hbar&0\end{pmatrix}.$$

11. Микробөлекшениң спини

Методикалық көрсетпелер: Бир қатар эксперименталлық фактлер микробөлекшелерде өзлерине тән ишки еркинлик дәрежесиниң бар екенлигин көрсетеди. Бул еркинлик дәрежесине микробөлекшениң меншикли импульс моменти сәйкес келеди. Бул еркинлик дәрежеси микробөлекшениң кеңисликтеги қозғалысы менен байланыслы емес ҳәм ол спин атамасын алды. Микробөлекшениң спини оның массасы, заряды ҳ.т.б. қәсийетлери сыяқлы ең тийкарғы ҳәм ажыралмас қәсийетлериниң бири болып табылады. Спин терең квантлық, ралятивистлик характерге ийе. Классикалық механикаға өткенде ол нолге айланады. Бөлекшениң спини вектор болып табылады. Импульс моменти сыяқлы спинди бизлер ħ бирликлеринде өлшеймиз. Квантлық механиканың улыўмалық принңиплерине сәйкес спинге сәйкес Эрмит операторы жазылады. Оны $\hat{\mathbf{S}}$ арқалы белгилеймиз. Спин операторы ушын коммутациялық қатнаслар импульс моменти операторы ушын дүзилген коммутациялық қатнаслардың түрине ийе болады (9-параграфқа қараңыз). Мысалы

$$\left[\hat{\mathbf{S}}^2,\hat{S}_z\right]=0. \tag{11.1}$$

Бирақ импульс моментиниң операторынан спин операторының өзгешелиги соннан ибарат, ол әдеттеги $\mathbf{r}$ координаталарына тәсир етпейди, ал спинлик өзгериўшилер деп аталатуғын "айрықша" өзгериўшилерге тәсир етеди. Оларды σ арқалы белгилеймиз. Бөлекшениң $\psi(\mathbf{r},\sigma)$ толқын функциясын төмендегидей түрде көрсетиўге болады деп болжаймыз:

$$\psi(\mathbf{r},\sigma)=\varphi(\mathbf{r})\chi(\sigma).$$

Бул аңлатпадағы $\varphi(\mathbf{r})$ функциясын координаталық толқын функциясы, ал $\chi(\sigma)$ толқын функциясын спинлик толқын функциясы деп атайды. Бул параграфта бизди тек спинлик толқын функциясы қызықтырады.

(11.1)-аңлатпадан спинниң квадратының меншикли мәнислери менен оның z көшерине түсирилген проекциясының бир ўақытта өлшениўиниң мүмкин екенлигин аңғарамыз. $\hat{\mathbf{S}}$ операторының меншикли мәнислери $\hbar^2 s(s+1)$ шамасына тең. Бул аңлатпадағы s шамасы қәлеген пүтин сан да (нол де) ямаса ярым пүтин сан да бола алады. Бундай жағдайда спинниң проекциясы (биз қарап атырған жағдайда $\hat{S}_z$ операторының меншикли мәнислери) $\hat{S}_z=\hbar m_s$ аңлатпасының жәрдеминде есапланады. Бул жерде m_s шамасының мәнислери $s,s-1,\dots,-s$ түринде жазылады (барлығы $2s+1$ дана мәнис). m_s шамасы магнит спинлик квантлық саны деп аталады. Мысалы электроң протон ҳәм нейтрон ушын $s=\frac{1}{2}$ ҳәм ол тек $\pm\frac{1}{2}$ болған еки мәнисти қабыл ете алады.

Спин операторын S_z көринисинде жазған қолайлы. Бундай жағдайда $\chi(\sigma)$ толқын функциясының аргументи орнында $\hat{S}_z$ операторының меншикли мәнислерин номерлейтуғын индекс турады (10-параграфқа қараңыз). Бул индекс сыпатында m_s магнит спинлик квантлық санын пайдаланыў қабыл етилген. Солай етип спинлик өзгериўши σ дискрет мәнислерге ийе болады екен ҳәм берилген s тиң мәнисинде $s,s-1,\dots,-s$ мәнислерин қабыл етеди.

Спини $s=\frac{1}{2}$ болған бөлекшени қараймыз. Бул жағдайда спинниң проекциясының бақланатуғын мәнислериниң саны екиге тең болатуғын болғанлықтан бөлекшениң спинлик толқын функциясы $\chi\left(\frac{1}{2}\right)$ ҳәм $\chi\left(-\frac{1}{2}\right)$ еки қураўшысына тең болады. Буннан кейин қолайлы болыўы ушын бул қураўшыларды $a\equiv\chi\left(\frac{1}{2}\right)$ ҳәм $b\equiv\chi\left(-\frac{1}{2}\right)$ арқалы белгилеймиз. Бундай еки қураўшыдан туратуғын толқын функциясын $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ түриндеги матрица-бағана (спинор) түринде жазыў мүмкин. Спинор ушын қойылатуғын стандарт шәртлер мыналардан ибарат: оның элементлери бир мәнисли ҳәм шекли болыўы керек.

$s=\frac{1}{2}$ ушын S_z көринисиндеги спин операторы төмендегидей түрге ийе:

$$\hat{\mathbf{S}}=\frac{\hbar}{\mathbf{2}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}.$$

Бул аңлатпада σ арқалы қураўшылары

$$\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.$$

түринде жазылатуғын вектор белгиленген. $\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$ матрицалары Паули матрицалары деп аталады.

11.1-мәселе. Спини $s=\frac{1}{2}$ болған бөлекше ушын $a)\ \hat{S}_x, b)\ \hat{S}_y, c)\ \hat{S}_z$ операторларының меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын табыңыз.

Шешими: a) $\hat{S}_x$ операторының меншикли мәнислерин S_x арқалы белгилеймиз, ал оның меншикли функцияларын $\chi_{S_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ түринде жазамыз. Биз излеп атырған шамаларды

$$\hat{S}_x \chi_{S_x} = S_x \chi_{S_x}:$$
$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

ямаса

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

Буннан S_x тың $\pm\frac{\hbar}{2}$ шамасына тең екенлиги келип шығады. Бундай жағдайда $S_x = \frac{\hbar}{2}$ теңлиги орынланғанда $a = b, S_x = -\frac{\hbar}{2}$ теңлиги орынланғанда $a = -b$.

Нормировка шәртинен мынаған ийе боламыз:

$$(a^* \; b^*)\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |a|^2 + |b|^2 = 2|a|^2 = 1$$

ҳәм, усыған сәйкес, $|a| = |b| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ теңликлериниң орынлы екенлигин көремиз.

Солай етип, $S_x = \hbar/2$ ҳәм $S_x = -\hbar/2$ меншикли мәнислери ушын $\hat{S}_x$ операторының мынадай меншикли функцияларына ийе боламыз:

$$\chi_{S_x=\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ ҳәм } \chi_{S_x=-\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Тап усындай жоллар менен төмендегилерге ийе боламыз:

$$b)\; \chi_{S_x=\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \text{ ҳәм } \chi_{S_x=-\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix},$$
$$c)\; \chi_{S_x=\frac{\hbar}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ ҳәм } \chi_{S_x=-\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

11.2-мәселе. $\mathbf{n}$ бирлик векторы менен берилетуғын ықтыярлы бағытқа түсирилген спинниң проекциясы операторының түрин анықлаңыз.

Шешими. $\mathbf{n}$ бирлик векторы менен берилетуғын ықтыярлы бағытқа түсирилген спинниң проекциясы операторын $\hat{S}_n = \mathbf{n}\hat{\mathbf{S}}$ скаляр көбейме түринде жазыўға болады. Бул скаляр көбеймеде $\mathbf{n} = \{n_x, n_y, n_z\} = \{\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta\}$ ҳәм $\hat{\mathbf{S}} = \{\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z\}$. Бундай жағдайда

$$\hat{S}_n = \frac{1}{2}\hbar\left(\sin\theta\cos\varphi\,\hat{\sigma}_x + \sin\theta\sin\varphi\,\hat{\sigma}_y + \cos\theta\,\hat{\sigma}_z\right) =$$
$$= \frac{1}{2}\hbar[\begin{pmatrix} 0 & \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\cos\varphi & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i\sin\theta\sin\varphi \\ i\sin\theta\cos\varphi & 0 \end{pmatrix} +$$
$$+ \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 \\ 0 & \cos\theta \end{pmatrix}] =$$
$$= \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

11.3-мәселе. Спини $s = 1/2$ болған бөлекше спинниң проекциясы белгили бир $S_x = \hbar/2$ мәнисине тең болған ҳалда турыпты. Егер z ҳәм z' көшерлери арасындағы мүйеш θ шамасына тең болса спинниң z' көшерине түсирилген проекциясының мүмкин болған мәнислерин табыңыз.

Шешими: Өткен мәселеге сәйкес оператор

$$\hat{S}_{z'} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}.$$

$S_z = \frac{\hbar}{2}$ мәнисине тең болған бөлекшениң спинлик толқын функциясы [11.1-мәселедеги (c) пунктты қараңыз] былайынша жазылады:

$$\chi_{S_z=\frac{\hbar}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Анықламасы бойынша z' көшери бағытындағы спинниң орташа мәниси мынаған тең:

$$\langle S_{z'} \rangle = \left\langle \chi_{S_z=\frac{\hbar}{2}} \middle| S_{z'} \middle| \chi_{S_z=\frac{\hbar}{2}} \right\rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\theta \\ e^{i\varphi}\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\cos\theta.$$

Екинши тәрептен

$$\langle S_{z'} \rangle = \frac{\hbar}{2} w_+ + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) w_-.$$

Бул аңлатпада w_+ ҳәм w_- арқалы z' көшери бағытындағы ҳәм бул көшердиң бағытына қарама-қарсы бағыттағы спинниң проекцияларының итималлықлары белгиленген.

Соңғы теңлемелерден

$$w_+ + w_- = \cos\theta \qquad (11.2)$$

теңлиги алынады. Усының менен бир қатарда

$$w_+ + w_- = 1 \qquad (11.3)$$

теңлигиниң орынланатуғынлығы өз-өзинен түсиникли. (11.2)- ҳәм (11.3)-аңлатпалардан $w_+ = \cos^2\frac{\theta}{2}$ ҳәм $w_- = \sin^2\frac{\theta}{2}$ екенлигин аламыз.

11.4-мәселе. z көшери бағытында бағытланған бир текли стационар магнит майданында жайласқан спини $s = 1/2$ болған бөлекше ушын гамильтонианның спинлик бөлими $\hat{H} = -\mu\mathcal{H}\hat{\sigma}_z$ ~ түрине ийе. Бул аңлатпада $\mathcal{H}$ арқалы магнит майданының кернеўлиги белгиленгең ал бөлекшениң магнит моменти $\mu = const$. Спинлик толқын функциясының ўақыттан ғәрезлигин ҳәм усындай бөлекшениң спин векторының қураўшыларының орташа мәнисин табыңыз.

Шешими. Спинлик толқын функциясы

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

ушын жазылған

$$i\hbar\frac{\partial\chi(t)}{\partial t} = \hat{H}\chi(t)$$

Шредингер теңлемеси бул жағдайда мынадай теңлемелерге алып келинеди:

$$\frac{d}{dt}a(t) = i\omega a(t), \frac{d}{dt}b(t) = i\omega b(t).$$

Бул теңлемеде $\omega = \mu\mathcal{H}/\hbar$. Буннан

$$a(t) = a(0)e^{i\omega t}, b(t) = b(0)e^{-i\omega t}$$

екенлигин табамыз. Бул аңлатпада $a(0)$ менен $b(0)$ шамалары баслынғыш шәртлерден табылады. Соның менен бирге

$$\langle\chi(t)|\chi(t)\rangle = (a^*(t) \quad b^*(t))\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = |a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1$$

теңликлери толқын функциясының нормировка шәртинен шығады.

Орташа мәниси:

$$\langle s_x(t)\rangle = \left\langle \chi(t) \middle| \frac{\hbar}{2}\sigma_x \middle| \chi(t) \right\rangle =$$
$$\frac{\hbar}{2}(a^*(t) \quad b^*(t))\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} =$$
$$= b^*(t)a(t) + a^*(t)b(t) = \frac{\hbar}{2}b^*(0)a(0)e^{2i\omega t} +$$
$$+\frac{\hbar}{2}a^*(0)b(0)e^{-2i\omega t} = \qquad (11.4)$$
$$= \frac{\hbar}{2}\big(b^*(0)a(0) + a^*(0)b(0)\big)\cos 2\omega t +$$
$$+i\frac{\hbar}{2}\big(b^*(0)a(0) + a^*(0)b(0)\big)\sin 2\omega t.$$

Буннан кейин

$$\langle s_x(0)\rangle = \left\langle \chi(0) \middle| \frac{\hbar}{2}\sigma_x \middle| \chi(0) \right\rangle =$$
$$\frac{\hbar}{2}(a^*(0) \quad b^*(0))\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} =$$
$$= \frac{\hbar}{2}\big(b^*(0)a(0) + a^*(0)b(0)\big)$$

ҳәм

$$\langle s_y(0)\rangle = \left\langle \chi(0) \middle| \frac{\hbar}{2}\sigma_y \middle| \chi(0) \right\rangle =$$
$$\frac{\hbar}{2}(a^*(0) \quad b^*(0))\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} =$$
$$= i\frac{\hbar}{2}\big(b^*(0)a(0) + a^*(0)b(0)\big)$$

екенлигин есапқа алып (11.4)-теңлемени былайынша көширип жазамыз:

$$\langle s_x(t)\rangle = \langle s_x(0)\rangle\cos 2\omega t + \langle s_y(0)\rangle\sin 2\omega t \qquad (11.5)$$

(11.5)-аңлатпаны келтирип шығарғандай жоллар менен

$$\langle s_y(t)\rangle = \langle s_y(0)\rangle\cos 2\omega t - \langle s_x(0)\rangle\sin 2\omega t,$$
$$\langle s_z(t)\rangle = \langle s_z(0)\rangle = const$$

екенлигине ийе боламыз.

11.5-мәселе. Еки бөлекшеден туратуғын система бар. Олардың ҳалының спинлериниң қосындысы болған $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ шамасы $s = 1$ (триплетлик ҳал) ҳәм $s = 0$ (синглетлик ҳал) шамаларына тең. Усы еки бөлекшениң спинлериниң скаляр көбеймеси болған $\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2$ шамасын есаплаңыз.

Шешими. Қосынды спин операторы мынадай түрге ийе болады:

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2.$$

Теңликтиң еки тәрепин де квадратқа көтерип ҳәм $[\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] = 0$ коммутаторының нолге тең екенлигин есапқа алып (себеби $\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2$ операторлары ҳәр қыйлы бөлекшелердиң спинлик координаталарына тәсир етеди) мынаған ийе боламыз:

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2.$$

Буннан

$$\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2\right)$$

ямаса меншикли мәнислерге өтип

$$\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{\hbar^2}{2}\{s(s+1) - s_1(s_1+1) - s_2(s_2+1)\} = \\ = \frac{\hbar^2}{2}\left\{s(s+1) - \frac{3}{2}\right\} \qquad (11.6)$$

аңлатпасын аламыз. (11.6)-аңлатпаға сәйкес триплетлик ҳалда ($s = 1$)

$$\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{\hbar^2}{4},$$

ал синглетлик ҳалда ($s = 0$)

$$\hat{\mathbf{S}}_1\hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{3\hbar^2}{4}.$$

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Төмендегидей спинлик толқын функцияларын нормировкалаңыз:

$$a)\ \chi = A\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, (a, b \neq 0);$$

$$b)\ \chi = A\begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix}.$$

2. Паули матрицаларының анық түринен пайдаланып төмендеги аңлатпалардың дурыслығын тексериңиз:

$$a)\ \left[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\right] = 2i\hat{\sigma}_z,$$

$$b)\ \hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = 2\delta_{ij}\hat{1}.$$

$$c)\ \hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 = 3\hat{1}.$$

Бул теңликлерде $i, j = x, y, z$.

3. $(\mathbf{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^n$ аңлатпасын әпиуайыластырыңыз. Бул аңлатпада n арқалы пүтин оң сан, $\mathbf{a}$ арқалы ҳақыйқый санлық вектор белгиленген.

4. $\hat{F} = a + \mathbf{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ операторының меншикли мәнислерин табыңыз. Бул аңлатпадағы a ҳақыйқый сан ал $\mathbf{b}$ болса ҳақыйқый санлық вектор.

5. Водород атомы z көшери бойлап бағытланған кернеўлиги $\mathcal{H}$ болған магнит майданында жайластырылған. Электрон ушын $\frac{d\hat{s}_x}{dt}$ ҳәм $\frac{d\hat{s}_y}{dt}$ туўындыларын табыңыз.

6. $\hbar/2$ спинниң проекциясының ықтыярлы бағытқа түсирилген проекциясын табыңыз.

Өз бетинше шешиў ушын берилген мәселелердиң жуўаплары

1.

$$a)\frac{1}{\sqrt{|a|^2 + |b|^2}}; b)\ A = \frac{1}{5}.$$

3. Жуп n лер ушын a^n, ал тақ n лер ушын $(\mathbf{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})$.

4. $F_{1,2} = a \pm b$.

5.

$$\frac{d\hat{s}_x}{dt} = \mu\mathcal{H}\hat{s}_y, \frac{d\hat{s}_y}{dt} = -\mu\mathcal{H}\hat{s}_x.$$

μ арқалы электронның магнит моменти белгиленген.

6. $\hbar^2/4$.

12. Стационар уйытқыў теориясы. Азғынған жағдай

Методикалық көрсетпелер: Тек ғана әпиўайы системалар ушын ғана Шредингер теңлемесин дәл аналитикалық жоллар менен шешиў ҳәм стационар ҳаллардың энергиясын анықлаў мүмкин (мысалы шексиз терең туўры мүйешли потенциаллық шуқыр, сызықлы гармоникалық осциллятор, водород атомы ҳәм басқалар). Көпшилик жағдайларда гамильтонианның меншикли мәнислерин ҳәм меншикли функцияларын табыў ушын есаплаўдың жуўық усылларын (методларын) пайдаланыў зәрүрлиги пайда болады. Бундай жуўық усыллардың бири уйытқыў теориясы болып табылады. Бул усылды биз қарап атырған система дәл шешимлерге ийе системадан айырмасы гамильтонианға қосылатуғын мәниси жүдә киши болған қосылыўшы түринде көрсетилетуғын жағдайларда пайдаланыўға болады:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}.$$

Бул аңлатпада $\widehat{H}_0$ арқалы дәл шешим алынатуғын мәселениң гамильтонианы, ал $\widehat{V}$ арқалы "уйытқыў" деп аталатуғын шамасы киши болған қосылыўшы (уйытқыў операторы) белгиленген. Уйытқыў теориясы стационар уйытқыў теориясы ҳәм стационар емес уйытқыў теориясы болып екиге бөлинеди. Стационар уйытқыў теориясы (ямаса стационар ҳаллар ушын уйытқыў теориясы) ўақытқа байланыслы емес уйытқыў менен ис алып барады ($\widehat{H}_0$ гамильтонианын да ўақытқа анықғәрезли емес деп есаплайды). Стационар емес уйытқыў теориясы (ямаса турақлылардың вариация усылы) уйытқыў операторы ўақыттан анық түрде ғәрезли болған системаларды қарайды.

Мейли гамильтонианы $\widehat{H}_0$ болған "уйытқыў" жоқ система ушын теңлемениң дәл шешими белгили болсын. Бул теңлемени былайынша жазайық:

$$\widehat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}. \tag{12.1}$$

Стационар уйытқыў теориясының алдында турған мәселе белгили болған энергияның ҳәм $\psi_n^{(0)}$ толқын функциясы арқалы $\widehat{H}$ толық гамильтонианының энергиясы менен толқын функцияларын анықлаў болып табылады. Бул параграфта энергиясының спектри дискрет, ал $\widehat{H}_0$ гамильтонианының меншикли мәнислери айнымаған системалар қаралады.

Егер $\widehat{V}$ тәсири киши болса, онда $\widehat{H}$ операторының E_n спектри ҳәм ψ_n толқын функциялары $E_n^{(0)}$ менен $\psi_n^{(0)}$ шамаларынан аз айырмаға ийе болады. Бундай жағдайда уйытқыўға ийе (12.1)- Шредингер теңлемесиниң шешимлерин

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)}, \tag{12.2}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \psi_n^{(k)} \tag{12.3}$$

түринде излейди.

Бул аңлатпаларда $E_n^{(1)}$ ҳәм $\psi_n^{(1)}$ арқалы шамасы уйытқыў $\hat{V}$ ның шамасына барабар болған дүзетиўлер, $E_n^{(2)}$ менен $\psi_n^{(2)}$ шамалары уйытқыў бойынша квадратлық дүзетиўлер, ал $E_n^{(k)}$ менен $\psi_n^{(k)}$ арқалы кишилиги бойынша k-тәртипли дүзетиў берилген. Уйытқыўлар теориясы усылы избе-из жақынласыўлар усылы болып табылады: дәслеп шамасы киши тәсирдиң шамасы менен барабар болған дүзетиўлерди есаплайды (биринши тәртипли дүзетиў), буннан кейин киши тәсир бойынша квадратлық дүзетиўди, буннан кейин кублық ҳәм тағы басқа да тәртипли дүзетиўлерди өз ишине алады. Төменде келтирилген айқын мысалларда бул дүзетиўлер хаққында гэп етиледи.

12.1-мәселе. Уйытқыў теориясының толқын функциясына ҳәм энергияның мәнисине қосатуғын биринши тәртипли дүзетиўлердиң улыўмалық түрин табыңыз.

Шешими. (12.2)-аңлатпаны (энергияның меншикли мәнислерин) (12.3)-аңлатпаны (меншикли функцияларды) Шредингердин стационар теңлемесине қойып төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$\begin{gathered}(\hat{H}_0+\hat{V})(\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}+\psi_n^{(2)}+\cdots)= \\ =(E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+\cdots)(\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}+\psi_n^{(2)}+\cdots).\end{gathered} \quad (12.4)$$

(12.4)-теңлемеде кишилик (кишкенелик) тәртиби биринши ағзадан үлкен емес ағзалар менен, яғный $\hat{H}_0$, $\hat{V}$, $E_n^{(0)}, E_n^{(1)}, \psi_n^{(0)}, \psi_n^{(1)}$ ағзалары менен шекленемиз. Бундай жағдайда (12.4)-теңлемениң орнына мынадай теңлемени аламыз:

$$\begin{gathered}\hat{H}_0\psi_n^{(0)}+\hat{V}\psi_n^{(0)}+\hat{H}_0\psi_n^{(1)}+\hat{V}\psi_n^{(1)}= \\ =E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}+E_n^{(0)}\psi_n^{(1)}+E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}.\end{gathered}$$

$\hat{V}\psi_n^{(1)}$ ҳәм $E_n^{(1)}\psi_n^{(1)}$ көбеймелеринин кишилиги бойынша биринши тәртипли еки көбейтиўшиден туратуғынлығын атап өтемиз. Сонлықтан бул көбеймелер кишилиги бойынша екинши тәртипли ағзалар болып табылады ҳәм оларды жазбаймыз. Уйытқыў болмаған жағдайдағы система ушын (12.1)-Шредингер теңлемесин де есапқа алып мынадай теңлемеге ийе боламыз:

$$(\hat{H}_0-E_n^{(0)})\psi_n^{(1)}=-(\hat{V}-E_n^{(1)})\psi_n^{(0)}. \quad (12.5)$$

толқын функциясын киши тәсир болмаған жағдайдағы H о операторының меншикли функциялары бойынша қатар түринде излеймиз:

$$\psi_n^{(1)}=\sum_k C_{nk}\,\psi_k^{(0)}. \quad (12.6)$$

(12.6)-теңлемени (12.5)-теңлемеге қоямыз, алынған теңликти $\psi_k^{(0)*}$ ға көбейтемиз ҳәм барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз. Нәтийжеде (12.5)-теңлеме мына түрге енеди:

$$(E_m^{(0)}-E_n^{(0)})C_{nm}=E_n^{(1)}\delta_{mn}-V_{mn}. \quad (12.7)$$

Буннан $m=n$ болған жағдайда

$$E_n^{(1)}=V_{mn}. \quad (12.8)$$

Ал $m\neq n$ болған жағдай ушын

$$C_{mn}=\frac{V_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} \quad (12.9)$$

аңлатпасын аламыз. Бул аңлатпада

$$V_{mn} = \langle \psi_m^{(0)} | \hat{V} | \psi_n^{(0)} \rangle = \langle m | \hat{V} | n \rangle = \int \psi_m^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq$$

шамасы $\hat{V}$ операторының киши тәсир болмаған жағдайдағы толқын функциялары бойынша матрицалық элемент болып табылады ($\hat{V}$ операторын Эрмит операторы деп есаплаймыз, яғный $\hat{V} = V_{mn}^*$). $E_n^{(1)}$ шамасының $\psi_n^{(0)}$ ҳалындағы уйтқыўдың тәсирдиң орташа мәнисине тең екенлигин атап өтемиз.

Бирақ (12.7)-теңлеме C_{nn} коэффициентин табыўға мүмкиншилик бермейди. Сонлықтан бул коэффициентти биз $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}$ функциясының нормировка шәртинен табамыз:

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 =$$

$$= \left\langle \psi_n^{(0)} + C_{nn}\psi_n^{(0)} + \sum_k{}' C_{nk}\psi_n^{(0)} \middle| \psi_n^{(0)} + C_{nn}\psi_n^{(0)} + \sum_m{}' C_{nm}\psi_m^{(0)} \right\rangle =$$

$$= |1 + C_{nn}|^2 \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle + (1 + C_{nn}) \sum_k{}' C_{nk}^* \langle \psi_k^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle +$$

$$+ (1 + C_{nn}^*) \sum_m{}' C_{nm}^* \langle \psi_n^{(0)} | \psi_m^{(0)} \rangle.$$

Бул аңлатпада сумма белгиси қасындағы штрих $m = n$ ямаса $k = n$ теңликлери орынланатуғын қосылыўшы есапқа алмаў керек екенлигин аңғартады. $\psi_n^{(0)}$ функцияларының ортонормировкаланған екенлигине байланыслы екинши ҳәм үшинши ағзалардағы барлық суммалар нолге тең болады. Буннан

$$|1 + C_{nn}|^2 = 1 + C_{nn} + C_{nn}^* + |C_{nn}|^2 = 1$$

аңлатпасын аламыз. Кишилиги бойынша биринши тәртипли ағзалар менен шекленип $|C_{nn}|^2$ ағзасын есапқа алмаўға болады. Солай етип

$$\psi_n^{(0)} = \sum_m{}' \frac{V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}. \tag{12.9}$$

Тап сондай жоллар менен энергия ушын

$$E_n^{(2)} = \sum_m{}' \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{12.10}$$

ҳәм толқын функциясына $\psi_n^{(2)}$ функциясын жайыўдағы екинши тәртипли дүзетиўдеги $C_{nm}^{(2)}$ коэффициентлери ушын

$$C_{nm}^{(2)} = \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left(\sum_k{}' \frac{V_{mk}V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} - \sum_k{}' \frac{V_{nn}V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \right)$$

түринде жазылатуғын екинши тәртипли дүзетиўлерин алыў мүмкин.

Киши тәсир теориясын пайдаланыўдың шәртин барлық $m \neq n$ мәнислери ушын

$$|V_{nm}| \ll \left| E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right|$$

түриндеги анықламаны жаза аламыз. Демек киши тәсир операторы $\hat{V}$ ның матрицасының диагоналлық емес элементлериниң мәнислери уйтқыў жоқ жағдайдағы энергияның мәнислериниң айырмасынан киши болыўы керек.

12.2-мәселе. Тийкарғы ҳалдың энергиясы ушын екинши тәртипли дүзетиўдиң барлықўақытта да терис мәниске ийе екенлигин көрсетиңиз.

Шешими. Тийкарғы ҳалдың энергиясының мәниси минималлық. Сонлықтан *n* индекси тийкарғы ҳалға сәйкес келетуғын мәниске тең болса, онда (12.10)-аңлатпадағы барлық қосылыўшыларда $E_n^{(0)} < E_m^{(0)}$ теңсизлиги орын алады.

Сонлықтан тийкарғы ҳалдың энергиясы ушын екинши тәртипли дүзетиўдиң мәнисиниң барлық ўақытта да терис екенлигин көремиз.

12.3-мәселе. Бир өлшемли шексиз терең потенциал шуқырда жайласқан зарядланған бөлекше ушын x көшери бағытында бағытланған бир текли электр майданындағы энергия қәддилериниң киши тәсир теориясындағы биринши еки тәртипли жылжыўларын (аўысыўларын) табыңыз

Шешими. Уйытқыў операторы бир текли электр майданындағы бөлекшениң потенциаллық энергиясы менен анықланады:

$$\hat{V} = -e\mathcal{E}x.$$

Бул жағдай ушын тәсир жоқ болған жағдайдағы гамильтонианның толқын функциялары болған $\psi_n^{(0)}$ функцияларының түрин билип (6.1-мәселеге қараңыз), (12.8)-формула бойынша $E_n^{(1)}$ шамаларын анықлай аламыз:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = -e\mathcal{E}\langle\psi_n^{(0)}|\hat{x}|\psi_n^{(0)}\rangle =$$
$$= -e\mathcal{E}\frac{2}{a}\int\limits_0^a \sin^2\left[\frac{\pi(n+1)}{a}x\right]xdx = -e\mathcal{E}\frac{2}{a}.$$

Бул аңлатпада $n = 0, 1, 2, \ldots$ $E_n^{(1)}$ шамасын (12.10)-формула бойынша анықлаймыз. Буның ушын дәслеп $n \neq 0$ болған жағдай ушын координатаның матрицалық элементлерин есаплаймыз:

$$x_{0n} = \frac{2}{a}\int\limits_0^a \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi(n+1)}{a}x\right)xdx =$$
$$= \frac{4[(-1)^n - 1]}{\pi^2 n^2 (n+2)^2}(n+1)a.$$

Бул аңлатпа n ниң тек тақ мәнислеринде ғана нолге тең емес. Буннан кейин шуқырдағы бөлекшениң тәсир болмаған жағдайдағы энергия спектриниң түрин есапқа алып тийкарғы қәддиге қосылатуғын екинши жақынласыў дүзетиўди табамыз:

$$E_n^{(1)} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^2\mathcal{E}^2 x_{0n}^2}{\left[\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n+1)^2\right]} =$$
$$= \frac{512ma^4e^2\mathcal{E}^2}{\pi^6\hbar^2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(k+1)^2}{2(k+1)^5(2k+3)^5}.$$

12.4-мәселе. Бөлекше ықтыярлы формаға ийе бир өлшемли потенциал шуқырдың түбине жақын жайласқан. Бөлекшениң энергиясының жуўық мәнисин табыңыз.

Шешими. Мейли бөлекше потенциал энергиясы $U(x)$ болған потенциал шуқырда жайласқан болсын. Координаталар басын потенциал энергияның минимумына қоямыз ҳәм $x = 0$ ноқатта потенциал энергия нолге тең болатуғындай етип есапты баслаймыз. Бундай жағдайда потенциал энергияны қатарға жайып мына аңлатпаға ийе боламыз:

$$U(x) = U(0) + xU'(0) + \frac{x^2}{2}U''(0) + \frac{x^3}{3!}U'''(0) +$$
$$+\frac{x^4}{4!}U''''^{(0)} + \cdots$$

Бул аңлатпадағы штрих x бойынша дифференциаллаўды аңғартады. $U(0) = U'^{(0)} = 0$ екенин есапқа аламыз ҳәм

$$U''(0) = k, \frac{U'''(0)}{3!} = \varepsilon_1, \frac{U''''(0)}{4!} = \varepsilon_2$$

белгилеўлерин киргиземиз. Бөлекше потенциал шуқырдаң түбиниң жанында жайласқан болғанлықтан $U(x)$ потенциал энергия ушын жайылған қатардың биринши ағзалары менен шекленемиз. Кишилиги бойынша төртинши тәртип пенен шекленип төмендегидей аңлатпаны аламыз:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} + \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4. \qquad (12.2)$$

Бул аңлатпадағы биринши ағза гармоникалық осциллятордың потенциал энергиясы болып табылады. $U(x) = \frac{kx^2}{2}$ потенциал майданында қозғалыўшы бөлекшениң энергиясының мәнислерин ҳәм толқын функцияларын 7.1-мәселеде тапқан едик ҳәм олар сәйкес мынаған тең болып шықты:

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$E_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\, x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right).$$

(12.12)-аңлатпаның қалған ағзаларын уйытқыў сыпатында қараймыз

$$V = \varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4.$$

Киши тәсир теориясының биринши тәртибинде бөлекшениң қәддилериниң аўысыўы (жылжыўы) диагоналлықматрицалықэлементлер менен анықланады:

$$E_n^{(1)} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\varepsilon_1 x^3 + \varepsilon_2 x^4)\left|\psi_n^{(0)}(x)\right|^2 dx$$

ҳәм оны аңсат есаплаўға болады. Буның ушын интеграл астындағы аңлатпаны (Қ4.12)-аңлатпаға сәйкес алмастырыў ҳәм бөлеклерге бөлип n рет интеграллыўымыз керек. Нәтийжеде мынаған ийе боламыз:

$$E_n^{(1)} = \frac{\varepsilon_2 x_0^4}{2^n n!\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}[\xi^4 H_n(\xi)]d\xi.$$

Бул жерде қолайлылық ушын $\xi = \frac{x}{x_0}$ өзгериўшисине өттик. n рет интеграллаў керек болатуғын интегралдың астындағы $n + 4$ дәрежесине ийе көп ағзалы

$$\xi^4 H_n(\xi) = 2^n\left(\xi^{n+4} - \frac{1}{2}\frac{n}{2}\xi^{n+2} + \frac{3}{4}\frac{n}{4}\xi^n + \cdots\right)$$

ағзаларынан басланады ҳәм сонлықтан

$$\frac{d^n}{d\xi^n}[\xi^4 H_n(\xi)] = 2\left(\frac{(n+4)!}{4!}\xi^4 - \frac{(n+2)!}{2!}\frac{1}{2}\frac{n}{2}\xi^2 + n!\frac{3}{4}\frac{n}{4}\right).$$

Интегралдың мәнислерин есапқа алып (2-қосымшаға қараңыз)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{1}{2}\sqrt{\pi},$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{3}{2}\sqrt{\pi}$$

теңликлерине ийе боламыз ҳәм ең ақырында мынадай аңлатпаны аламыз:

$$E_n^{(1)} = \frac{3x_0^4}{4}\varepsilon_0(2n^2 + 2n + 1).$$

Уйытқыў теориясының екинши тәртибинде $\varepsilon_1 x^3$ ден дүзетиўдиң кишилик тәртиби $\varepsilon_2 x^4$ шамасынан берилетуғын дүзетиўдиң кишилик тәртиби менен барабар болады. Сонлықтан киши тәсир теориясының екинши тәртибинде $\varepsilon_1 x^3$ шамасынан берилетуғын дүзетиўди есаплаймыз. (2.10)-аңлатпаға сәйкес

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \middle| x^3 \middle| \psi_{n+1}^{(0)} \right\rangle = 3x_0^3 \left(\frac{n+1}{2}\right)^{\frac{3}{2}},$$

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \middle| x^3 \middle| \psi_{n-1}^{(0)} \right\rangle = 3x_0^3 \left(\frac{n}{2}\right)^{\frac{3}{2}},$$

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \middle| x^3 \middle| \psi_{n+3}^{(0)} \right\rangle = x_0^3 \sqrt{\frac{1}{8}(n+3)(n+2)(n+1)},$$

$$\left\langle \psi_n^{(0)} \middle| x^3 \middle| \psi_{n-3}^{(0)} \right\rangle = x_0^3 \sqrt{\frac{1}{8}(n-1)(n-2)}.$$

Матрицалық элементлердиң есапланған мәнислерин (12.13)-аңлатпаға қойсақ төмендеги аңлатпаға ийе боламыз:

$$E_n^{(2)} = -\frac{\varepsilon_1^2}{\hbar\omega}\frac{15}{4}x_0^6\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right).$$

Солай етип бөлекшениң энергиясының жуўық мәниси ушын аңлатпа аламыз (биз $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ екенлигин есапқа аламыз)

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) +$$
$$+\frac{3}{4}\varepsilon_2\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2(2n^2 + 2n + 1) - \frac{\varepsilon_1^2}{\hbar\omega}\frac{15}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right).$$

12.5-мәселе. Ох көшери бағытындағы кернеўлилиги $\mathcal{E}$ ге тең бир текли электр майданында жайласқан жийилиги ω ға, массасы m ге, заряды e ге тең гармоникалық осциллятордың энергияларының биринши жоғалатуғын тәртиптеги жылжыўын ҳәм толқын функциясының өзгерисин анықлаңыз.

Шешими: Уйытқыў операторы осциллятордың бир текли электр майданындағы потенциал энергия менен анықланады:

$$\hat{V} = -e\mathcal{E}x$$

7.6-мәселениң нәтийжелерин есапқа алып матрицалық элементти былайынша жазамыз:

$$V_{mn} = -e\mathcal{E}\langle m|x|n\rangle = -e\mathcal{E}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{m,n-1}\right).$$

Демек уйытқыў теориясының биринши тәртиптеги дүзетиўи

$$E_n^{(1)} = -e\mathcal{E}V_{mn} = 0$$

шамасына тең. Уйытқыў теориясының екинши тәртиптеги дүзетиўи

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} =$$

$$= \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}\sum_{m\neq n}\frac{1}{n-m}\left(\sqrt{m}\delta_{m,n+1} + \sqrt{m+1}\delta_{m,n-1}\right)^2 = -\frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}.$$

(12.9)-формуланы есапқа алып толқын функцияларына берилетуғын биринши тәртипли дүзетиў мынаған тең болатуғынлығына исенемиз:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m\neq n}\frac{V_{mn}\psi_n^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} =$$

$$= -\frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\sum_{m\neq n}\frac{1}{n-m}\left(\sqrt{m}\delta_{m,n+1} + \sqrt{m+1}\delta_{m,n-1}\right)\psi_m^{(0)} =$$

$$= \frac{e\mathcal{E}}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}}\left(\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)} - \sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}\right).$$

(12.12)-формулаға сәйкес уйытқыў тәсир теориясын пайдаланыў ушын $\mathcal{E}$ майданы жүдә киши болыўы керек, яғный

$$\mathcal{E} \ll \frac{\sqrt{\hbar m\omega^3}}{e}.$$

3. Стационар уйытқыў теориясы. Азғынған жағдай

Методикалық көрсетпелер: Дискрет спектрге ийе системаның энергия қәддилери азғынған ҳәм олар жеткиликли дәрежеде жақын жайласқан жағдайды қараймыз. Сонлықтан уйытқыў операторы $\hat{V}$ ушын (12.11)-шәрт орынланбайды. Мысал ретинде g есе азғынған қәддини көрсетиўге болады ҳәм бундай жағдайда (12.9)- ҳәм (12.10)-аңлатпалардың бөлимлери нолге тең айланады. Пайда болатуғын қыйыншылықлардан қутылыў ушын толқын функциясы ноллик жақынласыўдың өзинде азғынған ҳалға ямаса бир бирине жақын жайласқан қәддилер системасына сәйкес келиўши уйытқымаған толқын функцияларының сызықлы комбинацияисы түринде излеймиз:

$$\psi^{(0)} = \sum_{m=1}^{g} c_m\psi_m^{(0)}. \tag{13.1}$$

Бул аңлатпада g арқалы азғынған қәддиниң еселиги ямаса қатар саны номери m индекси менен белгиленетуғын бир бирине жақын қәддилердиң саны белгиленген. $\psi_m^{(0)}$ арқалы болса энергияның азғынбаған $E_m^{(0)}$ қәддине сәйкес келиўши ҳәм

$$\hat{H}_0\psi_m^{(0)} = E_m^{(0)}\psi_m^{(0)} \tag{13.2}$$

Шредингер теңлемесин қанаатлардынатуғын толқын функциясы белгиленген.

Егер $\psi_m^{(0)}$ функциясы азғынған қәддиге сәйкес келетуғын болса, онда $E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = \cdots = E_m^{(0)}$. $\psi_m^{(0)}$ функциясын ортонормировкаланған деп есаплаймыз:

$$\int \psi_k^{(0)*}(\xi)\psi_k^{(0)}(\xi)d\xi = \delta_{km}. \tag{13.3}$$

(13.1)-қатардың коэффициентлери белгисиз ҳәм оларды анықлаў керек болады. Бул параграфтың алдындағы параграфтағы сыяқлы уйытқыў бар жағдайдағы

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\psi^0 = E\psi^0$$

теңлемесин шешиўимиз ҳәм бул теңлемедеги ψ^0 функциясының орнына (13.1)-қатарды қойыў керек. Буннан кейин алынған аңлатпаның оң ҳәм шеп тәреплерин $\psi_k^{(0)*}$ функциясына көбейтемиз ҳәм барлық конфигурацияланған кеңислик бойынша интеграллаймыз. Бундай жағдайда (13.2)- ҳәм (13.3)-аңлатпаларды есапқа алған ҳалда төмендеги аңлатпаны аламыз:

$$\sum_{m=1}^{g}\left[\left(E_m^{(0)} - E\right)\delta_{km} + V_{km}\right]c_m = 0\,, k = 1, 2, \dots, g. \tag{13.4}$$

Бул аңлатпада

$$V_{km} = \int \psi_k^{(0)*}(\xi)\hat{V}\psi_k^{(0)}(\xi)d\xi.$$

Алынған теңлемелер g дана белгисиз c_m коэффициентлерине ийе g дана теңлемелер системасы болып табылады. Егер

$$\det\left\|\left(E_m^{(0)} - E\right)\delta_{km} + V_{km}\right\| = 0 \tag{13.5}$$

детерминанты нолге тең болса (13.4)-теңлемелер системасы әпиўайы емес шешимге ийе болады (барлық c_m коэффициентлери бир ўақытта нолге тең емес). Бул теңлеме секуляр теңлеме деп аталады ҳәм уйытқыў бойынша биринши тәртипте энергияны анықлайды. (13.5)-аңлатпаның шеп тәрепи E ге қарата дәрежеси g ға тең көп ағзалы болып табылады. Улыўма жағдайда (13.5)-теңлеме g дана тубирге ийе болады (олардың ишинде еселиклери де болыўы мумкин).

Егер азғынбаған мәселеде $E^{(0)}$ қәдди g қайтара (есе) азғынған болса ҳәм (13.5)-теңлеме g дана ҳәр қыйлы тубирлерге ийе болса, онда $\hat{V}$ уйытқыўы азғыныўды толығы менен сапластырады. Егер (13.5)-теңлемениң тубирлериниң ишинде бир биринен путин сан есе аҳырмасы бар тубирлер бер болса, онда азғыныў толық сапластырылмайды.

(13.5)-теңлемелердиң ҳәр бир тубири ушын (13.4)-теңлемелер системасының c_m коэффициентлериниң жыйнағын көрсететугын әпиўайы емес шешимлери бар болады. Егер оларды

$$\sum_{m=1}^{g}|c_m|^2 = 1 \tag{13.6}$$

шәрти менен нормировкаласақ ҳәм (13.1)-қатарға қойсақ, онда E ушын нолинши жақынласыўдың дурыс функцияларын аламыз.

Уйытқыў теориясының екинши тәртипте энергияға қосылатуғын қосымтасын табыў ушын (13.5)-секулярлық теңлемедеги V_{km} элементин

$$V_{km}^{(2)} = \sum_i \frac{V_{ki}V_{im}}{E_m^{(0)} - E_i^{(0)}}$$

аңлатпасы менен алмастырыўымыз керек. Бул аңлападағы сумма бир бирине жақын жайласқан ҳалларға тарқалмайды (ямаса азғыныў бар жағдайда азғынған ҳалларға).

13.1-мәселе. Уйытқыў тәсир етпеген ҳаллардың базиси бойынша матрицалық элементлери белгили болған $\hat{V}$ уйытқыўының тәсириндеги бир бирине жақын жайласқан E_1 ҳәм $E_2 = E_1 + \Delta$ ($\Delta > 0$) энергия қәддилериниң өзгерислерин анықлаңыз. Нолинши жақынласыўдағы дурыс толқынлық функцияларды табыңыз.

Шешими: Мейли уйытқыў болмаған жағдайда энергияның E_1 қәддине Ψ_1, ал E_2 қәддине Ψ_2 толқын функциясы сәйкес келетуғын болсын. Уйытқыў бар болған жағдайда Шредингер теңлемесиниң шешимин

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \tag{13.7}$$

түринде излеймиз Бундай жағдайда (13.4)-теңликти есапқа алып төмендегидей теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{cases}(E_1 - E + V_{11})c_1 + V_{12}c_2 = 0,\\ V_{21}c_1 + (E_2 - E + V_{22})c_2 = 0.\end{cases} \tag{13.8}$$

Сәйкес

$$\begin{vmatrix} E_1 - E + V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & E_2 - E + V_{22}\end{vmatrix} = 0$$

секуляр теңлеме еки шешимге ийе болады:

$$E_{\pm} = \frac{E_1 + V_{11} + E_2 + V_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_2 + V_{22} - E_1 - V_{11}}{2}\right)^2 + |V_{12}|^2}. \tag{13.9}$$

Усы аңлатпадан $\hat{V} \to 0$ де: $E_+ \to E_2$, $E_- \to E_1$ нәтийжелерин аламыз.

Энергияның алынған мәнислерин (13.8)-системаға қойсақ c_1 ҳәм c_2 коэффициентлерин байланыстыратуғын аңлатпаны табамыз (тек биринши теңлемени шешиў жеткиликли):

$$c_{1\pm} = \frac{2V_{12}}{\Delta + V_{11} - V_{22} \mp \sqrt{(\Delta + V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}}c_{2\pm}. \tag{13.10}$$

c_1 ҳәм c_1 коэффициентлерин анықлаў ушын (13.10)-аңлатпаны

$$|c_{1\pm}|^2 + |c_{2\pm}|^2 = 1$$

нормировкалаў шәрти менен толықтырамыз.

Бундай жағдайда төмендегидей алгебралық теңлемени аламыз:

$$\left\{\frac{4\,|V_{12}|^2}{\Delta + V_{11} - V_{22} \mp \sqrt{(\Delta + V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}} + 1\right\}|c_{2\pm}|^2 = 1$$

Қурамалы емес есаплаўлар жүргизиўдиң нәтийжесинде С2 коэффициентин табамыз:

$$|c_{2\pm}| = \sqrt{\frac{\sqrt{(\Delta + V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \pm (\Delta + V_{11} - V_{22})}{2\sqrt{(\Delta + V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}}}.$$

Алынған нәтийжелерди $\hat{V}$ операторының диагоналлық ҳәм диагоналлық емес матрицалық элементлери ушын ҳәр қыйлы шеклик қатнаслар ушын таллаймыз. Төмендегидей жағдайларды қараймыз:

1) Үлкен диагоналлық матрицалық элементлер бар жағдай:

$$|V_{11}|, |V_{22}| \gg |V_{12}|;\ \ |V_{11}| \ll |\Delta + V_{22} - V_{11}|.$$

Бул қатнасларды есапқа алып (13.9)- ҳәм (13.7)-формулардың жәрдеминде уйытқыў бар жағдайдағы стационар ҳаллардың энергиясы ушын ноллик жақынласыўдағы дурыс функцияларды аламыз:

$$E_+ \approx E_2 + V_{22}, E_- \approx E_1 + V_{11};$$
$$\psi_+ \approx \psi_2, \qquad \psi_- \approx -\psi_1.$$

E_+ энергияға ийе ҳалда ψ_2 функциясы, ал E_- энергияға ийе ҳалда ψ_1 функциясы басым болады. Тап усындай нәтийжени уйытқыў теориясы биринши тәртиптеги азғынбағын қәддилер ушын да береди (бул тастыйықлаўдың дурыслығын студентлердиң өзлери де тексерип көриўге болады).

2) Үлкен диагоналлық емес матрицалық элементлер бар болған жағдай:

$$|V_{11}|, |V_{22}| \ll |V_{12}|; \;\; |V_{12}| \gg |\Delta + V_{22} - V_{11}|.$$

Буннан алдыңғы жағдайдағыдай (13.9)- ҳәм (13.7)-формулаларды пайдаланып төмендеги аңлатпаларды аламыз:

$$E_+ \approx \frac{1}{2}(E_1 + E_2) + |V_{12}|, E_- \approx \frac{1}{2}(E_1 + E_2) - |V_{12}|;$$
$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2 + \psi_1), \qquad \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2 - \psi_1).$$

Бул жағдайда диагоналлық емес күшли уйытқыўлар бир бирине жақын жайласқан қәддилердиң "жылысыўына" алып келеди. "Азғанбаған" ҳаллар "азғынған" қәддилердиң қәлиплесиўине бирдей үлес қосады.

Демек шеклик жағдайларды таллаў бир бирине жақын жайласқан қәддилер ушын уйытқыў теориясын оператордың матрицасында диагоналлық элементлер шамалары бойынша (бул шамалар қәддилер арасындағы қашықлықларға салыстырғанда әдеўир үлкен) диагоналлық элементлерден үлкен болғанда пайдаланыўға болады екен.

13.2-мәселе. Кернеўлиги $\mathcal{E}$ болған электр майданында жайласқан водород атомының биринши энергия қәдди ушын қосымша қәддилерге бөлиниўди ҳәм толқын функцияларын анықлаңыз (Штарк эффекти).

Шешими. Мейли водород атомына тәсир ететуғын сыртқы электр майданы z көшериниң бағытында бағынланған болсын. Бундай жағдайда электрон менен сыртқы электр майданының тәсирлесиўин тәрийиплейтуғын уйытқыў операторы төмендегидей түрге ийе болады:

$$\hat{V} = -e\mathcal{E}z = -e\mathcal{E}r\cos\theta. \qquad (13.1)$$

Бул оператордың матрицалық элементлери былайынша жазылады:

$$V_{nlm,nl'm'} = -\left\langle \psi_{nlm}^{(0)} \middle| -e\mathcal{E}r\cos\theta \middle| \psi_{nl'm'}^{(0)} \right\rangle =$$
$$= -e\mathcal{E}\int Y_{lm}^{*}Y_{l'm'}\cos\theta\sin\theta\, d\theta\, d\varphi \int_0^\infty R_{nl}R_{nl}r\cdot r^2 dr. \qquad (13.12)$$

Водород атомының тийкарғы ҳалы ушын биринши тәртипли Штарк эффектиниң болмайтуғынлығын атап өтемиз. Ҳақыйқатында да тийкарғы ҳал азғынбаған ҳал болғанлықтан $\psi_{1,0,0}^{(0)}$ функциясы дурыс функция болып табылады ҳәм усы жағдайға сәйкес мынаған ийе боламыз:

$$E_1^{(1)} = V_{100,100} = \left\langle \psi_{1,0,0}^{(0)} \middle| -e\mathcal{E}r\cos\theta \middle| \psi_{1,0,0}^{(0)} \right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{\pi a_0^3} \int \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) e\mathcal{E}r \cos\theta\, r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi = 0.$$

Водород атомының биринши қозған ҳалы ($n = 2$) төрт қайтара азғынған яғный E_2 энергиясы ушын төмендегидей функциялар сәйкес келеди:

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left(2 - \frac{r}{a_0}\right);$$
$$\psi_{211} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) r \exp(i\varphi) \sin\theta\,;$$
$$\psi_{210} = -\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) r \cos\theta\,; \tag{13.3}$$
$$\psi_{21-1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{5}{2}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) r \exp(i\varphi) \sin\theta.$$

(13.13)-функциялардың жәрдеминде алыныўы мүмкин болған 16 дана $V_{nlm,nl'm'}$ матрицалық элементлердиң $l \neq l'$ ҳәм $m \neq m'$ мәнислерине жуўап беретуғын тек екеўи ғана нолге тең емес. Буның дурыслығына тиккелей тексериў өткериў менен исениўге болады. Усының менен бирге төмендегидей көз-қарастан пайдаланыўға болады. $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ функциясының жуплығы l квант санының жуплығына сәйкес келетуғын болғанлықтан $\theta \to \pi - \theta$, $\varphi \to \varphi + \pi$ алмастырыўларында бул функция $(-1)^l$ шамасына көбейтиледи. $R_{nl}(r)$ радиаллық функциясы жуп функция болып табылады (r диң белгиси өзгергенде өзгериске ушырамайды). $\cos\theta$ функциясы жуп функция болып табылады. Демек (13.12)-аңлатпадағы интеграл белгиси астындағы функцияның жуплығы $l + l' + 1$ шамасына тең. Толық денелик мүйеш 4π шегинде мүйешлердиң тақ функциясын $d\Omega = \sin\theta\, d\theta d\varphi$ бойынша алынған интеграл нолге тең. Солай етип (13.12)-интеграл $l + l' + 1$ шамасының жуп мәнислеринде ғана, яғный $l \neq l'$ теңсизлиги ушын нолге тең емес. Ал $m \neq m'$ теңсизлиги орынланғанда (13.14)-аңлатпа

$$\int_0^{2\pi} \exp[i(m - m')\varphi]\, d\varphi = 0$$

көбейтиўшисине ийе болады. Демек тек $V_{200,210}$ ҳәм $V_{210,200}$ элементлери ғана нолге тең емес екен. Олардың мәниси мынадай:

$$V_{200,210} = V_{210,200} =$$
$$= \frac{1}{32\pi a_0^3} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \cos^2\theta\, eEr \cdot 2\pi r^2 \sin\theta\, d\theta dr =$$
$$= 3eEa_0.$$

Енди

$$\begin{vmatrix} 0 - E & -3e\mathcal{E}a_0 & & \\ -3e\mathcal{E}a_0 & 0 - E & & \\ & & 0 - E & \\ & & & 0 - E \end{vmatrix} \tag{13.14}$$

дүньялық (секуляр) теңлемесин жазамыз. Детерминатты ашып

$$(-E)^2\{(-E)^2 - (-3e\mathcal{E}a_0)^2\} = 0$$

теңлемесине ийе боламыз. Бул теңлемениң түбирлери

$$E_1 = 3e\mathcal{E}a_0, E_2 = -3e\mathcal{E}a_0, E_3 = E_3 = 0.$$

(13.14)-аңлатпаға E_1 түбирин қойып төмендегидей теңлемелер системасын аламыз:

$$\begin{cases} -3e\mathcal{E}a_0c_1 - 3e\mathcal{E}a_0c_2 = 0, \\ -3e\mathcal{E}a_0c_1 - 3e\mathcal{E}a_0c_2 = 0, \\ \qquad -3e\mathcal{E}a_0c_3 = 0, \\ \qquad -3e\mathcal{E}a_0c_4 = 0. \end{cases}$$

Бул теңлемелерден $c_1 = -c_2, c_3 = c_4 = 0$ екенлиги келип шығады. Солай етип (13.6)-аңлатпаны есапқа алсақ ноллик жақынласыўда $E_0 + E_1$ энергия қəддине

$$\psi_1 = c\left(\psi_{2,0,0}^{(0)} - \psi_{2,1,0}^{(0)}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{2,0,0}^{(0)} - \psi_{2,1,0}^{(0)}\right) =$$

$$= \frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left[2 - \frac{r}{a_0}(1 + \cos\theta)\right]$$

функциясы сəйкес келеди екен. Ал $E_0 + E_2$ қəддине сəйкес келиўши ψ_2 функциясын студентлердиң өзлериниң табыўын усынамыз.

(13.14)-аңлатпаға $E_3 = E_4 = 0$ түбирлериниң мəнислерин қойып $c_1 = c_2 = 0$ екенлигине ийе боламыз. Басқа коэффициентлер анық емес болып қалады. Сонлықтан

$$\psi_3 = \psi_{2,1,1}^0$$

ҳəм

$$\psi_4 = \psi_{2,1,-1}^0$$

теңликлери орын алады деп есаплаймыз. Алынған функциялардың жыйнағы $\psi_1 - \psi_4$ (13.11) уйытқыў операторы ушын нолинши жақынласыўдағы дурыс функцияларының системасын пайда етеди.

Демек $n = 2$ ге сəйкес келиўши төрт азғынған ҳалдың биринши жақынласыўда еки ҳал ҳəлсиз электр майданы тəсир еткенде өзгериске пүткиллей ушырамайды екен. ψ_1 ҳəм ψ_2 толқын функциялары менен тəрийипленетуғын еки басқа ҳал қосымша $E_1 = 3e\mathcal{E}a_0$ ҳəм $E_1 = -3e\mathcal{E}a_0$ энергияларына ийе болады. Бул алынған нəтийжелер водород атомының биринши қозған ҳалда моменти $3ea_0$ шамасына тең диполдиң хызметин атқаратуғынын көрсетеди. Бундай диполь сыртқы майданға параллель (биринши ҳал), сыртқы майданға антипараллель (екинши ҳал) ҳəм сыртқы майданға перпендикуляр ориентацияларға ийе болады (үшинши ҳəм төртинши ҳаллар).

Методикалық көрсетпелер: Азғынған ҳал ушын уйытқыў теориясының қолланылыўына ендиги мысал ретинде электронға уқсас, бирақ спини нолге тең микробөлекше ушын Зееман эффектин қараймыз. Зееман эффекти деп сырттан түсирилген магнит майданында турған атомлардың энергия қəддилериниң (ямаса спектр сызықларының) қосымша қəддилерге бөлиниўине айтамыз. Əпиўайы ҳəм қурамалы (аномаллық) Зееман эффектлери белгили. Биринши жағдайда бөлекше спинге ийе емес ҳəм магнит майданында бөлеклерге бөлинген спектр сызықлары триплет ямаса дублет болып табылады. Зееманның қурамалы эффекти ($s = 0$ болған жағдай) спектраллық сызықлардың бөлеклерге бөлиниўиниң шамасының g Линде факторына ғəрезлилиги менен түсиндириледи (буны спектроскопиялық бөлеклерге бөлиниў факторы деп атаймыз). Бундай жағдайда спектроскопиялық сызықлар үштен аслам қосымша бөлеклерге бөлинеди.

13.3-мәселе. Спинди есапқа алмай бир текли $\mathcal{H}$ магнит майданына жайластырылған водород атомы ушын уйытқыў теориясының биринши тәртибиндеги энергияға қосылатуғын дүзетиўдиң мәнисин табыңыз. Бөлекшениң массасы M ге тең.

Шешими: Ядро майданындағы бөлекшениң гамильтонианы былайынша жазылады:

$$\widehat{H}_0 = \frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2M} - \frac{e^2}{r}.$$

Бундай оператордың меншикли мәнислери (9.18)-аңлатпаның, ал меншикли функциялары (9.20)-аңлатпалардың жәрдеминде бериледи. $\mathcal{H}$ магнит майданы тәсир еткенде биз қарап атырған системаның энергиясының қалайынша өзгеретуғынлығын қараймыз. Заряды e ге тең болған бөлекше ушын Гамильтон функциясы төмендегидей аңлатпа менен анықланады:

$$H = \frac{1}{2M}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\varphi.$$

Бул аңлатпада $\mathbf{p}$ арқалы бөлекшениң импульси, ал $\mathbf{A}$ менен φ арқалы бөлекше турған ноқаттағы майданның векторлық ҳәм скаляр потенциаллары белгиленген. Квантлық механикадағы операторларды дүзиўдиң улыўмалық қағыйдасына сәйкес водород атомының гамильтонианы былайынша жазылады:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2M}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\varphi.$$

Қаўсырманы ашып

$$\widehat{H} = \frac{1}{2M}\widehat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{2Mc}\widehat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \frac{e}{2Mc}\mathbf{A}\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2Mc^2}\mathbf{A}^2 + e\varphi \tag{3.15}$$

аңлатпасын аламыз. Буннан кейин

$$[\widehat{\mathbf{p}}, \mathbf{A}] = \widehat{\mathbf{p}}\mathbf{A} - \mathbf{A}\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A}$$

коммутаторын есаплап ҳәм $\mathbf{A}\widehat{\mathbf{p}} - i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A}$ арқалы $\widehat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}$ көбеймесин алмастырып, зарядының терис екенлигин еске алып (13.15)-аңлатпаны мына түрге келтириў мүмкин:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2M}\widehat{\mathbf{p}}^2 + \frac{|e|}{Mc}\mathbf{A}\widehat{\mathbf{p}} - i\frac{|e|\hbar}{2Mc}\nabla\mathbf{A} + \frac{e^2}{2Mc^2}\mathbf{A}^2 - |e|\varphi. \tag{13.16}$$

z көшерин магнит майданына параллель етип қоямыз. Бундай жағдайда турақлы $\mathcal{H}$ майданының векторлық потенциалын

$$A_x = -\frac{1}{2}\mathcal{H}y, A_y = -\frac{1}{2}\mathcal{H}x, A_y = 0 \tag{13.17}$$

формулаларының жәрдеминде бериўге болады. Бир текли майдан ушын $\nabla\mathbf{A} = 0$ теңлигиниң орынланатуғынлығын аңғарамыз. (13.17)-аңлатпаны (13.16)-аңлатпаға қоямыз ҳәм есаплаўлардың

$$\mathbf{A}\widehat{\mathbf{p}} = -\frac{1}{2}\mathcal{H}y\hat{p}_x + \frac{1}{2}\mathcal{H}x\hat{p}_y = \frac{1}{2}\mathcal{H}\left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\mathcal{H}\hat{L}_z \sim \mathcal{H},$$

$$\mathbf{A}^2 = \frac{1}{2}\mathcal{H}^2(x^2 + y^2) \sim \mathcal{H}^2$$

түриндеги нәтийжесин есапқа аламыз. Буннан кейин киши майдан менен шекленемиз (яғный $\frac{e^2}{2Mc^2}\mathcal{H}^2$ шамасына пропорционал болған ағзаларды есапқа алмаймыз). Нәтийжеде (13.16)-аңлатпаны былайынша жазамыз:

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}\hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{|e|}{Mc}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} - \frac{|e|}{r} = \hat{H}_0 + \frac{|e|}{Mc}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}. \tag{13.18}$$

Бул аңлатпада ядроның майданы ушын φ диң мәниси қойылған. (13.18)-аңлатпада көринип турғанындай гамильтониан водород атомын тәрийиплейтуғын уйытқымаған

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2M}\hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{|e|}{r}$$

гамильтонианының ҳәм уйытқыў операторы болған

$$\hat{V} = \frac{|e|}{Mc}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \frac{|e|\mathcal{H}}{2Mc}\hat{L}_z$$

операторының қосындысынан турады екен. Энергиянын n- мәнисине l ҳәм m квантлық санларға сәйкес келетуғын бир неше толқын функциясының сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз (яғный l ҳәм m квантлық санлар бойынша азғыныў орын алады). Азғыныў орын алатуғын жағдайда биринши жақынласыўдағы энергияға қосылатуғын дүзетиўлер (13.5)-секуляр теңлеменин шешиминен табылады. Бундай теңлемени дүзиў ушын дәслеп

$$V_{nlm,nl'm'} = \left\langle \psi_{nlm}^{(0)} \middle| \frac{|e|\mathcal{H}}{2Mc}\hat{L}_z \middle| \psi_{nl'm'}^{(0)} \right\rangle \tag{13.19}$$

матрицалық элементлерди есаплап алыў керек. Бул аңлатпада $\psi_{nlm}^{(0)}$ арқалы уйытқыўға ушырамаған $\hat{H}_0$ гамильтонианының меншикли функциялары белгиленген. 9-10 параграфларда көрсетилгениндей $\psi_{nlm}^{(0)}$ функциясы бир ўақытта $\hat{L}_z$ операторының да меншикли функциялары болады, яғный

$$\hat{L}_z\psi_{nlm}^{(0)} = \hbar m\psi_{nlm}^{(0)}$$

теңлемесин қанаатландырады. Демек

$$\hat{V}\psi_{nl'm'}^{(0)} = \frac{|e|\mathcal{H}}{2Mc}\hbar m\psi_{nl'm'}^{(0)}.$$

Бул аңлатпаны (13.19)-аңлатпаға қойыў төмендегидей аңлатпаны береди:

$$V_{nlm,nl'm'} = \frac{|e|\mathcal{H}}{2Mc}\hbar m\delta_{l,l'}\delta_{m,m'}.$$

Демек n ниң қәлеген мәнисинде (13.19)-матрица диагоналлық болып табылады екен. Солай етип биз қарап атырған $\hat{V}$ уйытқыўына қатнасы бойынша (9.20)-функциялар дурыс функциялар болып табылады екен. Бундай жағдайда биринши жақынласыўда энергия ушын қосылатуғын дүзетиўлер (13.19)-диагоналлық матрицалық элементлерге тен екең яғный

$$E_{nlm}^{(1)} = \frac{|e|}{2Mc}\mathcal{H}m$$

Демек магнит майданы атомға тәсир еткенде спинди есапқа алмағанда атомның энергиясы m квантлық саннан ғәрезли бола баслайды екен (сонлықтан оны магнитлик квантлық сан деп атайды). Солай етип магнит майданы m бойынша азғыныўды жоқ етеди. Бирақ энергияға дүзетиўлер l квантлық санынан ғәрезсиз болғанлықтан l бойынша азғыныў сақланады. Демек бул жағдайда уйытқыў азғыныўды тек жарым-жарты алып таслайды екен.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. 13.1-мәселеде $E_0 + E_2$ энергиялық қәдди ушын нолинши жақынласыўдағы дурыс толқын функциясын табыңыз.

2. Массасы M, жийилиги ω болған тегис гармоникалық осциллятордың $\hat{V} = \alpha xy$ уйытқыўының тәсириндеги энергия ушын биринши қозған қәддинин қосымша қәддилерге бөлиниўин табыңыз. Тербелислер тегислиги (x, y) тегислиги болып табылады. Нолинши жақынласыў ушын дурыс меншикли функцияларды көрсетиниз.

3. $m = \pm 1$ болған бир текли E электр майданында жайласқан тегис ротатордын энергиясынын стационар қәддилеринин қосымша қәддилерге ажыралыўын анықланыз. E электр майданы ротатордың айланыў тегислигинде жатыр. Ротатордың инерция моменти I, ал электрлик диполлик моменти d шамасына тең.

4. z көшери бағытында бағытланған магнит майданында жайласқан спинге ийе емес зарядланған бөлекшенин стационар ҳалларынын векторлық потенциалды $A_x = 0, A_y = \mathcal{H}x, A_z = 0$ түринде калибровкалағандағы энергия қәддилерин ҳәм толқынлық функцияларын табыңыз.

Өз бетинше шешиў ушын усынылған мәселелердиң жуўаплары

1.
$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} + \psi_{210}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\left[2 - \frac{r}{a_0}(1 - \cos\theta)\right].$$

2.
$$E_{\pm} = 2\hbar\omega \pm \frac{\alpha\hbar}{2M\omega};\ \psi_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{10}^{(0)} \pm \psi_{01}^{(0)}\right).$$

3.
$$\Delta E = E_+ - E_- = \frac{d^2E^2I}{\hbar^2}, E_{\pm} = \frac{\hbar^2}{2I} + \frac{d^2E^2I}{3\hbar^2}\left(1 \pm \frac{3}{2}\right).$$

4.
$$\psi_{np_yp_x}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left(\frac{i\left(p_y y + p_z z\right)}{\hbar}\right)\psi_n^{osc}\left(x - \frac{cp_y}{eH}\right),$$
$$E_{np_yp_x} = \hbar\omega_H\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2M}.$$

14. Стационар емес уйытқыў теориясы (квантлық өтиўлер теориясы)

Методикалық көрсетпелер: Систамаға салыстырмалы киши ҳәм ўақытқа байланыслы өзгеретуғын $\hat{V}(\mathbf{r}, t)$ уйытқыў тәсир ететуғын жағдайды қараймыз. Бул жағдайларда да бурынғысынша $\hat{H}_0(\mathbf{r})$ гамильтонианы бар
$$\hat{H}_0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$$

уйытқымаған Шредингер теңлемесиниң шешимлери болған E_n^0 энергия қәддилери менен $\psi_n^0(\mathbf{r})$ толқынлық функциялары бар деп есаплаймыз. Уйытқыўды есапқа алғанда барлық системаның гамильтонианы $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(\mathbf{r}, t)$ ўақытқа ғәрезли болады. Бул жағдайда энергия сақланбайды. Сонлықтан энергияның меншикли мәнислерине қосылатуғын дүзетиўлер ҳаққында гәп етиўге болмайды. Бул жерде мәселе уйытқымаған системаның стационар ҳалларының толқынлық функциялары бойынша

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi = \widehat{H}_0\Psi + \widehat{V}(\mathbf{r}, t)\Psi \tag{14.1}$$

стационар емес Шредингер теңлемесин шешип $\Psi(\mathbf{r}, t)$ толқын функцияларын жуўық түрде есаплаўдан ибарат. Бунын ушын стационар уйытқыў теориясындағыдай $\Psi(\mathbf{r}, t)$ толқын функция уйытқымаған мәселенин меншикли функциялары бойынша қатарға жаямыз:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(t)\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})e^{-i\omega_n t}. \tag{14.2}$$

Бул қатарда ўақыттан ғәрезлик экспоненциаллық көбейтиўши ҳәм $a_n(t)$ коэффициентлери менен берилгең ал $\omega_n \equiv E_n^{(0)}/\hbar$. (14.12)-толқын функциясын Шредингердин (14.2)-стационар емес теңлемесине қоямыз. Нәтийжеде төмендеги теңликке ийе боламыз:

$$i\hbar\sum_{n=0}^{\infty}\frac{da_n}{dt}\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})e^{-i\omega_n t} + i\hbar\sum_{n=0}^{\infty}(-i\omega_n)a_n\,\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})e^{-i\omega_n t} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} a_n\widehat{H}_0\,\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})e^{-i\omega_n t} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n\widehat{V}(\mathbf{r}, t)\,\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})e^{-i\omega_n t}.$$

Буннан кейин

$$\widehat{H}_0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0 \text{ ҳәм } \hbar\omega_n = E_n^{(0)}$$

екенлигин есапқа алып

$$i\hbar\sum_{n=0}^{\infty}\frac{da_n}{dt}\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})e^{-i\omega_n t} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\widehat{V}(\mathbf{r}, t)\,\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})e^{-i\omega_n t} \tag{14.3}$$

теңлигине ийе боламыз. Бул теңлемени $\psi_n^{(0)*}(\mathbf{r})e^{i\omega_m t}$ көбеймесине көбейтемиз ҳәм барлық кеңислик бойынша интеграллаймыз. $\psi_n^{(0)}$ функциясынын ортонормаллығы себепли a_m коэффициентинин ҳәр бириў ушын

$$i\hbar\frac{da_m}{dt} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(t)\,V_{mn}(t)e^{-i\omega_{nm}t}$$

теңлемесин табамыз. Бул аңлатпада

$$V_{mn}(t) = \langle m|\widehat{V}(\mathbf{r}, t)|n\rangle = \int \psi_m^{(0)*}(\mathbf{r})\widehat{V}(\mathbf{r}, t)\psi_n^{(0)}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

ўақыттан ғәрезли матрицалық элементлер болып табылады, ал

$$\omega_{nm} \equiv \omega_n - \omega_m = \frac{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}{\hbar}.$$

(14.3)-теңлеме ўақыттан ғәрезли болған $a_n(t)$ коэффициентлери ушын дифференңиаллық теңлемелер системасын пайда етеди. Улыўма жағдайда бул система шексиз. Уйытқыў операторының матрицалық элементлери $V_{mn}(t)$ киши болғанда уйытқыў теориясы усынатуғын улыумалық усылдан пайдаланамыз. Атап айтқанда a_m коэффициентлерин кишилик дәрежеси бойынша қатарға жаямыз:

$$a_m = a_m^{(0)} + a_m^{(1)} + a_m^{(2)} + \cdots$$

$a_m^{(0)}$ коэффициентлери системаның уйытқыў тәсир етпестен бурынғы ҳалы бойынша анықланады (ямаса буннан шексиз көп уақыт бурынғы). Уйытқыў теориясының биринши тәртибинде $a_m^{(1)}$ коэффициентлери

$$i\hbar\frac{da_m^{(1)}}{dt} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(0)}(t)\, V_{mn}(t) e^{-i\omega_{nm}t} \qquad (14.4)$$

теңлемелер системасынан анықланады.

14.1-мәселе. Система $\psi_k^{(0)}$ толқынлық функциясы менен тәрийипленетуғын ҳалда тур. Шекли уақыт интервалы ишинде системаға $\hat{V}(\mathbf{r},t)$ уйытқыўы тәсир етеди. Системаның басқа ҳалға өтиўиниң итималлығын табыңыз.

Шешими. Системаның $\psi_k^{(0)}$ толқынлық функциясы менен тәрийиплениу факты $a_m^{(0)}$ коэффициентлериниң барлығының ишинде тек $a_k^{(0)}$ коэффициентиниң нолге тең емес екенлигин ҳәм $a_k^{(0)} = 1$ екенлигин аңғартады. Басқа коэффициентлердиң барлығы да $a_k^{(0)} \neq 1$ $(m \neq k)$.

Уйытқыў тек шекли уақыт аралығы ишинде тәсир ететуғын болғанлықтан уйытқыўдың тәсир етиуи тоқтағаннан кейин система қайтадан стационар ҳалға ийе болады. Бул стационар ҳалдың дәслепки стационар ҳалдан айырмашылығының болыуы мүмкин. Система уйытқыўдың тәсиринде дәслепки k стационар ҳалдан басқа m стационар ҳалына өтиўиниң итималлығы $a_m^{(1)}$ коэффициентиниң модулиниң квадраты менен анықланады:

$$w_{mk} = \left|a_m^{(1)}\right|^2.$$

Бундай жағдайда (14.4)-теңлемелер мынадай түрге енеди:

$$i\hbar\frac{da_m^{(1)}}{dt} = V_{mk}(t)e^{i\omega_{mk}t}.$$

Интеграллаўдан кейин мына аңлатпаны аламыз:

$$a_m^{(1)} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, V_{mk}(t')e^{i\omega_{mk}t'}. \qquad (14.5)$$

Уйытқыўдың тәсиринде системаның анаў ямаса мынаў ҳалға өтиўиниң итималлығын есаплаў ушын уйытқыўдың тәсири жоғалған ўақытқа шекем ямаса $+\infty$ ке шекем интеграллаўымыз керек.

Демек:

$$w_{mk}(t) = \left|\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, V_{mk}(t')e^{i\omega_{mk}t'}\right|^2.$$

14.2-мәселе. Егер $\hat{V}$ уйытқыў операторында кеңисликлик ҳәм ўақытлық факторларды айырып көрсетиўге болатуғын болса, яғный $\hat{V}$ операторы

$$\hat{V}(\mathbf{r},t) = \widehat{W}(\mathbf{r})f(t)$$

түрине ийе болса $a_m^{(1)}$ коэффициентлерин табыңыз.

Шешими. Бул жағдайда (14.4)-теңлеме төмендегидей түрге ийе болады:

$$a_m^{(1)} = \frac{W_{mk}}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t')e^{i\omega_{mk}t'}dt'. \tag{14.6}$$

Ҳәр қыйлы уйытқыўларды толығырақ қараймыз.

14.3-мәселе. $f(t) = \delta(t)$ теңлиги орынланатуғын жағдайда (импульслик көриниси) өтиўлердиң итималлығын табыңыз.

Шешими. Функцияның усындай түри уйытқыў жүдә киши ўақыт аралыгынла тәсир ететуғын жағдайларды моделлестириў ушын жарамлы. (14.6)-аңлатпадағы интеграл бул жағдайда мынаған тең болады:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(t')e^{i\omega_{mk}t'}dt' = 1.$$

Буннан өтиўлердиң итималлығы ушын

$$\frac{|w_{mk}|^2}{\hbar^2}$$

формуласын аламыз.

14.4-мәселе. Уйытқыў базы бир ўақыт моментинде пайда болған (бул ўақыт моментин $t = 0$ деп есаплайық) ҳәм ўақыттың өтиўи менен өзгериссиз қалған жағдайды қараймыз. Бундай жағдайда $f(t) = \theta(t)$ ҳәм $\theta(t)$ арқалы Хевисайдтың тета-функциясы белгиленген. Басланғыш ҳалдан (дәслепки ҳалдан) басқа ҳалға өтиўдиң итималлығын табыңыз.

Шешими. Дирактың дельта-функциясы сыяқлы Хевисайдтың тета-функциясы да улыўмаласқан (улыўмаластырылған) функция болып табылады. Бул функция мынадай мәнислерди қабыл ете алады:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0, t < 0 \; bol\acute{g}anda, \\ 1, t > 0 \; bol\acute{g}anda,. \end{cases}$$

Тета-функциядан алынған интегралдың дельта-функция екенлигин атап өтемиз.

Енди

$$\int_{-\infty}^{t} \theta(t')e^{i\omega_{mk}t'}dt'$$

интегралын есаплаймыз. Интеграллаўды бөлеклерге бөлип әмелге асырыў мүмкин:

$$\int_{-\infty}^{t} \theta(t')e^{i\omega_{mk}t'}dt' = \int_{-\infty}^{t} dt'\theta(t')\left(\frac{e^{i\omega_{mk}t'}}{i\omega_{mk}}\right)' =$$

$$= \theta(t')\left(\frac{e^{i\omega_{mk}t'}}{i\omega_{mk}}\right)'\Bigg|_{-\infty}^{t} - \int_{-\infty}^{t} dt'\frac{e^{i\omega_{mk}t'}}{i\omega_{mk}}\delta(t').$$

$t > 0$ шәрти орынланғанда

$$a_m^{(1)} = \frac{W_{mk}}{i\hbar}\left(\frac{e^{i\omega_{mk}t}}{i\omega_{mk}} - \frac{1}{i\omega_{mk}}\right) = \frac{W_{mk}}{\hbar\omega_{mk}}(1 - e^{i\omega_{mk}t}).$$

Уйытқыў тәсир етпеген жағдайдағы толқынлық функция ушын дүзетиў мынадай түрге ийе болады:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(1)} \psi_n^{(1)}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega_n t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{W_{nk}}{\hbar\omega_{nk}} (1 - e^{i\omega_{nk} t}) \psi_n^{(0)}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega_n t} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{W_{nk}}{\hbar\omega_{nk}} \psi_n^{(0)}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega_n t} + \left[\sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{W_{nk}}{\hbar\omega_{nk}}\right) \psi_n^{(0)}(\mathbf{r})\right] e^{-i\omega_n t}.$$

Суммалардың екиншиси стационар уйытқыў теориясы рамкаларында есапланған дәслепки (басланғыш) ҳалдың толқынлық функциясына қосылатуғын дүзетиў болып табылады. Басланғыш k ҳалынан басқа n ҳалына өтиўдиң итималлығы биринши суммада турған коэффициентлер жәрдеминде анықланады. Солай етип өтиўлердиң итималлықлары ушын

$$w_{mk} = \frac{|w_{mk}|^2}{\hbar^2 \omega_{mk}^2} \tag{14.7}$$

аңлатпасына ийе боламыз.

14.5-мәселе. $t = 0$ ўақыт моментинде ўақыттан жийилиги ω болған гармоникалық нызам бойынша ғәрезли уйытқыў қосылған. Бундай уйытқыўға мысал ретинде

$$f(t) = \begin{cases} 0, t < 0 \text{ болғанда}, \\ \sin\omega t\,, t > 0 \text{ болғанда} \end{cases}$$

түриндеги уйытқыўды көрсетиўге болады. Дара жағдайда бундай уйытқыў заттың электромагнитлик толқын менен тәсирлесиўин тәрийиплейди. Усындай уйытқыўдың тәсиринде ҳәр қыйлы ҳаллар арасындағы өтиўдиң итималлығын табыңыз.

Шешими. Бул жағдайда

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{W_{mk}}{i\hbar} \int_0^t \sin\omega t'\, e^{i\omega_{mk} t'} dt' =$$

$$= -\frac{W_{mk}}{2\hbar} \left[\int_0^t e^{i\omega t'} e^{i\omega_{mk} t'}\, dt' - \int_0^t e^{-i\omega t'} e^{i\omega_{mk} t'}\, dt'\right] =$$

$$= -\frac{W_{mk}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{mk}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{mk}+\omega)} - \frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{mk}-\omega)}\right] =$$

$$= \frac{W_{mk}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_{mk}+\omega)t} - 1}{i(\omega_{mk}-\omega)} - \frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{mk}+\omega)}\right].$$

m ҳәм k ҳаллары арасындағы өтиў жийилигин ω_{mk} арқалы белгилеймиз. Егер ω жийилигиниң шамасы ω_{mk} жийилигине жақын болса бөлими $\omega_{mk} - \omega$ шамасына тең болған биринши ағзаның үлеси бөлими $\omega_{mk} + \omega$ шамасына тең екинши ағзаның үлесине қарағанда әдеўир үлкен болады. Сонлықтан биз бөлими $\omega_{mk} + \omega$ шамасына тең болған екинши ағзаны есапқа алмаймыз.

Гармоникалық уйытқыўдың тәсириндеги өтиўдиң итималлығы ушын биз мынадай аңлатпаны аламыз:

$$w_{mk}(t) = \left|a_m^{(1)}(t)\right|^2 = \frac{|W_{mk}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{4} \frac{\left|e^{i(\omega_{mk}+\omega)t} - 1\right|^2}{(\omega_{mk}-\omega)^2}.$$

Бул аңлатпаның алымында турған модульдиң квадраты болған $\left|e^{i(\omega_{mk}+\omega)t} - 1\right|^2$

аңлатпасын былайынша түрлендиремиз:

$$\left|e^{i(\omega_{mk}+\omega)t}-1\right|^2=[\cos(\omega_{mk}-\omega)t-1]^2+\sin^2(\omega_{mk}-\omega)t=$$
$$=2-2\cos(\omega_{mk}-\omega)t=4\sin^2\left(\frac{\omega_{mk}-\omega}{2}t\right).$$

Бундай жағдайда

$$w_{mk}=\frac{|V_{mk}|^2}{\hbar^2}\frac{1}{4}\frac{4\sin^2\left(\frac{\omega_{mk}-\omega}{2}t\right)}{\left(\frac{\omega_{mk}-\omega}{2}\right)^2}.$$

Дельта-функция ушын төмендегидей қатнас орынлы [қараңыз (Қ3.15) аңлатпасы]:

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{\pi t}\,\frac{\sin^2\alpha t}{\alpha^2}=\delta(\alpha).$$

Бул қатнасты есапқа алғанда k ҳалынан m ҳалына өтиўдиң итималлығы былайынша жазылады:

$$w_{mk}=\frac{|V_{mk}|^2}{\hbar^2}\frac{1}{4}\pi t\delta\left(\frac{\omega_{mk}-\omega}{2}\right)=\frac{|V_{mk}|^2}{\hbar^2}\frac{1}{2}\pi t\delta(E_m-E_k-\hbar\omega).$$

Биз бул жерде дельта-функцияның $\delta(ax)=\left(\frac{1}{|a|}\right)\delta(x)$ қәсийетинен пайдаландық. Өтиў ўақытқа пропорционал болып шықты. Демек ўақыт бирлиги ишиндеги (ўақыт бирлигиндеги) өтиў итималлығы (яғный өтиў тезлиги)

$$\frac{dw_{mk}}{dt}=\frac{\pi|V_{mk}|^2}{2}\delta(E_m-E_k-\hbar\omega) \qquad (14.8)$$

шамасына тен болып шығады.

Базы бир методикалық көрсетпелер: Биз жоқарыда өтиўдин тезлиги ушын алған аңлатпаны ***Фермидиң алтын қағыйдасы*** деп атайды. Өтиўдиң итималлығының V_{mk} матрицалық элементтиң квадратына пропорционал екенлигине итибар беремиз (яғный шамасына пропорционал). Мысалы атом кернеўлиги $\mathbf{E}$ болған электромагнит майданы менен тәсирлескенде (тәсирлесиў энергиясы $V=-\mathbf{d}\mathcal{E}$ болған электромагнит майданы менен тәсирлескенде де, бул аңлатпада $\mathbf{d}=e\mathbf{r}$ арқалы атомның сыртқы электронының диполлик моменти белгиленген) V_{mk} матрицалық элементи $\mathbf{r}_{mk}=\langle m|\mathbf{r}|k\rangle$ матрицалық элементине пропорционал. Сонлықтан соңғы аңлатпаның нолге тең болыўы сыртқы электр майданының тәсиринде k ҳәм m ҳаллары арасындағы өтиўди қадаған етеди. Бул жағдай сайлап алыў қағыйдалары деп аталатуғын қағыйдалардың пайда болыўына алып келеди. Ал (14.8)-аңлатпадағы дельта-функцияның қатнасыўы энергияның сақланыў нызамын көрсетеди: жийилиги ω болған гармоникалық уйытқыўдың тәсириндеги k ҳәм m ҳаллары арасындағы өтиў бул ҳаллардың энергиялары арасындағы айырма E_m-E_k шамасының мәниси дәл $\hbar\omega$ шамасына тең болғанда ғана жүзеге келеди.

14.6-мәселе. Зарядтың муғдары 1 ге тосыннан өзгергенде (яғный $Z\to Z+1$) электрон тийкарғы ҳалдан биринши қозған ҳалға өтетуғын болсын. Уйытқыў теориясы шеклеринде усындай өтиўдиң итималлығын табыңыз. Есаплаўларды әпиўайыластырыў ушын атомды водород тәризли атом деп есаплаңыз (водород тәризли атомда ядроның заряды Ze шамасына тең ҳәм тек бир электрон бар болатуғынлығын еске саламыз).

Шешими. Мейли атом дәслеп

$$\psi_{1,0,0} = R_{1,0}Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z}{a_0}r}$$

толқынлық функция менен тәрийипленетуғын ҳалда турған болсын. Z шамасы үлкен болғанда заряд 1 ге өзгергенде потенциал энергияның өзгериси киши болады. Сонлықтан энергияның өзгерисин $V = \pm\frac{e^2}{r}$ сыпатында қараўға болады. Водород тәризли атом ушын матрицалық элемент

$$V_{n'l'm',nlm} = \pm\int_0^\infty r^2\frac{e^2}{r}R_{nl}R_{n'l'}dr\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{l'm'}Y_{00}\sin\theta\, d\theta d\varphi$$

түрине ийе болатуғын болсын. Шар функциялардың ортонормаллығы $l' = 0$ шәртиниң орынланыўын талап етеди. Басқа сөз бенен айтқанда тийкарғы ҳалдан зарядтын шамасы 1 ге өзгериў менен өткенде тек s-ҳалдың пайда болыўы мүмкин. $\psi_{2,0,0}$ толқын функциясынын ҳақыйқый бөлими былайынша жазылады:

$$R_{2,0} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Z}{a_0}r\right)e^{-\frac{Z}{2a_0}r}.$$

Интеграл

$$\int_0^\infty rR_{2,0}R_{1,0}dr =$$

$$= 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\int_0^\infty re^{-\frac{Z}{a_0}r}\left(2 - \frac{Z}{a_0}r\right)e^{-\frac{Z}{2a_0}r}dr =$$

$$= 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left[2\int_0^\infty re^{-\frac{3Z}{2a_0}r}dr - \frac{Z}{a_0}\int_0^\infty r^2e^{-\frac{3Z}{2a_0}r}dr\right] =$$

$$= \frac{4\sqrt{2}}{27}\frac{Z}{a_0}.$$

Тийкарғы ҳәм биринши қозған ҳалларға сәйкес келиўши энергиялардың айырмасы:

$$-\frac{Z^2e^2}{8a_0} - \left(-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\right) = \frac{3Z^2e^2}{8a_0}.$$

Солай етип (14.7)-аңлатпаға сәйкес биз тийкарғы ҳалдан биринши қозған ҳалға өтиўдиң итималлығын аламыз:

$$w(2s \to 2s) = \left(\frac{4\sqrt{2}\,Ze^2}{27a_0}\right)^2\left(\frac{8a_0}{3Z^2e^2}\right)^2 = \frac{2^{11}}{3^8}\frac{1}{Z^2} = \frac{2048}{6561}\frac{1}{Z^2}.$$

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Заряды e ге тең бир өлшемли гармоникалық осциллятор берилген. Бул осциллятор турақлы $\mathcal{E}$ электр майданын түсиргенде тийкарғы ҳалға ҳәм екинши қозған ҳалға өтетуғын болсын. Усындай өтиўлердиң итималлығын есаплаңыз.

2. Бөлекше шексиз терең

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<-\frac{a}{2},\\ 0, & -\frac{a}{2}<x<\frac{a}{2}\\ \infty & x>\frac{a}{2}\end{cases}$$

потенциал шуқырда жайласқан болсын. Потенциаллық шуқырдың ортасында $\hat{V}(x,t)=W_0\delta(x)\delta(t)$ түриндеги бир заматлық уйытқыў тәсир етеди. Усындай уйытқыўдың тәсириндеги өтиўлердиң итималлығын табыңыз.

3. Шексиз терең потенциал шуқырда жайласқан массасы M ге, заряды e ге тең болған бөлекшеге ўақытқа байланыслы $\mathcal{E}(t)=\mathcal{E}_0e^{-(t/T)^2}$ нызамы бойынша өзгеретуғын электр майданы тәсир ететуғын болсын. Импульстиң тәсир етиўи тоқтаған моментте (ўақыттың шексиз үлкен моментинде) қәддилер арасында өтиўдиң қандай итималлық пенен жүзеге келетуғынлығын есаплаңыз.

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылған мәселелердиң жуўаплары

1. Сәйкес

$$\frac{1}{2}\left(\frac{e\mathcal{E}x_0}{\hbar\omega}\right)^2 \text{ ҳәм } \frac{3}{2}\left(\frac{e\mathcal{E}x_0}{\hbar\omega}\right)^2$$

шамаларына тең.

2. $w=\frac{2W_0^2}{\hbar^2 a}$ өтиўлер тек жуп ҳаллардың арасында болады.

3. Өтиўлер m ҳәм k шамалары ҳәр қыйлы жуплыққа ийе болған ҳаллар арасында болады.

$$w=\left(\frac{e\mathcal{E}}{\hbar}\right)^2 a^2\frac{256}{\pi^3}\frac{nm}{(n^2-m^2)^2}T^2\exp\left(-\frac{\omega_{om}^2T^2}{2}\right).$$

Бул аңлатпада

$$\omega_{mn}=\frac{\hbar\pi^2}{2Ma^2}(m^2-n^2).$$

15. Вариациялық усыл

Методикалық көрсетпелер. Квантлық системалардың энергиясының биринши дискрет қәддилерин есаплаў ушын бир қатар жағдайларда вариациялық усылдан пайдаланған қолайлы. Бул усылдың киши тәсир теориясынан айырмашылығы соннан ибарат, ол мәселеде киши параметрдиң болыўын талап етпейди. Оның тийкарында төмендеги теңсизлик жатады

$$E_0\le\int\psi^*\hat{H}\psi dq.$$

Бул аңлатпада E_0 арқалы системаның тийкарғы ҳалының энергиясы белгиленген (яғный ең минималлық энергияға ийе ҳал). $\hat{H}$ Гамильтон операторы, ал ψ арқалы

$$\int\psi^*\psi dq=1$$

нормировка шәртин қанаатландыратуғын ықтыярлы функция белгиленген. Тийкарғы ҳалдың энергиясын анықлаў ψ функцияларының белгили бир класслары ушын $\int \psi^* \widehat{H} \psi dq$ интегралының минимумын табыўға алып келинеди. ψ функциялары сынап көриў функциялары деп атайды.

Вариациялық усыл менен мәселелер шешиў төмендегидей жоллар менен алып барылады:

Бир қатар параметрлерден ғәрезли болған нормировкаланған сынап көрилиўши функция сайлап алынады. Бул параметрлерди α, β ҳәм басқа да грек ҳәриплериниң жәрдеминде белгилеймиз. Сынап көрилиўши функцияны сайлап алыў ушын тийкар мәселениң симметриясын есапқа алған ҳалда шешимди сапалық жақтан таллаў болып табылады. Ең биринши гезекте сынап көрилиўши функция стандарт шәртлерди қанаатландырыўы керек - функция үзликсиз, бир мәнисли ҳәм шекли болыўы шәрт.

Жоқарыда атап өтилген параметрден ғәрезли болған

$$J(\alpha, \beta, \dots) = \int \psi^* \widehat{H} \psi dq$$

интегралы есапланады.

J интегралы өзиниң минимумына жететуғын α_0, β_0, ... параметрлери табылады. Буның ушын

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha} = 0, \frac{\partial J}{\partial \beta} = 0$$

түриндеги теңлемелер системасы шешиледи.

Буннан кейин тийкарғы ҳал ушын энергияның мәниси анықланады:

$$E_0 = J(\alpha_0, \beta_0, \dots).$$

Егер сынап көрилетуғын функция сәтли түрде сайлап алынған болса пайдаланылған параметрлердиң саны салыстырмалы киши болса да E_0 диң мәниси оның ҳақыйқый мәнисине жақын болады.

Бул усылды қозған ҳаллар ушын улыўмаластырыўға да болады. Мысалы биринши қозған халды есаплаў ушын

$$\int \psi_1^* \widehat{H} \psi_1 dq$$

интегралының минимумға жетиў шәртин табыў керек болады. Бул аңлатпада ψ_1 арқалы тийкарғы ҳалдың толқын функциясы болған ψ_0 функциясына ортогонал болған нормировкаланған функция белгиленген.

ψ_0 функциясы мынадай қатнасларды қанаатландырады:

$$\int \psi_1^* \psi_1 dq = 1,$$

$$\int \psi_1^* \psi_0 dq = 0$$

Екинши қозған ҳал ушын $\int \psi_2^* \widehat{H} \psi_2 dq$ минимумы

$$\int \psi_2^* \psi_2 dq = 1,$$

$$\int \psi_2^* \psi_1 dq = \int \psi_2^* \psi_0 dq = 0$$

шәртлери орынланғанда изленеди.

15.1-мәселе. Вариациялық усылды пайдаланып бир өлшемли гармоникалық осциллятордың тийкарғы ҳалының энергиясын есаплаңыз. Сынап көрилетуғын функцияны

$$\psi_0(x,\alpha) = Ae^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}, \alpha > 0$$

түринде сайлап алыңыз.

Шешими. $\psi(x,\alpha)$ функциясы ушын нормировка шәрти бизге

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x,\alpha)\,\psi_0(x,\alpha)dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \frac{|A|^2}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{\pi} = 1$$

аңлатпаларын ямаса

$$A = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}$$

әтийжесин береди.

Енди мына интегралды есаплаймыз:

$$J(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(x,\alpha)\,\widehat{H}\psi_0(x,\alpha)dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{M\omega^2x^2}{2}\right)e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}dx =$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2M}(\alpha^2x^2 - \alpha) + \frac{M\omega^2x^2}{2}\right)e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}dx =$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\left(-\alpha^2\frac{\hbar^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2}\right)x^2 + \frac{\alpha\hbar^2}{2M}\right]e^{-\alpha x^2}dx =$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\left[\left(-\alpha^2\frac{\hbar^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2}\right)\frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{\frac{3}{2}}} + \alpha\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}}\right] =$$

$$= \frac{\hbar^2\alpha}{4M} + \frac{M\omega^2}{4\alpha}.$$

Бул интегралды есаплағанда бизлер

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}}, \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,e^{-\alpha x^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{\frac{3}{2}}}$$

теңликлериниң орынлы екенлигинген пайдаландық (усы параграфта пайдаланылатуғын интеграллардың көпшилигиниң мәнислери 2-қосымшада берилген).

$J(a)$ функциясының минимумы $\alpha_0 = \frac{M\omega}{\hbar}$ теңлиги орынланғанда жүзеге келеди. Бундай жағдайда $J(a_0) = E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, ал толқын функциясы төмендегидей түрге ийе:

$$\psi_0 = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}},$$

ал бул функция бир өлшемли гармоникалық осциллятордың энергиясының дәл мәниси ҳәм толқын функциясының түри менен сәйкес келеди (7-параграфқа қараңыз).

15.2-мәселе. Водород атомының тийкарғы ҳалының (1s ҳал) энергиясы менен толқын функциясын табыңыз. Сынап көрилетуғын функцияны

$$\psi_0(r,\alpha) = A\exp(-\alpha r), \alpha > 0$$

түринде сайлап алыңыз.

Шешими. Толқын функциясының нормировка шәрти

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} \psi_0^*(r,\alpha)\psi_0(r,\alpha)r^2 \sin\theta\, dr d\varphi d\theta =$$

$$= 4|A|^2 \int_0^{\infty} \exp(-2\alpha r)\, r^2 dr = \pi\frac{|A|^2}{\alpha^3} = 1$$

аңлатпасына алып келеди.Буннан $A = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\pi}$ екенлигине ийе боламыз.

Водород атомының гамильтонианы сфералық координаталарда төмендегидей түрге ийе (9-параграфты қараңыз):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} - \frac{e^2}{r}.$$

Бул аңлатпада e арқалы электронның заряды белгиленген. Жоқарыдағы интеграл

$$J(\alpha) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} \psi_0^*(r,\alpha)\hat{H}\psi_0(r,\alpha)r^2 \sin\theta\, dr d\varphi d\theta =$$

$$= -\frac{2\pi\hbar^2|A|^2}{M}\int_0^{\infty} e^{-\alpha r}\left\{\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)e^{-\alpha r}\right\} -$$

$$-4\pi|A|^2 e^2 \int_0^{\infty} r e^{-2\alpha r} dr.$$

Соңғы аңлатпаның оң тәрепиндеги биринши интегралды бөлеклерге бөлип интеграллаўға болады:

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha r}\left\{\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)e^{-\alpha r}\right\} dr =$$

$$= e^{-\alpha r} r^2 \frac{de^{-\alpha r}}{dr}\bigg|_0^{\infty} -$$

$$-\int_0^{\infty}\left(\frac{de^{-\alpha r}}{dr}\right)^2 r^2 dr = -\alpha^2\int_0^{\infty} e^{-\alpha r} r^2 dr = -\frac{1}{4\alpha}.$$

Екинши интеграл мынаған тең:

$$\int_0^{\infty} r\, e^{-2\alpha r} dr = -\frac{1}{4\alpha^2}.$$

Енди $|A|^2 = \alpha^3/\pi$ екенлигин есапқа алып $J(\alpha)$ ушын жазылған аңлатпаны былайынша жазамыз:

$$J(\alpha) = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2M} - \alpha e^2.$$

Бул $J(\alpha)$ функциясының минимумы

$$\frac{\partial J(\alpha)}{\partial \alpha} = 0$$

шәртинен $\alpha_0 = Me^2/\hbar^2$ екенлигин анықлаймыз.

Енди α_0 шамасын $J(\alpha) = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2M} - \alpha e^2$ аңлатпасына қойып мынаған ийе боламыз:

$$E_0 = J(\alpha_0) = -\frac{Me^4}{2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a_0}.$$

Бул аңлатпада $a_0 = \frac{\hbar^2}{Me^2}$ арқалы Бор радиусы белгиленген.

Тийкарғы ҳалдың толқын функциясы

$$\psi_0(r, \alpha_0) = Ae^{-\alpha_0 r} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}.$$

Энергия ҳәм толқын функциясы ушын алынған аңлатпалардың дәл аңлатпалар менен сәйкес келетуғынлығын атап өтемиз (9-параграфты қараңыз).

15.3-мәселе. Водород атомының биринши қозған ҳалы ушын ($2s$ ҳал) энергия менен толқын функциясын табыңыз. Сынап көрилетуғын функция сыпатында

$$\psi_1(r, \alpha, \beta) = A\left(1 - \beta\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{\alpha r}{a_0}}, \alpha, \beta > 0$$

функциясын алыңыз. $a_0 = \frac{\hbar^2}{Me^2}$ арқалы Бор радиусы белгиленген.

Шешими. Водород атомының тийкарғы ҳалына ($1s$ ҳал) сәйкес келетуғын ψ_0 толқын функциясы 15.2-мәселеде табылған еди. ψ_0 ҳәм ψ_1 толқын функцияларының ортогоналлық шәртин жазамыз:

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} \psi_0^*(r)\psi_0(r, \alpha, \boldsymbol{\beta}) r^2 \sin\theta \, dr d\varphi d\theta =$$

$$= \frac{4A}{(\alpha+1)^3}\sqrt{\pi a_0^3}\left(2 - \frac{6\beta}{\alpha+1}\right) = 0.$$

Буннан α ҳәм β параметрлери арасындағы байланысты табамыз:

$$\beta = \frac{\alpha+1}{3}.$$

(15.4)-аңлатпаны есапқа алып

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} \psi_1^*(r, \alpha, \beta)\psi_1(r, \alpha, \boldsymbol{\beta}) r^2 \sin\theta \, dr d\varphi d\theta =$$

$$= 4\pi|A|^2\int_0^{\infty}\left(1 - \beta\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{2\alpha r}{a_0}} r^2 dr = |A|^2\frac{\pi a_0^3}{3\alpha^5}(\alpha^2 - \alpha + 1) = 1$$

ормировка шәртинен

$$A = \sqrt{\frac{3\alpha^5}{\pi a_0^3(\alpha^2 - \alpha + 1)}}$$

екенлигин табамыз. Буннан кейин жоқарыда келтирилген $\hat{H}$ гамильтонианға ийе болған

$$J(\alpha,\beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(r,\alpha.\beta)\,\widehat{H}\psi_1(x,\alpha,\beta) r^2 \sin\theta\, drd\varphi d\theta$$

интегралын есаплаймыз ҳәм

$$J(\alpha,\beta) = \frac{2\pi\hbar^2|A|^2}{M}\int_0^\infty \left\{\frac{d}{dr}\left(\left(1-\beta\frac{r}{a_0}\right)\exp\left(-\frac{\alpha r}{a_0}\right)\right)\right\}^2 r^2dr -$$

$$-4\pi|A|^2e^2\int_0^\infty r\left(1-\beta\frac{r}{a_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{\alpha r}{a_0}\right)dr =$$

$$= \frac{\pi|A|^2a_0^2e^2}{\alpha^3}\left(\frac{\beta^2-\beta\alpha+\alpha^2}{2}-\alpha+2\beta-\frac{3}{2}\frac{\beta^2}{\alpha}\right)$$

аңлатпасына ийе боламыз ямаса A менен β ны α арқалы аңлатып $\beta = \frac{\alpha+1}{3}$ ҳәм $A = \sqrt{\frac{3\alpha^5}{\pi a_0^3(\alpha^2-\alpha+1)}}$ аңлатпалардың жәрдеминде мынадай аңлатпаны аламыз:

$$J(\alpha) = \frac{e^2}{a_0}\left(\frac{7\alpha^2}{6}-\frac{\alpha}{2}-\frac{\alpha^2}{2(\alpha^2-\alpha+1)}\right).$$

$J(\alpha)$ ушын $\frac{\partial J}{\partial \alpha} = 0$ минимум шәрти $a_0 = \frac{1}{2}$ шамасын береди. Бундай жағдайда $\beta = \frac{\alpha+1}{3}$ аңлатпаға сәйкес β_0 диң мәниси $\frac{1}{2}$ ге тең болады.

Биз излеп атырған энергия

$$E_1 = J(\alpha_0) = -\frac{e^2}{8a_0},$$

ал толқын функциясы

$$\psi_1(r) = \sqrt{\frac{1}{8\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right).$$

Бул мәселеде сынап көрилетуғын функцияны сәтли түрде сайлап алыўдың салдарынан энергияның мәниси менен толқын функциясы дәл түрде алынған мағлыўматлар менен толық сәйкес келеди (9-параграфты қараңыз).

Студентлердиң өз бетинше шешиўи ушын усынылатуғын мәселелер

1. Бир өлшемли осциллятордың биринши қозған халы ушын энергия менен толқын функциясын табыңыз. Сынап көрилетуғын функция сыпатында $\psi_1 = Bxe^{-\frac{1}{2}\beta x^2}$ функциясын алыңыз.

2. Егер потенциал энергия

$$U(x) = \begin{cases} Fx, x \geq 0, \\ \infty, x < 0 \end{cases}$$

түрине ийе болатуғын болса вариациялық усылдан пайдаланып бөлекшенин тийкарғы ҳалының энергиясын табыңыз. Сынап көрилиўши функциялар ретинде a) $\psi = Axe^{-\alpha x}$, b) $\psi = Bxe^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$ функцияларын пайдаланыңыз. Бул функциялардың қайсысы жақсырақ нәтийжелерди береди?

3. Кеңлиги a шамасына тең дийўалларының бийиклиги шексиз үлкен потенциал

шуқырдағы бөлекше ушын а) тийкарғы ҳәм б) биринши қозған ҳаллардың энергиясын табыңыз. Сынап көрилетуғын функциялар ретинде тийкарғы ҳал ушын $\psi = Ax(a-x)$ функциясын, ал биринши қозған ҳал ушын $\psi = Bx\left(\frac{a}{2} - x\right)(a-x)$ функциясын алыныз.

Өз бетинше шешиў ушын усынылған мәселелердиң шешимлери

1.

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega, \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

2.

$$a)\ \left(\frac{243}{32}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{\hbar^2F^2}{M}\right)^{\frac{1}{3}} \approx 1{,}966\left(\frac{\hbar^2F^2}{M}\right)^{\frac{1}{3}},$$

$$b)\ \left(\frac{81}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{\hbar^2F^2}{M}\right)^{\frac{1}{3}} \approx 1{,}861\left(\frac{\hbar^2F^2}{M}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

Вариациялық усыл энергияның мәнисин жоқарыдан баҳалайтуғын болғанлықтан баҳа бериўушын киши b) нәтийжесин алыў керек.

3.

$$a)\frac{5\hbar^2}{Ma^2}, \qquad b)\ 21\frac{\hbar^2}{Ma^2}.$$

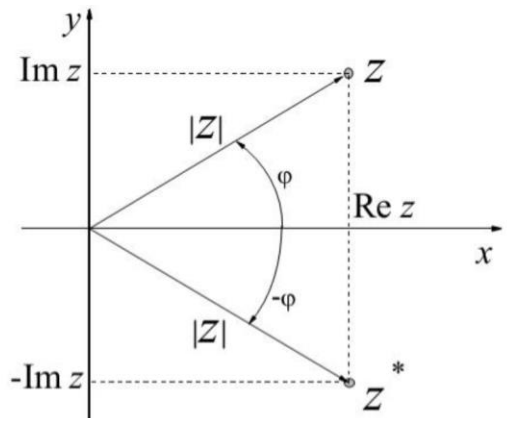
Қосымшалар

1-қосымша. Комплекс санлар

Квантлық механикада пайдаланылатуғын толқын функцияларының көпшилиги улыўма жағдайларда комплексли шамалар болып табылады. Сонлықтан биз комплексли санлардың қәсийетлерин еске түсиремиз.

Квадраты -1 ге тең i жормал сан киргизиледи. $z = x + iy$ санын комплексли сан деп атаймыз. x санын комплексли санның ҳақыйқый бөлеги деп атайды ҳәм Rez арқалы белгилейди. y саны комплексли санның жормал бөлими деп аталады ҳәм Imz арқалы белгиленеди. Комплексли санға комплексли тегисликтеги вектор сәйкес келеди. Бул тегисликтиң көшерлериниң биреўине комплексли санның ҳақыйқый бөлими, ал екинши көшерине комплексли саннын жормал бөлими қойылады (Қ1.1-сүўрет). Бул вектордың модули $\sqrt{x^2+y^2}$ шамасына тең ҳәм комплексли санның модули деп аталады ($|z|$). x көшери менен вектор арасындағы мүйеш φ дин мәниси:

$$\varphi = \arg z; tg\ \varphi = \frac{Imz}{Rez}.$$



Қ1.1-сүўрет.

Еки комплексли көбеймеси былайынша есапланады:

$$z_1z_2 = (x_1 + iz_1)(z_2 + iy_2) =$$
$$= (x_1x_2 - y_1y_2) + i(x_2y_1 + x_1y_2).$$

$z^* = x - iy$ комплекс саны $z = x + iy$ комплексли санына түйинлес деп аталады. $|z^*| = |z|$ теңлигиниң орынланатуғынлығы өз-өзинен түсиникли. Ал, $\arg z^* = -\arg z$.

$$zz^* = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2 = |z|^2.$$

$|z|^2 = z^2$ теңлиги тек ҳақыйқый санлар ушын орынлы. Улыўма жағдайда комплексли санлар ушын $|z|^2 \neq z^2$. Еки комплексли сан ушын $(z_1z_2)^* = z_1^*z_2^*, (z_1/z_2)^2 = z_1^*/z_2^*$ теңликлериниң орынланатуғынлығын атап өтемиз.

Комплексли санның ҳақыйқый ҳәм жормал бөлимлери оның модели ҳәм аргументи арқалы былайынша анықланады:

$$Rez = |z|\cos\varphi, Imz = |z|\sin\varphi.$$

Комплексли экспонента ушын Эйлер формуласын пайдаланамыз:

$$e^{i\varphi} = \cos\varphi + isin\,\varphi$$

ҳәм бул z комплексли санын

$$z = |z|e^{i\varphi}$$

түринде жаза аламыз.

Комплексли түйинлес сан ушын $z^* = |z|e^{-i\varphi}$.

Егер вектор комплексли тегисликте ω жийилиги менен айланатуғын болса, онда оның ҳақыйқый ҳәм жормал көшерлерге түсирилген проекциялары ўақыттың өтиўине байланыслы

$$Rez = \cos\omega t, Imz = \sin\omega t$$

түринде өзгереди. Бул жағдай $e^{i\varphi}$ комплексли экспонентаның жәрдеминде айланыўды тәрийиплеўдиң мүмкин екенлигин билдиреди.

x көшери бағытында тарқалатуғын толқын векторы k болған толқынды $e^{-i\omega t + ikx}$ комплексли экспонентасының жәрдеминде тәрийиплеген қолайлы. Ал турғын толқынлар ушын, керисинше, $\cos\omega t$ ҳәм $\sin\omega t$ функцияларын пайдаланған қолайлы.

2-қосымша. Базы бир анық интеграллар

Биз бул қосымшада келтирилген анық интеграллардың санлық мәнислериниң ҳәзирги заман математикалық программалаў тиллеринде аңсат есапланылатуғынлығын атап өтемиз. Бундай программалаў тиллерине көп тарқалған Mathematica ҳәм MatLab тиллери киреди.

Биз дәслеп

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi} \tag{2.1}$$

теңлигиниң орынланатуғынлығын дәлиллеймиз. Буның ушын бирдей болған еки интегралдың көбеймесин қараймыз:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}dy = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)}\,dxdy.$$

Поляр координаталар системасына өтемиз.

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)}\,dxdy = \int_{0}^{2\pi} d\varphi \int_{0}^{\infty} e^{-r^2}rdr =$$

$$= 2\pi\frac{1}{2}\int_{0}^{\infty} e^{-r^2}dr^2 = \pi.$$

Буннан (Қ2.1)-аңлатпаны аламыз.

Интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}. \tag{Қ2.2}$$

k пүтин мәниске ийе болған жағдайда

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2k+1}e^{-\alpha x^2}dx = 0 \tag{Қ2.3}$$

туриндеги интеграллардың барлығы да нолге тең. Себеби интеграл белгиси астындағы аңлатпа тақ. Ал,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2k}e^{-\alpha x^2}dx = 0$$

түриндеги интегралды параметр бойынша дифференцияллаў жолы менен есаплаўға болады.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}dx$$

интегралынан α параметри бойынша туўынды аламыз.

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}dx = -\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-\alpha x^2}dx.$$

Екинши тәрептен

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = -\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{\frac{3}{2}}}.$$

Буннан

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}} \qquad (Қ2.4)$$

теңлигиниң орынлы екенлиги келип шығады. α бойынша избе-из дифференциаллап, мыналарды аламыз:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{3}{4}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{5/2}}, \qquad (Қ2.5)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^6 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{15}{8}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{7/2}}, \qquad (Қ2.6)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2k} e^{-\alpha x^2} dx = (-1)^k \frac{\partial^k}{\partial \alpha^k}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\alpha}}\right) = \frac{(2k-1)!!}{2^k}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{(2k+1)/2}}. \qquad (Қ2.7)$$

Бул аңлатпада !! арқалы жуплығы n шамасының жуплығындай болған шаманың 1 ден баслап (2 ден баслап) n ге шекемги көбеймеси белгиленген.

Интеграл астындағы аңлатпаның жуплығына байланыслы

$$\int_{0}^{+\infty} x^{2k} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2k} e^{-\alpha x^2} dx. \qquad (Қ2.8)$$

Енди

$$\int_{0}^{+\infty} x^k e^{-\alpha x} dx \qquad (Қ2.9)$$

түриндеги интегралды да параметр бойынша дифференциаллаў жолы менен алыўға болатуғынлығын атап өтемиз.

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha} \qquad (Қ2.10)$$

интегралын α параметри бойынша избе-из дифференциаллыў арқалы мыналарға ийе боламыз:

$$\int_{0}^{+\infty} x e^{-\alpha x} dx = -\frac{\partial}{\partial \alpha}\int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \frac{1}{\alpha^2}, \qquad (Қ2.11)$$

$$\int_{0}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x} dx = \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}\int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \frac{2}{\alpha^3}, \qquad (Қ2.12)$$

$$\int_{0}^{+\infty} x^n e^{-\alpha x} dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n}\int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}. \qquad (Қ2.13)$$

Енди (Қ2.9)-интегралдың Эйлердиң гамма-функциясы менен байланысын атап өтемиз:

$$\Gamma(x) = \int_{0}^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt.$$

Пүтин сан ушын гамма-функцияның мәнисин

$$\Gamma(n+1) = n!$$

факториалы береди.

3-қосымша. Дирактың дельта-функциясы

Дирактың дельта-функциясы ямаса δ-функция деп төмендегидей шәртлер менен анықланатуғын функцияға айтамыз:

$x \neq 0$ теңсизлиги орынланатуғын жағдайларда

$$\delta(x) = 0.$$

Егер $x = 0$ теңсизлиги орынлы болса, онда

$$\delta(x) = \infty.$$

Усының менен бир қатарда

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1. \tag{Қ3.1}$$

(Қ3.1)-интегралдағы интеграллаў шеклериниң $-\infty$ тен $+\infty$ ге шекем болыўы шәрт емес. Интеграллаў шеклери $x = 0$ ноқатын өз ишине алыўы әҳмийетли.

Дельта-функцияның ен әҳмийетли қәсийетинининң мәниси ықтыярлы $f(x)$ функциясы ушын

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)dx = f(0).$$

теңлигиниң орынлы болыўында.

$\delta(x-a)$ функциясының $x = a$ ноқаты әтирапында қандай қәсийетлерге ийе болса $\delta(x)$ функциясының усы $x = a$ ноқатынын әтирапында тап сондай қәсийетлерге ийе болатуғынлығы айқын. Мысалы

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a)f(x)dx = f(a). \tag{Қ3.2}$$

Үш өлшемли Дирак функциясы бир өлшемли Дирак функциясына уқсас (оны $\delta(\mathbf{r})$ арқалы белгилеймиз. Декарт координаталар системасында

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z).$$

(Қ3.2) қәсийет үш өлшемли дельта-функция жағдайында мына түрге енеди:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)f(\mathbf{r})d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}_0). \tag{Қ3.3}$$

Бул формулада интеграллаў $\mathbf{r}_0$ радиус-векторы менен анықланатуғын ноқатты өз ишине алатуғын барлық көлем бойынша жүргизиледи.

Жоқарыда айтылғандай болып анықланған дельта-функция классикалық талаўда қарап шығылатуғын (үйренилетуғын) функциялар катарына кирмейди. Ҳақыйқатында да $x = 0$ ноқатына ийе қәлеген кесинди бойынша алынған (Қ3.1) интегралы шекли. Ал $\delta(x)$ функциясы болса ноқатларынын барлығында нолге тең. Дельта-функция улыўмаластқан функциялар деп аталатуғын класстың ўәкили болып табылады. Оның мәниси аргументтиң барлық мәнислериниң ишинен қандай да бир шаманы бериў менен анықланбайды, ал оның туўындысының үзликсиз функциялар менен интеграция қағыйдалары менен анықланады.

Дельта-функция қанаатландыратуғын базы бир тийкарғы қатнасларды атап өтемиз:

$$1.\, \delta(-x) = \delta(x). \quad (Қ3.4)$$

$$2.\, f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a). \quad (Қ3.5)$$

Дара жағдайда $x\delta(x) = 0$.

$$3. \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(a-x)\delta(x-b) = \delta(a-b). \quad (Қ3.6)$$

$$4.\, \delta\big(f(x)\big) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\delta(x-x_i)}{\left|\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=x_i}\right|}. \quad (Қ3.7)$$

Бул аңлатпаларда x_i арқалы $f(x)$ функциясының ноли, соның ишинде n арқалы барлық x көшери бойындағы ноллердиң саны белгиленген. Дара жағдайда

$$\delta(ax) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(x), \alpha \neq 0. \quad (Қ3.8)$$

Дельта-функция интеграллық көриниске де ийе болады

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dk \quad (Қ3.9)$$

Дельта-функция жуп болғанлықтан (Қ3.9)-аңлатпаны эквивалентли түрде жазыў мүмкин:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \cos(kx)\, dk \quad (Қ3.10)$$

Үш өлшемли кеңисликте (Қ3.9)-аңлатпаға сәйкес келиўши аңлатпа былайынша жазылады:

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-i\mathbf{kr}}\, d\mathbf{k}, \quad (Қ3.11)$$

ал интеграллаў барлық k кеңслиги бойынша алынады.

δ-функцияның туўындысы

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^n(x) f(x) dx = (-1)^n f^n(0)$$

теңлиги менен анықланады. Бул аңлатпада n арқалы қәлеген сан белгиленген.

Дельта-функция әдеттеги функциялардың избе-излигиниң шеги сыпатында анықланады. Мысалы

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\sqrt{\pi}\varepsilon}\exp\left(-\frac{x^2}{\varepsilon^2}\right), \quad (Қ3.12)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2}, \quad (Қ3.13)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{\sin(\varepsilon x)}{x}, \quad (Қ3.14)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon\to\infty}\frac{1}{\pi\varepsilon}\frac{\sin^2(\varepsilon x)}{x^2}. \quad (Қ3.15)$$

Биз Mathematica универсаллық компьютерлик алгебра системасының жәрдеминде Дирактың дельта-функциясын пайдаланып, бир өлшемли, көп өлшемли жағдайлар ушын аңсат есаплаўлар жүргизе аламыз. Бундай жағдайда сәйкес DiracDelta[x] ҳәм DiracDelta[x_1, x_2, x_3, ...] командаларынан пайдаланыў керек.

4-қосымша. Эрмит полиномлары

λ шамасы базы бир параметр болып табылатуғын

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} - 2x\frac{df(x)}{dx} + \lambda f(x) = 0 \tag{Қ4.1}$$

теңлемесин қараймыз. Усы теңлемениң шешимлерин анықлаў мәселесин қоямыз. Бирақ шешимлердиң x тың қәлеген шекли мәнислеринде шекли болыўы, ал $x \to \pm\infty$ шеклеринде шешимлер x тың шекли дәрежесинен тезирек шексизликке умтылмаўы керек деген шәртти қоямыз. Шешимди төмендегидей атар туринде излеймиз:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k. \tag{Қ4.2}$$

$f(x)$ функциясының биринши ҳәм екинши туўындылары мыналарға тең:

$$\frac{df(x)}{dx} = \sum_{k=0}^{\infty} k a_k x^{k-1}, \tag{Қ4.3}$$

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k x^{k-1} =$$

$$= \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k x^{k-1} = \tag{Қ4.4}$$

$$= \sum_{k=2}^{\infty} (k+1)(k+2) a_{k+1} x^k.$$

(Қ4.3) суммасында биз $k = 0$ ҳәм $k = 1$ мәнислерине сәйкес келетуғын нолге тең барлық ағзаларды алып тасладық. Буннан кейин k шамасын $k + 2$ шамасына алмастырдық.

(Қ4.2) - (Қ4.4) аңлатпаларын (Қ4.1)-аңлатпасына қойсақ

$$\sum_{k=0}^{\infty} (k+1)(k+2) a_{k+2} x^k - 2x \sum_{k=0}^{\infty} k a_k x^{k-1} +$$

$$+\lambda \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k = 0$$

теңлемесин аламыз ямаса x тың екинши ағзасында сумманың астына киргизип

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+1)(k+2) a_{k+2} - 2k a_k + \lambda a_k] x^k = 0$$

теңлемесине ийе боламыз. Алынған теңлеме x тың барлық мәнислери ушын орынланыўы керек. Бирақ бул теңлемениң алыныўы ушын x тың барлық дәрежелериндеги коэффициентлердиң нолге тең болыўы шәрт. Яғный

$$(k+1)(k+2) a_{k+2} - 2k a_k + \lambda a_k = 0$$

қатнасының орын алыўы керек. Буннан

$$a_{k+2} = \frac{2k - \lambda}{(k+1)(k+2)} \qquad (Қ4.5)$$

формуласы келип шығады.

Солай етип биз (Қ4.2)-қатардың a_k коэффициентлери ушын рекуррентли қатнасты алдық. (Қ4.5)-формула бойынша a_k коэффициентлерин избе-из анықлаўға болады. Биринши a_0 ҳәм a_1 коэффициентлери ықтыярлы болып қалады.

$f(x)$ функциясын

$$f(x) = (a_0 + a_2x^2 + a_4x^4 + \cdots) +$$
$$+(a_1x + a_3x^3 + a_5x^5 + \cdots) \equiv f_0(x) + f_1(x)$$

түринде көрсетемиз. Бул аңлатпада $f_0(x)$ арқалы x тың тек жуп, ал $f_1(x)$ арқалы x тың тек тақ дәрежелери қатнасатуғын қатарлар белгиленген. $f_0(x)$ ҳәм $f_1(x)$ қатарлары (Қ4.1)-теңлемениң сызықлы-ғәрезсиз шешимлери болып табылады.

Үлкен k ларда (Қ4.5)-қатнасын әпиўайыластырыўға болады:

$$a_{k+2} = \frac{2}{k+2} a_k. \qquad (Қ4.6)$$

(Қ4.6)-формуланы қәлеген k ушын улыўмаластырамыз. Жуп коэффициентлер ушын мынаған ийемиз:

$$a_{2k} = \frac{a_{2k-2}}{k} = \frac{a_{2k-4}}{k(k-1)} = \frac{a_{2k-6}}{k(k-1)(k-2)} = \cdots = \frac{1}{k!} a_0. \qquad (Қ4.7)$$

(Қ4.7)-формуласын есапқа алсақ, (Қ4.2)-қатарын жуп коэффициентлер ушын төмендегидей етип жазамыз:

$$f_0(x) = a_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^{2k}. \qquad (Қ4.8)$$

Екинши тәрептен e^{x^2} функциясын қатарға жайсақ, бул қатар төмендегидей түрге ийе болады:

$$e^{x^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^{2k}. \qquad (Қ4.9)$$

(Қ4.8) пенен (Қ4.9)-аңлатпаларды салыстырып x тың үлкен мәнислеринде

$$f_0(x) = a_0 e^{x^2}$$

формуласының орынлы екенлигин көремиз.

Биз жуп номерлерге ийе a_k коэффициентлери нолге тең емес деп болжап x тың үлкен мәнислеринде орынлы болатуғын $f_0(x)$ ушын аңлатпа алдық. Тап сол сыяқлы жоллар менен тақ k ларға ийе коэффициентлерди қарап $f_1(x)$ шешими ушын нәтийже ала аламыз.

$x \to \pm\infty$ шегинде e^{x^2} функциясы x тың қәлеген дәрежесине салыстырғанда тезирек үлкейетуғын болғанлықтан (Қ4.1)-теңлемениң биз излеп атырған шешимин табыў ушын $f_0(x)$ тағы ($f_1(x)$ тағы да) қосылыўшылардың саны шекли болыўы керек. Буның ушын k ның базы бир жуп (тақ) мәнисинен баслап a_k коэффициентлериниң мәнислери нолге тең ҳәм $a_1 = 0$ ($a_0 = 0$) болыўы шәрт.

Мейли $a_n \neq 0$, ал $a_{n+2} = 0$ болсын. Бундай жағдайда (Қ4.5)-аңлатпаға сәйкес $2n - \lambda = 0$. Нәтийжеде (Қ4.1) теңлемеси шекли шешимге ийе болатуғын λ шамасының мәнисин аламыз:

$$\lambda = 2n, (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \qquad (Қ4.10)$$

λ саны (Қ4.1) теңлемесиниң меншикли мәнислери деп аталады, ал оның шешимлери - яғный меншикли функциялары

$$f_n \equiv H_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k.$$

көп ағзалысы болып табылады. Оның коэффициентлери

$$a_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k \qquad (Қ4.11)$$

шәртин қанаатландырады. Бундай көп ағзалыны Эрмит полиномлары деп аталады.

$H_n(x)$ Эрмит полиномының ең кейинги нолге тең емес коэффициенти a_n болып табылады. Демек n жуп болғанда полиномда x тең тек жуп дәрежелери, ал n тақ болғанда полиномда x тың тек тақ дәрежелери болады екен. (Қ4.11)-формула n жуп болғанда a_k коэффициентин a_0 арқалы, ал n тақ болғанда a_1 коэффициенти арқалы аңлатыўға мүмкиншилик береди. Ҳәр бир $H_n(x)$ ушын a_0 диң ямаса a_1 диң мәниси нормировка шәртинен анықланады.

Эрмит полиномларын көбинесе

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n} \qquad (Қ4.12)$$

түринде көрсетеди. Усындай жоллар менен анықланған полиномлардың e^{-x^2} салмағы менен ортогонал екенлигин көрсетиўге болады, яғный

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 0, \qquad n \neq m.$$

$n = m$ теңлиги орынланғанда бул интеграл нолге тең емес ҳәм

$$\int_{-\infty}^{+\infty} [H_n(x)]^2 e^{-x^2} dx = n!\, 2^n \sqrt{\pi} \qquad (Қ4.14)$$

шамасына тең.

Эрмиттиң биринши еки полиномы болған $H_0(x)$ ҳәм $H_1(x)$ полиномларын (Қ4.12)-формула бойынша аңсат есаплаўға болады:

$$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x.$$

Эрмиттиң буннан кейинги полиномларын есаплаў ушын

$$H_{n+2}(x) = 2xH_{n+1}(x) - 2(n+1)H_n(x)$$

рекуррентли қатнасынан пайдаланған қолайлы. Мысалы:

$$H_2(x) = 2xH_1(x) - 2H_0(x) = 4x^2 - 2,$$
$$H_3(x) = 2xH_2(x) - 4H_1(x) = 8x^3 - 12x,$$
$$H_4(x) = 2xH_3(x) - 6H_0(x) = 16x^2 - 48x^2 + 12.$$

Биз Mathematica универсаллық компьютерлик системасында Эрмит полингомларын (көп ағзалыларын) есаплаўдың аңсат екенлигин ҳәм бул системада $H_n(x)$ полиномын есаплаў ушын $HermiteH[n, x]$ командасын пайдаланыўдың жеткиликли екенлигин атап өтемиз.

5-қосымша. Чебышев-Легеррдиң бириктирилген функциялары

$$L_n^k(x) = \frac{d^k}{dx^k}\left(e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x})\right) \qquad (Қ5.1)$$

формуласы менен анықланатуғын $L_n^k(x)$ полиномын Чебышев-Легаррдың k тәртипли (дәрежели) бириктирилген полиномы деп атаймыз. Мысалы

$$L_1^0(x) = 1 - x,$$
$$L_2^0(x) = x^2 - 4x + 2,$$
$$L_2^1(x) = 2x - 4;$$
$$L_2^2(x) = 2,$$
$$L_3^1(x) = -3x^2 + 18x - 18.$$

Бирдей k тәртибиндеги ҳәм ҳәр қыйлы ($n \neq m$) дәрежелерине ийе Чебышев-Легаррдың $L_n^k(x)$ ҳәм $L_m^k(x)$ бириктирилген полиномлары $x \in [0, \infty)$ интервалында $\rho(x) = x^k e^{-x}$ салмақ пенен ортогонал, яғный

$$\int_0^\infty x^k e^{-x} L_n^k(x) L_m^k(x)\, dx = 0, n \neq 0. \qquad (Қ5.2)$$

$n = 0$ шәрти орынланғанда Чебышев-Легаррдың бириктирилген полиномларының төмендегидей нормировка шәрти орынлы:

$$\int_0^\infty x^k e^{-x} [L_n^k(x)]^2\, dx = \frac{(n!)^3}{(n-k)!}. \qquad (Қ5.3)$$

$$x\frac{d^2y}{dx^2} + (k + 1 - x)\frac{dy}{dx} + (\lambda - k)y = 0 \qquad (Қ5.4)$$

теңлемеси Легаррдың бириктирилген дифференциаллық теңлемеси деп аталады.

Математикада төмендегидей теорема дәлилленеди: (Қ5.4) теңлемеси $x = 0$ ноқатында шекли ҳәм $x \to +\infty$ болғанда дәрежели үлкейетуғын $y = y(x)$ шешимине ийе болады. Бундай шәртлерди былайынша жазамыз:

$$y(0) \neq 0, \lim_{x \to +\infty} \frac{y(x)}{x^n} = 0.$$

Бул аңлатпада тек $\lambda = n \geq k, (n = 0, 1, 2, \ldots)$ шәрти орынланғанда N натурал сан болып табылады. C дәллигиндеги усындай шешим Чебышев-Легаррдың бириктирилген полиномы болып табылады, яғный

$$y = CL_n^k(x). \qquad (Қ5.5)$$

Водород атомының радиаллық функциясы ушын нормировкалаўшы константаны есаплаў ушын төмендеги интегралдың мәниси керек болады:

$$\int_0^\infty x^{k+1} e^{-x} [L_n^k(x)]^2 dx = \frac{(n!)^3}{(n-k)!}(2n - k + 1) \qquad (Қ5.6)$$

Пайдаланылған әдебиятлардың дизими

Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1983. 664 с.

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

Гречко Л.Г., Сугаков В.И., Томасевич О.Ф., Федорченко А.М. Сборник задач по теоретической физике. Издательство "Высшая школа". Москва. 1972.

Гольдман И.И., Кривченков В.Д. Сборник задач по квантовой механике. Государственное Издательство технико-теоретической литературы. Москва. 1957. 275 с.

Л.А.Головань, Е.А.Константинова, П.А.Форш. Задачи по квантовой механике для химиков. Москва. Физический факультет МГУ. 2010. 154 с.

G.Aruldhas. Quantum Mechanics: 500 Problems with Solutions. PHI Learning Private Limited. New Delhi-110001. 2011. 363 p.

Давыдов А.С. Квантовая механика. Издательство "Наука". Москва. 1973. 704 с.

Казаков К.А. Введение в теоретическую ҳәм квантовую механику. М.: Издательство МГУ. 2008. 232 с.

Копытин И.В., Корнев А.С. Задачи по квантовой механике. Части 1-3. Издательство Воронежского государственного университета. 2004.

Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Том 1. Издательство "Мир". Москва. 1974. 344 с.