

# Шредингер теңдеуін бөлшектердің стационар күйлеріне қатысты қарапайым есептеріне қолдану

Шр-дің стац.т-уін (15) шешуге болатын қарапайым жүйелерді қарастырайық.

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

Олар табиғатта кездесетін физ. жүйелердің идеалданған түрі болғанымен, -1-ден, оларды зерттеу - кв-мех. әдістерді толық түсінуге мүмкіндік береді, -2-ден, алынған нәтижелер нақты жүйелердің қасиеттерін, жуықтап болса да айқындайды.

Бөлш-тің ( $e$ ) п/ш-дағы қозғ-сы жайлы есеп танымдық жағынан қызықты, өйткені:

**п. шұңқырды  $e$ -ды атомда ұстап тұратын күштік өрістің  $\approx$  моделі деп қарастыруға б-ды.**

**П/шұңқыр деп бөлшектің потенц. эн-сы шұңқырдың сыртындағы эн-ядан аз болатын кеңістіктің шектелген бөлігін айтады.**

Кез келген бірөлшемді п/шұңқыр 2 негізгі параметрмен сипатталады:

- п/ эн-ның координатаға тәуелділігімен :  $U = U(x)$
- п/ шұңқырдың  $l$  енімен.

Шұңқырдың ішіндегі  $e$  қозғалысын Шр. теңдеуіне қатысты сипаттау үшін осы 2 параметр жеткілікті.

## 1-мысал. «Потенциялық шұңқырдағы» бөлшек

Массасы  $m$  бөлшектің бірөлшемді тік  $\angle$ -ты  $\infty$  биік, яғни өткізбейтін, қабырғалары бар п/ шұңқырдың ішіндегі әрекетін зерттейік (2-сурет).

Бөлшек  $x$  өсін бойлай қозғалсын.

Оның қозғалысы координаттары  $x = 0$  және  $x = l$  болатын 2 өткізбейтін қабырғамен шектелген.

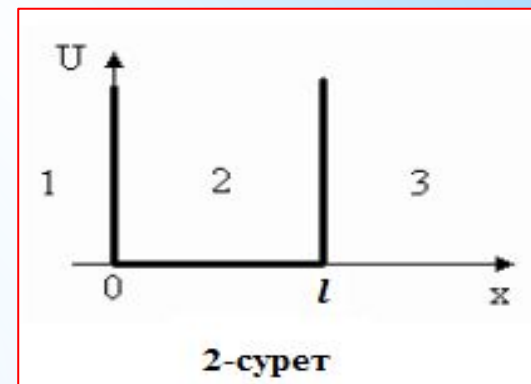
Мұндай шұңқыр бөлшектің  $U(x)$  п/ эн-сының мына түрімен сипатталу к/к:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{егер } x \leq 0 \text{ және } x \geq l, \\ 0, & \text{егер } 0 < x < l. \end{cases}$$

$l$  – пот. «шұңқырдың» ені.

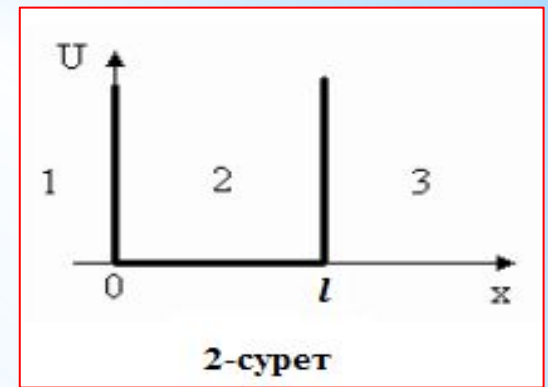
$U(x)$  пот. энергияның сызбасы 2-суретте келтірілген.

$x \leq 0$  аймақты 1-аймақ деп,  $0 < x < l$  аймақты 2- аймақ («потенциялық шұңқыр») деп, ал  $x \geq l$  болатын аймақты 3-аймақ деп айтайық.



## 1) п/шұңқырдағы клас. бөлшек

1) Әуелі осындай шұңқырдағы клас. бөлшекті қарастырайық.



2-аймақта, яғни п/ шұңқырда,  $U(x) = const$ ,  $F = -\frac{dU}{dx} = 0$  б-ды, демек шұңқырда бөлшекке  $F$  әсер етпейді.

Түсініктеме:  $(\vec{E} = -grad \varphi | \cdot q \Rightarrow \vec{F} = -grad q\varphi = -gradU)$

$F$  1-2 ж/е 2-3 шекарада ғана пайда б-ды. Сонда бөлшек п/ ш аралығ-да тұрақты  $v$ -мен инерциямен қозғ-ды,  $\Rightarrow$   
 $T$  кин. эн тұрақты б-ды. Бұл кезде бөлш-тің толық  $E$  эн-сы 0-ден  $\infty$ -ке дейін кез келген мәнге ие бола алады

Ішкі 1- ж/е 3- қабырғаға жақындаған  $e$  кері серпіліп, қарсы қозғ-ды. Осылайша  $e$  п/ ш-дан тыс бола алмайды, ол  $E$ -нің қайсыбір мәнін қабылдап, п/ш-дың кез келген жерінде бірдей ықтималдықпен бола алады.

## 2) кв. мех. заңдарына бағынатын бөлшек

Енді , кв. мех. заңдарына бағынатын бөлшекті қарас-йық: оның әрекеті басқаша б-ды.

Мұны көрсету үшін Шр. стац. теңдеуін (15) бір өлшемді жағдай үшін жазып, шешу керек.

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U)\Psi = 0 \quad (15) \Rightarrow \frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x))\Psi(x) = 0 \quad (1)$$

Бөлшек п/ш-дан өте алмайды, яғни 1 ж/е 3-аймақтарда бола алмағандықтан, осы аймақтарда бөлшекті табу ық-дығы, демек, оның т/ ф-ясы  $\Psi = 0$ .

$\Psi$ - ф-ның үздіксіз болу шартынан ол п/ш-дың шекарасында нөлге тең болу керек, яғни мынадай шекаралық шарт орындалады:

$$\Psi(0) = 0 \quad \text{және} \quad \Psi(l) = 0. \quad (2)$$

2-айм-та  $\Psi \neq 0$ , ал Шр-дің стац. теңдеуінің (15) түрі - тұрақты коэф-тері бар біртекті 2-ші ретті диф. теңдеу түріндей болады:

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + k^2\Psi(x) = 0, \quad (3)$$

мұнда,  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$  (4), (шұңқырда  $U(x) = 0$ )

(3)-т-дің жалпы шешуін мына түрде жазуға б-ды:

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



## Шр-дің стац. тең-нің шешімін алу: $\Psi$ -ф-ны анықтау

(2) шек. шартты:  $\Psi(0) = 0$  және  $\Psi(l) = 0$  қолданып, оны қанағ-тын  $\Psi$ -ф-ның түрін  $\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$  жалпы шешуінен табайық:

- $x = 0$  шартынан шығатыны:  $\Psi(0) = A \sin k0 + B \cos k0 = 0$  - бұл теңдік орындалуы үшін  $B$  коэффициенті нөлге тең болу керек  $B = 0$ , сондықтан  $\Psi(x) = A \sin kx$ .

- $x = l$  шартынан шығатыны:  $\Psi(l) = A \sin kl = 0$  - бұл теңдік орындалу үшін  $\sin kl = 0$  болу керек.

Біріктіріп жазсақ:

$$\begin{cases} A \sin 0 + B \cos 0 = 0 \\ A \sin kl + B \cos kl = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = 0 \\ A \sin kl = 0 \end{cases}$$

Соңғы теңдіктен  $kl = n\pi$  не

$$k = \frac{n\pi}{l}, \quad (5)$$

мұнда  $n = 1, 2, \dots$ . Демек, шұңқырдағы (2-аймақ) бөлшектің  $n$ -ші стационар күйін сипаттайтын  $\Psi$ -функция мынадай болады:

$$\Psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (6)$$

А коэф-тің мәні  $\Psi$ -ф-ның нормалау шартынан (  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$  ) табылады (бөлщ-ті шұңқырдың қайсыбір жерінде табу ықтималдығын білдіреді, ал бұл - сенімді оқиғаның ық-ғы, демек ол = 1):

$$(\Psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x) \quad A^2 \int_0^l \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{l} \right) dx = 1 \quad (7)$$

$$\sin^2 \frac{\alpha}{2} = \frac{1 - \cos \alpha}{2} \Rightarrow \text{бізде } \frac{\alpha}{2} = \frac{n\pi x}{l}$$

$$\begin{aligned} \int_0^l \sin^2 \frac{n\pi x}{l} dx &= \int_0^l \frac{1 - \cos \frac{2n\pi x}{l}}{2} dx = \frac{1}{2} \left( \int_0^l dx - \int_0^l \cos \frac{2n\pi x}{l} dx \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left[ l - \frac{1}{\frac{2n\pi}{l}} \left( \sin \frac{2n\pi x}{l} \Big|_0^l \right) \right] = \frac{1}{2} \left[ l - \frac{l}{2n\pi} (\sin 2\pi n - \sin 0) \right] = \frac{l}{2} \end{aligned}$$

Сонда, (7) бойынша:

$A^2 \frac{l}{2} = 1$ , бұдан  $A = \sqrt{\frac{2}{l}}$ . Ең соңында (6) өрнек ( $\Psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{l} x$ ) былай жазылады:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (8)$$

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

(8) - Шр-дің стац. тең-інің (15) шешімі (меншікті ф-циялары).

## Стац. күйлердегі $E$ эн-ның меншікті мәндері

$\Psi$ -ф-ция шекті, үздіксіз және жатық болу к/к)

$\Psi$ -ф-ға қойылатын осы шарттарды қанағ-тын шешімдер  $E$  эн-ның кейбір мәндерінде ғана б-ды.

Оларды меншікті мәндер д/а, ал эн-лардың осы мәндерінде (15)-т-дің  $(\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\Psi = 0)$  шешімдері болатын  $\Psi$ -ф-лар ( $E$ -нің меншікті мәндеріне сәйкес келетін) - меншікті функциялар д/ а.

Стац. күйлердегі  $E$  эн-ның меншікті мәндерін табу үшін

$$(4) k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \text{ ж/е } (5) k = \frac{n\pi}{l}$$

өрнектерін қолд-йық:

$$k^2 = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \text{ бұдан}$$

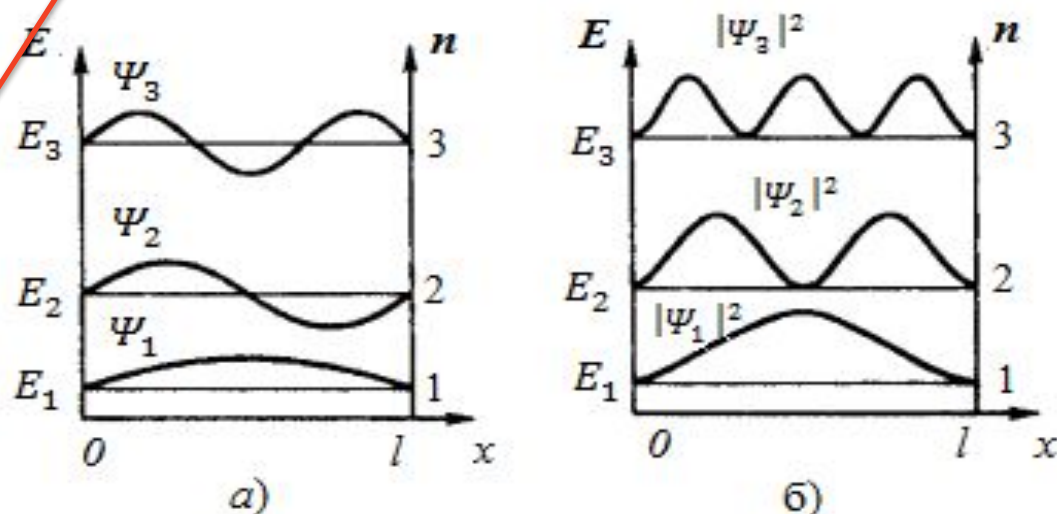
$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 = E_n \quad (9)$$

Шр. теңд-ң (15) шешімдері-меншікті функциялар :

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x$$

Сурет бойынша:  $n = 1, 2, 3$

3, а) суретте  $n = 1, n = 2$  және  $n = 3$  күйлері үшін (9) өрнектегі энергия деңгейлеріне сәйкес келетін меншікті  $\Psi$ -функцияның сызбасы келтірілген:



3-сурет

## Энергет-лық деңгейлердің $\Delta E_n$ аралығын анықтап, талдау

Сонымен,  $\infty$  биік қабырғалы «п.ш-дағы» бөлш-тің қозғ-сын сипат-тын Шр-дің стац. т-уін  $n$  бүтін санға  $\sim$  б-тын эн-ның тек  $E_n$  дискрет. мәндері (меншікті мәндері) ғана қанағ-рады.

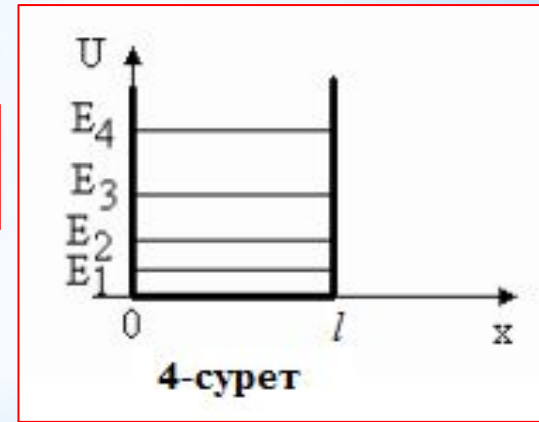
Бұл - п/ш-дағы бөлшек толық  $E$  эн-ның тек қана квантталған мәндеріне ие бола алатынын білдіреді (4-сурет).

Көршілес энергет. деңгейлердің  $\Delta E_n$  аралығы  $n$ -нің артуына байланысты  $\uparrow$  :

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (n+1)^2 - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2 =$$
$$= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n+1) \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n \Rightarrow$$

$$\Delta E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n \quad (10)$$

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



Неғұрлым  $m, l <$  болса  $\Delta E_n >$  б-ды ж/е керісінше.

Мысалы,

- өлшемі  $l = 10^{-1}$  м шұңқырдағы  $e$  үшін  $\Delta E_n \approx 10^{-35} n$  Дж  $\approx 10^{-16} n$  эВ, яғни эн. деңгейлер өте тығыз орналасқан, демек, спектрді үздіксіз (тұтас) деп санауға б-ды.

-егер, шұңқырдың өлшемі атом өлшемімен  $\approx$  болса, ( $l = 10^{-10}$  м), онда  $e$  үшін  $\Delta E_n \approx 10^{-10} n$  Дж  $\approx 10^2 n$  эВ  $\uparrow$ , яғни эн-ның дискретті мәндері алынады (сызықты спектр).



## Эн. деңгей-рдің салыст-малы ар-ғын есептеу

Сол сияқты, (10)  $\Delta E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (2n + 1)$ , (9)  $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} n^2$  ф-дан  $n \rightarrow \infty$  болғанда  $\frac{\Delta E_n}{E_n}$  – деңгей-рдің салыст-малы ар-ғын есептейік:

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} = \frac{2}{n} + \frac{1}{n^2} \approx \frac{2}{n} \rightarrow 0 \quad - \text{яғни көршілес деңгейлер тығыз орналасады..}$$

Сонда  $n$ -нің өте үлкен мәндері (күшті қозулар) үшін кв. мех-ға тән ерекшелік - дискреттілік басылып, үздіксіз, тұтас болып кетеді.

Бұл нәтиже - Бордың сәйкестік принципін (кванттық сандардың жоғары мәндерінде кв. физ-ның заңдары классикалық физика заңдарына өтеді, 1923) дербес жағдайы.

Сонымен, «п/ш-дағы» бөлшекке Шр-дің теңдеуін қолдану - эн-ның квантталған мәндеріне әкеледі.

Ал клас. мех-да бөлшек эн-сының мәніне шектеу қойылмайды.

Сонымен қатар, берілген есепті кв-мех-лық тұрғыда қарастырғанда «п/ш-дағы»

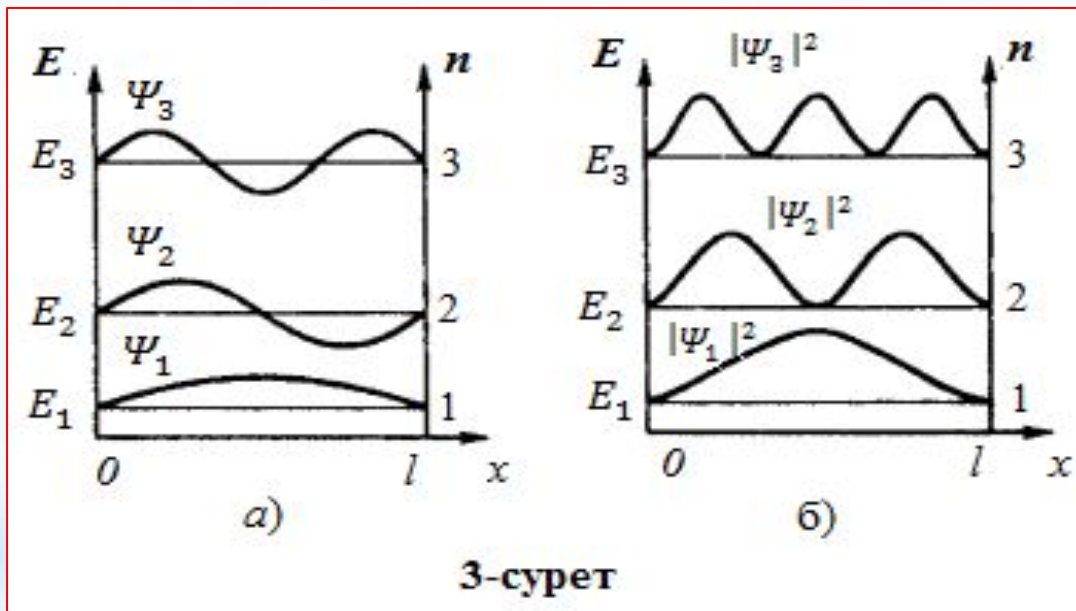
бөлшек минимал  $E_{min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2}$  энергиядан кем болатын энергияға ие бола алмайтыны шығады ( $n = 1$ ).

Ал, қалған барлық деңгейлер ( $n > 1$ ) осы энергиядан артық болады.

## Бөлшекті п/ш-да табу ықтималдығы

$n$ -ші күйдегі бөлшекті п/ш-да табу ық-дығын -  $\Psi_n(x)$  т. ф-ның квадраты  $|\Psi_n(x)|^2$  сипаттайды.

3, б) суретте  $n = 1$ ,  $n = 2$  және  $n = 3$ -ке сәйкес күйлер үшін шұңқырдың қабырғасынан әртүрлі қашықтықтағы бөлшекті табу ықтималдығының тығыздығы -  $|\Psi_n(x)|^2$ -тың сызбасы келтірілген.



Сур: шұңқырда бөлшекті табу ық-ғы оның күйіне ж/е табылу орнына байл-ты. Мысалы,  $n = 2$  кванттық күйде бөлшек шұңқырдың ортасында бола алмайды, оның есесіне ол сол және оң жақта бірдей жиілікпен б-ды.

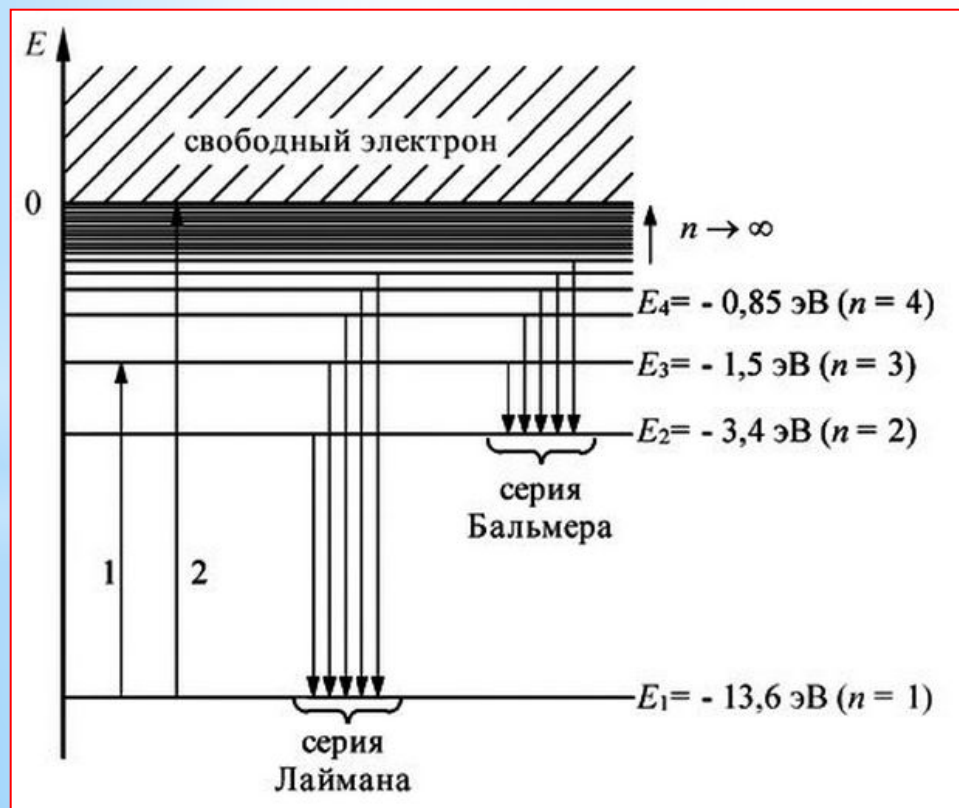
Бөлшектің мұндай қасиеті (әрекеті) - **кв. механикада бөлшектің траекториясы жайлы сөздің негізі жоқ** екендігін білдіреді.

## Қорытынды:

- бөлшектің негізгі күйінің энергиясы  $\neq 0$
- бөлшектің энергиясы квантталған, және оның мәні  $n^2$ -қа пропорционал
- бөлшекті табу ықтималдығы бір нүктеден екінші нүктеге өзгереді
- егер  $n \rightarrow \infty$ , онда шешім классикалыққа өтеді

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

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x$$



$E > 0$  аймағында эн-гетикалық деңгейлер (эн-лық спектр) тұтас болады.  
 $E < 0$  аймағында эн-гетикалық деңгейлер (эн-лық спектр) дискретті болады

## 2-мысал. Бөлшектің потенциалдық тосқауылдан өтуі

Массасы  $m$  және толық энергиясы  $E$  бөлшектің бірөлшемді тікбұрышты потенциалдық тосқауылдан өтуін қарастырайық.

$x$  өсі бөлшектің қозғалысымен сәйкес келсін.

Бөлшек, потенциалдық энергиясы 5-суретте көрсетілген күш өрісінде қозғалады.

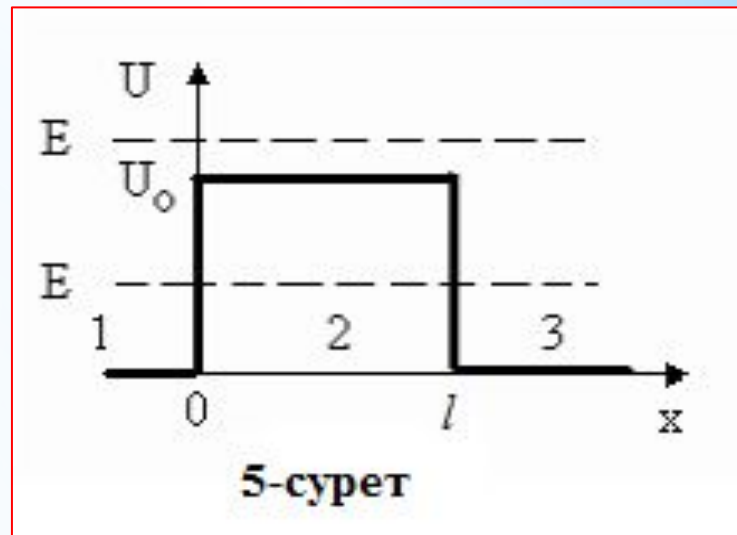
Бұл жағдайда бөлшектің  $U(x)$  потенциалдық энергиясы мына шартты қанағаттандырады:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{егер } x \leq 0 \text{ және } x \geq l, \\ U_0, & \text{егер } 0 < x < l. \end{cases}$$

$x \leq 0$  аймақты 1-аймақ,  $0 < x < l$  аймақты 2-аймақ (биіктігі  $U_0$  тікбұрышты потенциалдық тосқауыл), ал  $x \geq l$  болатын аймақты 3-аймақ деп айтайық.

1) Осы потенциалдық тосқауылдан өткендегі **классикалық** бөлшектің беталысын қарастырайық.

Егер бөлшектің  $E$  толық энергиясы  $U_0$ -ден кіші болса ( $E < U_0$ ), онда бөлшек тосқауылдан серпіліп, 1-аймақта қалады, яғни тосқауылды тесіп өте алмайды. Егер  $E > U_0$  болса, бөлшек тосқауылдан еркін өтіп, 3-аймаққа келеді.





2) **Кванттық** бөлшек ү-н басқаша б-ды.

-  $E < U_0$  кезде б-шектің тосқауылдан өтіп (бұл құб-сты

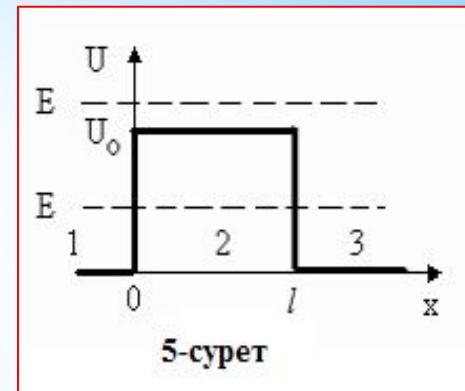
«туннельдік» эффект д/а), 3-ай-та б-уының, және

-  $E > U_0$  кезде бөлшек тосқауылдан серпіліп, 1-ай-та б-уының әрқашан қандай да бір нөлден өзгеше ық-ғы б-ды.

Бұл ықтималдықтарды сипаттау үшін

- потенц. тосқауылдан өту коэффициенті  $D$  және

- потенц. тосқауылдан шағылу коэффициенті  $R$  енгізіледі.



$D$  – бөлшектің пот. тосқауыл арқылы өту ық-малдығына тең және ол, тосқауыл ар-лы өткен қарқындылықтың  $I_{өт}$  тосқауылға түскен де Бройль толқыны қарқын-на  $I_{түс}$  қатынасымен анықталады:

$$D = \frac{I_{өт}}{I_{түс}} \quad (1)$$

$R$  – бөлшектің пот. тосқауылдан шағылу ықтималдығы; ол, тосқауылдан шағылған қарқ-дылықтың  $I_{шағ}$  тосқауылға түскен қарқ-дылыққа  $I_{түс}$  қатынасымен анықталады:

$$R = \frac{I_{шағ}}{I_{түс}} \quad (2)$$

Және де мына қатынас орындалу керек:

$$D + R = 1, \quad (3)$$

$D$  мен  $R$  қосындысы сенімді (шын) оқиғаның ықтималдығын бергендіктен, бөлшек не тосқауыл арқылы өтеді, не тосқауылдан шағылады.

$D$  мен  $R$  коэффициенттерін табу үшін Шр-дің стационар теңдеуін шешу керек:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x))\Psi(x) = 0 \quad (4)$$

$U(x)$  пот. эн. үзілісті ф-ция болғ-тан, мұны ескеріп, берілген Шр. теңдеуін әрбір 1, 2, және 3-аймақ үшін шешу к/к, яғни осы аймақтардағы б-шектің күйін сипаттайтын  $\Psi_1$ ,  $\Psi_2$  және  $\Psi_3$  толқ. ф-цияларды т/к.

$\Psi$  ф-цияның өзінің ж/е  $U(x)$  ф-ясы секірмелі өзгертін аймақтардың шекарасындағы  $\Psi$  ф-цияның  $x$  коорд. б-ша туындысының  $\Psi'$  үзіліссіздік шартынан келесідей шекаралық шарт алынады:

$$\begin{cases} \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \end{cases} \quad \text{және} \quad \begin{cases} \Psi_2(l) = \Psi_3(l) \\ \Psi_2'(l) = \Psi_3'(l) \end{cases} \quad (5)$$

$E > U_0$  деп есептеп, Шр-дің стационар теңдеуін 1-аймақ үшін жазайық:

$$\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + k^2\Psi_1(x) = 0 \quad \text{мұнда} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E; \quad (6)$$

2-аймақ үшін:

$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + q^2\Psi_2(x) = 0 \quad \text{мұнда} \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0); \quad (7) \quad \text{және де} \quad E - U_0 > 0;$$

3-аймақ үшін:

$$\frac{d^2\Psi_3(x)}{dx^2} + k^2\Psi_3(x) = 0 .$$

Тұрақты коэф-ттері бар 3 біртекті 2-ретті диф. теңдеу жаздық. Олардың жалпы шешуін мына түрде жазамыз:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + k^2\Psi_1(x) &= 0; \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \\ \frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + q^2\Psi_2(x) &= 0; \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \\ \frac{d^2\Psi_3(x)}{dx^2} + k^2\Psi_3(x) &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx}, \\ \Psi_2(x) &= a_2 e^{iqx} + b_2 e^{-iqx}, \\ \Psi_3(x) &= a_3 e^{ikx} + \underbrace{b_3 e^{-ikx}}_{=0} = a_3 e^{ikx}. \end{aligned} \quad (9)$$

(Себебі, осы шешімдердің әрқайсысын жоғарыдағы өз теңдеулеріне қойсақ, сәйкес теңдеу орындалады, яғни нөлге тең болады: тексер!).

Жалпы шешім - екі дербес шешімнің суперпозициясы болып табылады, оның әрқайсысы де Бройль жазық толқынын береді.

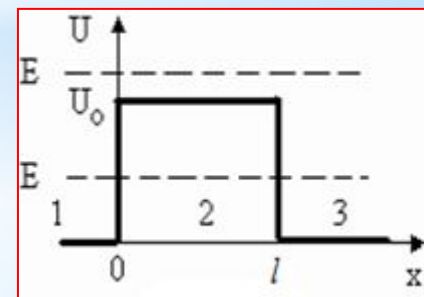
Және де, егер «+» таңбасы бар  $e^{ikx}$  болса, толқын оң  $x$  өсімен бағытталады, ал «-» болса, кері бағытта таралады.

Мысалы,  $\Psi_1(x)$ -дің өрнегінде 1-қосылғыш  $a_1$  амплитудасы бар **түскен** толқынды анықтаса, 2- қос. -  $b_1$  ампл-сы бар **шағылған** толқынды анықтайды. 3-аймақта шағылу жоқ, сондықтан,  $\Psi_3(x)$ -тің өрнегіндегі 2-қосылғыш  $=0$ .

$D$  және  $R$  коэф-дің анықтамасына сәйкес келесідей қатынас жазайық:

$$D = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2} \quad \text{және} \quad R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2} \quad (10) \quad (D = \frac{I_{\text{өт}}}{I_{\text{түс}}}, R = \frac{I_{\text{шағ}}}{I_{\text{түс}}})$$

Сонымен,  $D$  ж/е  $R$  коэф-рін есептеу үшін,  $a_1, b_1$  және  $a_3$  коэф-рін табу қажет.



Ол ү/н (5) шекар. шартты қолдану к/к; ол төрт теңдеу алуға мүмкіндік береді.

Қайта жазып қояйық:

$$\begin{cases} \Psi_1(0) = \Psi_2(0) \\ \Psi_1'(0) = \Psi_2'(0) \end{cases} \text{ ж/е } \begin{cases} \Psi_2(l) = \Psi_3(l) \\ \Psi_2'(l) = \Psi_3'(l) \end{cases} \quad (5)$$

$$\Psi_1(x) = a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx},$$

$$\Psi_2(x) = a_2 e^{iqx} + b_2 e^{-iqx} \quad (9)$$

$$\Psi_3(x) = a_3 e^{ikx}$$

$x = 0$  үшін:

$\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$  шартын (9) өрнектің алғашқы екеуіне қойсақ:

$$a_1 + b_1 = a_2 + b_2 \quad (11)$$

$\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0)$  шартына сәйкес (9) өрнектің алғашқы екеуінен туынды алсақ:

$$\Psi_1'(x) = ika_1 e^{ikx} - ikb_1 e^{-ikx}. \quad \text{Бұдан} \quad \Psi_1'(0) = ika_1 - ikb_1$$

$$\Psi_2'(x) = iqa_2 e^{iqx} - iqb_2 e^{-iqx}. \quad \text{Бұдан} \quad \Psi_2'(0) = iqa_2 - iqb_2.$$

Демек  $\Psi_1'(0) = \Psi_2'(0)$  шарты бойынша  $ika_1 - ikb_1 = iqa_2 - iqb_2$  немесе,

$$ka_1 - kb_1 = qa_2 - qb_2 \quad (12)$$



$$\begin{aligned}
 \Psi_1(x) &= a_1 e^{ikx} + b_1 e^{-ikx}, \\
 \Psi_2(x) &= a_2 e^{iqx} + b_2 e^{-iqx} \\
 \Psi_3(x) &= a_3 e^{ikx}
 \end{aligned}
 \tag{9}$$

$x = l$  үшін:

$\Psi_2(l) = \Psi_3(l)$  шартын (9) өрнекке қойсақ:

$$a_2 e^{iql} + b_2 e^{-iql} = a_3 e^{ikl}, \tag{13}$$

$\Psi'_2(l) = \Psi'_3(l)$  шартын қойсақ:

$$\Psi'_2(x) = iqa_2 e^{iqx} - iqb_2 e^{-iqx}. \text{ Бұдан } \Psi'_2(l) = iqa_2 e^{iql} - iqb_2 e^{-iql}$$

$$\Psi'_3(x) = ika_3 e^{ikx}. \text{ Бұдан } \Psi'_3(l) = ika_3 e^{ikl}$$

Демек,  $\Psi'_2(l) = \Psi'_3(l)$  шартынан

$iqa_2 e^{iql} - iqb_2 e^{-iql} = ika_3 e^{ikl}$ , немесе,  $i$ -ге қысқартып,  $q$ -ге бөлсек:

$$a_2 e^{iql} - b_2 e^{-iql} = a_3 \frac{k}{q} e^{ikl} \tag{14}$$

Бұл теңдеулерді шешіп,  $D$  және  $R$  коэффициенттерін аламыз:

$$D = \left( 1 + \frac{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql}{4k^2 q^2} \right)^{-1},$$

(15)

$$R = \left( 1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql} \right)^{-1}.$$

(15) өрнегінен:

1.  $E > U_0$  кезде  $D \neq 1$  және  $R \neq 0$  болады. Кванттық бөлшек үшін алынған бұл нәтиже классикалық бөлшек үшін орындалатын нәтижеден ( $D = 1$  және  $R = 0$ ) айрықша болады.

2.  $E < U_0$  кезде  $D \neq 0$  және  $R \neq 1$  болады. (Классикалық бөлшек үшін:  $D = 0$  және  $R = 1$  болады).

Жоғарыдағы теңдеулерді біріктіріп, қайта жазайық

$$a_1 + b_1 = a_2 + b_2 \quad (11)$$

$$ika_1 - ikb_1 = qa_2 - qb_2 \quad (12)$$

$$a_2 e^{ql} + b_2 e^{-ql} = a_3 e^{ikl}, \quad (13)$$

$$qa_2 e^{ql} - qb_2 e^{-ql} = ika_3 e^{ikl} \quad (14)$$

Барлық теңдеулерді  $a_1$ -ге бөлейік:

$$1 + b_1/a_1 = a_2/a_1 + b_2/a_1 \quad (11)$$

$$ik - ikb_1/a_1 = qa_2/a_1 - qb_2/a_1 \quad (12)$$

$$a_2 e^{ql}/a_1 + b_2 e^{-ql}/a_1 = a_3 e^{ikl}/a_1 \quad (13)$$

$$qa_2 e^{ql}/a_1 - qb_2 e^{-ql}/a_1 = ia_3 ke^{ikl}/a_1 \quad (14)$$

$$1 + b_1/a_1 = a_2/a_1 + b_2/a_1 \quad (11)$$

$$ik - ikb_1/a_1 = qa_2/a_1 - qb_2/a_1 \quad (12)$$

$$a_2e^{ql}/a_1 + b_2e^{-ql}/a_1 = a_3e^{ikl}/a_1 \quad (13)$$

$$qa_2e^{ql}/a_1 - qb_2e^{-ql}/a_1 = ia_3ke^{ikl}/a_1 \quad (14)$$

Белгілеу енгізейік:

$B_1 = b_1/a_1$  ,  $A_2 = a_2/a_1$  ,  $B_2 = b_2/a_1$  ,  $A_3 = a_3/a_1$  және

$$n = \frac{q}{k} \quad (15)$$

Сонда жоғарыдағы теңдеулер мына түрде жазылады ((12),(14)-ті  $k$ -ға бөліп жазамыз):

$$1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (11)$$

$$i - iB_1 = nA_2 - nB_2 \quad (12)$$

$$A_2e^{ql} + B_2e^{-ql} = A_3e^{ikl} \quad (13)$$

$$nA_2e^{ql} - nB_2e^{-ql} = iA_3e^{ikl} \quad (14)$$



(10) ф-лада белгілеу енгізсек ( $D = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2}$  және  $R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}$  (10)) :

Шағылған және түскен амплитудалар модульдерінің квадраттарының қатынасы

$$R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2} = |B_1|^2 -$$

бөлшектің пот. тосқауылдан шағылу ық-ғын береді, ол шағылу коэф. д/а.

Сол сияқты өткен және түскен толқындар модуль-нің квадр-ның қатынасы

$$D = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2} = |A_3|^2 -$$

б-шектің тосқ-дан өту ық-дығын береді, ол өту коэф. (мөлдірлік коэф-ті) д/а.

Бізге бөлш-тің тосқауылдан өтуі ғана керек, сондықтан  $D$  шаманы табумен шектелеміз. Алайда  $D$ -ны тапсақ,  $R$ -ді де табу оңай, ( $R + D = 1$ ).

Ол үшін (11)-ді ( $1 + B_1 = A_2 + B_2$ )  $i$ -ге көбейтіп, (12)-ге қосайық:

$$\left. \begin{array}{l} i + iB_1 = iA_2 + iB_2 \\ i - iB_1 = nA_2 - nB_2 \end{array} \right\} 2i = (n + i)A_2 + iB_2 - nB_2 \Rightarrow 2i = (n + i)A_2 - (n - i)B_2 \quad (16)$$

Енді, (13)-ті ( $A_2 e^{ql} + B_2 e^{-ql} = A_3 e^{ikl}$ )  $i$ -ге көбейтіп, шыққанын (14)-тен алайық:

$$\left. \begin{array}{l} nA_2 e^{ql} - nB_2 e^{-ql} = iA_3 e^{ikl} \\ - \\ iA_2 e^{ql} + iB_2 e^{-ql} = iA_3 e^{ikl} \end{array} \right\} (n - i) A_2 e^{ql} - (n + i) B_2 e^{-ql} = 0 \quad (17)$$

$$(16) \Rightarrow 2i = (n+i)A_2 - (n-i)B_2: \quad (17) \Rightarrow (n-i)A_2 e^{ql} - (n+i)B_2 e^{-ql} = 0:$$

$$B_2 = \frac{(n+i)A_2 - 2i}{n-i}$$

$$B_2 = \frac{(n-i)A_2 e^{ql}}{(n+i)e^{-ql}} \quad (*)$$

$$[(n+i)A_2 - 2i] \cdot (n+i)e^{-ql} = (n-i)A_2 e^{ql} \cdot (n-i) \Rightarrow$$

$$(n+i)^2 A_2 e^{-ql} - 2i(n+i)e^{-ql} = (n-i)^2 A_2 e^{ql}$$

$$(n+i)^2 A_2 e^{-ql} - (n-i)^2 A_2 e^{ql} = 2i(n+i)e^{-ql} \Rightarrow$$

$$A_2 = \frac{2i(n+i)e^{-ql}}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}} \rightarrow (*):$$

$$B_2 = \frac{(n-i)e^{ql}}{(n+i)e^{-ql}} \cdot \frac{2i(n+i)e^{-ql}}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}} = \frac{2i(n-i)e^{ql}}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}}$$

$A_2$  мен  $B_2$ -ні (13)-ке ( $A_2 e^{ql} + B_2 e^{-ql} = A_3 e^{ikl}$ ) қойып,  $A_3$ -ті табайық:

$$\frac{2i(n+i)e^{-ql} \cdot e^{ql}}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}} + \frac{2i(n-i)e^{ql} \cdot e^{-ql}}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}} = A_3 e^{ikl}$$

$$\frac{2i(n+i+n-i)}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}} = A_3 e^{ikl} \Rightarrow A_3 = \frac{4ni \cdot e^{-ikl}}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}} \quad (18)$$

$$A_3 = \frac{4ni \cdot e^{-ikl}}{(n+i)^2 e^{-ql} - (n-i)^2 e^{ql}} \quad (18)$$

Мұнда  $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)$  және  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

Егер  $E < U_0$  жағдайын қарастырсақ, онда  $E - U_0 < 0$  б-ды, демек  $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$  деп жазуға б-ды.

Әдетте  $ql = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} \cdot l$  шамасы  $\gg 1$  б-ды. Сондықтан (18)-дің бөліміндегі  $e^{-ql}$  көбейткіші бар қосылғышты,  $e^{ql}$  көбейткіші бар қосылғышпен салыстырғанда ескермеуге б-ды

(Түсініктеме:  $e^{-ql} = \frac{1}{e^{ql}} \cong \frac{1}{\infty} = 0$ )

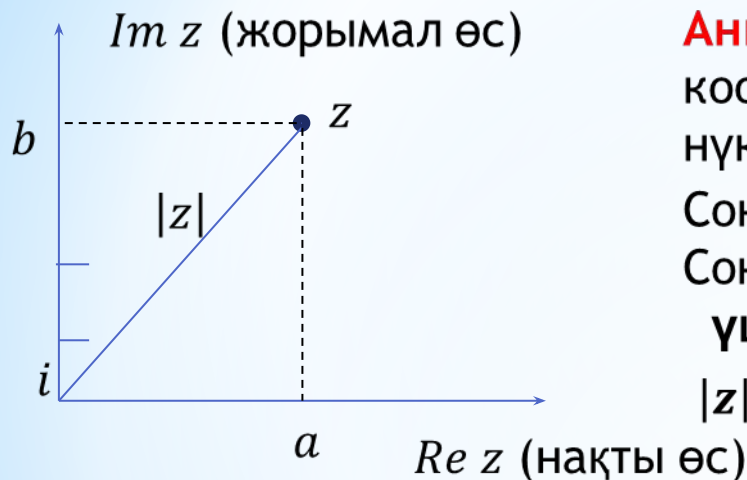
Сонда (18)  $\Rightarrow$

$$A_3 \approx - \frac{4ni \cdot e^{-ikl}}{(n-i)^2 e^{ql}} \quad (19)$$

Бұл шаманың модулінің квадраты  $|A|^2 = D$  – бөлш-тің пот. тосқауылдан өту ықтималдығын береді. Демек, (19)-дың модулінің кв-тын алу к/к.

Сонымен қатар (19)-да:  $|n - 1| = \sqrt{n^2 - 1}$  болу керек.

$|n - 1| = \sqrt{n^2 - 1}$  : Бұған көз жеткізу ү/н, компл. сан түсінігін еске түсір-йік.  
 $z = a + bi$  комплексті санды ( $a, b$  – нақты сандар,  $i$  – жорымал бірлік)  
 жазықтықта кескіндеуге б-ды:



**Анықтама:**  $z$  к/санының модулі  $|z|$  деп коорд-та басынан компл. жаз-тағы сәйкес нүктеге дейін жүргізілген аралықты айтады.  
 Сонда, Пиф. теор. б-ша:  $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$   
 Сондай-ақ,  $z = a + bi$  өрнегін біздің жағдай үшін  $z = n - i$  жазсақ ( $a = n, b = -1$ ):  
 $|z| = |n - i| = \sqrt{a^2 + b^2} = \sqrt{n^2 + 1}$  д.к.о.е.

Сонда (19)- $(A_3 \approx -\frac{4ni \cdot e^{-ikl}}{(n-i)^2 e^{ql}})$  өрнегі мынадай б-ды:

$$D = |A_3|^2 = \frac{16n^2}{(n^2 + 1)^2} \cdot e^{-2ql} \quad (20),$$

мұнда  $|e^{-ikl}|^2 = e^{-ikl} \cdot e^{ikl} = \frac{e^{ikl}}{e^{ikl}} = 1$

Келесі: (20)-да  $\frac{16n^2}{(n^2+1)^2}$  өрнегінің шамасы  $\approx 1$

Түсініктеме:  $\frac{16x}{(x+1)^2}$  функциясы  $x = 1$  нүктеде тах мәнге: 4-ке ие б-ды.

$x$  мәні  $0,04 \div 14$  аралығында болғанда, ф-яның мәні 1-ден 4-ке дейінгі []-да Є.



Сонда (20)-дан ( $D = |A_3|^2 = \frac{16n^2}{(n^2+1)^2} \cdot e^{-2ql}$ ) қалатыны ( $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)$ ) :

$$D = |A_3|^2 = e^{-2ql} = e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)} \cdot l} \quad (21)$$

Қорытынды. Бөлшектің пот. тосқ-дан өту ық-ы  $D$  тәуелді:

- $l$  – тосқауыл еніне;
- тосқауылдың  $E$ -ден қаншалықты артық болуына, яғни  $(U_0 - E)$  айыр-ға.

Мысал.  $l$ -дің қайсібір мәнінде  $D = 0,01$  болсын.

1. Егер  $l$  2 рет артса, онда  $D$  шамасы қалай өзгереді?

Жауап: (21)  $\Rightarrow D_1 = 0,01 = \frac{1}{100^1} = \frac{1}{e^{c \cdot l}} \mid l \Rightarrow 2l \mid \Rightarrow D_2 = \frac{1}{100^2} = \frac{1}{e^{c \cdot 2l}} = \frac{1}{10^4} = 0,0001$

$$\frac{D_1}{D_2} = \frac{0,01}{0,0001} = 100 \Rightarrow D_2 < D_1 - \text{ден } 100 \text{ есе.}$$

2. Дәл осындай нәтиже алушы едік, егер  $(U_0 - E)$  шамасы 4 есе артса.

Себебі,  $\sqrt{(U_0 - E)}$  түбір астында болғ-тан, 4-ші дәрежеге шығару керек ( $2l$ -ге келтіру үшін).

Сондай-ақ, (21)-ден:  $D \sim \frac{1}{e^{\sqrt{m}}} \Rightarrow$  бөлш-тің  $m$  артқанда  $D$  өту коэф-ті күрт азаяды.

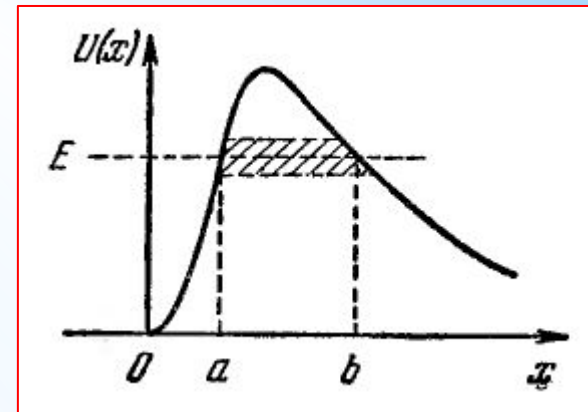
Егер потенциалдық тосқауылдың пішіні кез келген болса (сурет), онда

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} l}$$

формуласы жалпы формуламен ауыстырылу керек:

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U-E)} dx}$$

мұнда  $U = U(x)$ .



Пот. тосқ-дан өткенде, бөлшек, осы тосқауылдағы «туннель» ар-лы өткендей б-ды (штрихталған аймақ).  $\Rightarrow$  біз қарастырған мысал «**туннельді эффект**» д/а.

**Клас. тұрғыда** т/эф - ақылға сыймайтын, заңға қайшы келетін құбылыс болып көрінеді. Яғни, туннельде болған бөлшек теріс кин. эн-ға ие болушы еді ( $E < U$ ). Алайда, туннель түсінігі - ерекше, өзіндік кв-тық құб-с, кл. физ-да баламасы жоқ.

**Кв. мех-да** толық эн-ны - кин. және пот. деп бөлудің мағынасы жоқ, себебі Гейз-тің анық. принц-не қайшы келеді. Шынында да, егер бөлшектің нақты бір Т кин. эн-сы бар десек, оның нақты Р имп-сі б-ды.

Осы сияқты, бөлш-тің нақты бір U пот. эн-сы бар деген сөз,  $\Rightarrow$  бөлшек кеңістіктің белгілі бір нүк-де б-ды.

Алайда, анық. принц. б-ша, бөлш-тің имп-сі мен коорд-сы бір мезетте нақты мәнге ие бола алмайды, яғни бір мезетте Т ж/е U дәл анық-ла алмайды.

Сонымен,  $E$  толық эн-ның нақты мәні болғанымен, ол нақты анықталған  $T$  ж/е  $U$  қосындысы түрінде беріле алмайды.

Бұдан: туннельде  $T < 0$  б-ды деген қорытындының негізі жоқ - негізсіз пайымдау.

Мысал (CPC)

Талдау: Савельев 329-330 б. (CPC)