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 ≈ моделі деп қарастыруға б-ды.

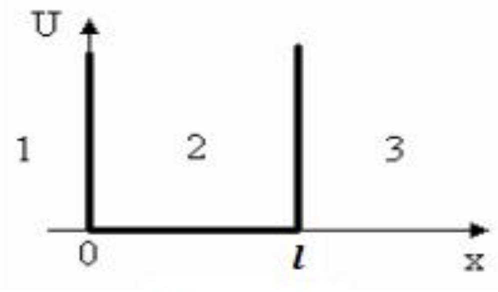
П/шұңқыр деп бөлшектің потенц. эн-сы шұңқырдың сыртындағы эн-ядан аз болатын кеңістіктің шектелген бөлігін айтады.

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 бөлш-тің бірөлшемді тік ∠-ты ∞ биік, яғни өткізбейтін, қабырғалары бар п/ шұңқырдың ішіндегі әрекетін зерттейік (2-сурет).



2-сурет

Бөлшек x өсін бойлай қозғалсын.

Оның қозғалысы коорд-лары $x = 0$ және $x = l$ болатын 2 өткізбейтін қабырғамен шектелген.

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

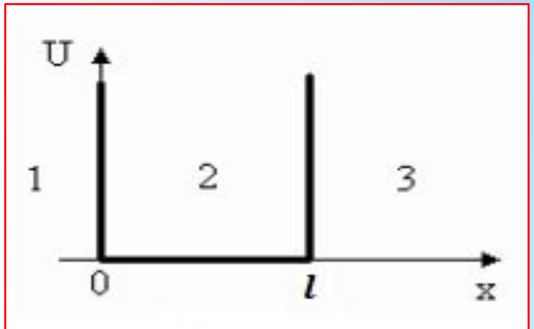
$$\boldsymbol{U(x)} = \begin{cases} \infty, & \text{егер } \boldsymbol{x \le 0} \text{ және } \boldsymbol{x \ge l}, \\ \boldsymbol{0}, & \text{егер } \boldsymbol{0 < x < l}. \end{cases}$$

l – пот. «шұңқырдың» ені.

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

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

1) п/шұңқырдағы клас. бөлшек



2-сурет

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

F 1-2 ж/е 2-3 шекарада ғана пайда б-ды. Сонда бөлшек п/ ш аралығ-да тұрақты ϑ-мен инерциямен қозғ-ды, $\Rightarrow$
T кин. эн тұрақты б-ды. Бұл кезде бөлш-тің толық E эн-сы 0-ден ∞-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.

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

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 Ψ= 0.
Ψ- ф-ның үздіксіз болу шартынан ол п/ш-дың шекарасында нөлге тең болу керек, яғни мынадай шекаралық шарт орындалады:

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

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

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

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

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

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

Шр-дің стац. тең-нің шешімін алу: Ψ-ф-ны анықтау

(2) шек. шартты: $\Psi(0) = 0$ және $\Psi(l) = 0$ қолданып, оны қанағ-тын Ψ-ф-ның түрін $\Psi(x) = Asinkx + Bcoskx$ жалпы шешуінен табайық:

-$x = 0$ шартынан шығатыны: $\Psi(0) = Asink0 + Bcosk0 = 0$ - бұл теңдік орындалуы үшін B коэффициенті нөлге тең болу керек $B = 0$, сондықтан $\Psi(x) = Asinkx$.
-$x = l$ шартынан шығатыны: $\Psi(l) = Asinkl = 0$ - бұл теңдік орындалу үшін $sinkl = 0$ болу керек.

Біріктіріп жазсақ:

$$\begin{cases} Asin0 + Bcos0 = 0 \\ Asinkl + Bcoskl = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = 0 \\ Asinkl = 0 \end{cases}$$

Соңғы теңдіктен $kl = n\pi$ не

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

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

$$\boxed{\Psi_n(x) = Asin\frac{n\pi}{l}x \qquad (6)}$$

A коэф-тің мәні Ψ-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):

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

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

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

$$\int_0^l \sin^2\frac{n\pi x}{l}dx = \int_0^l \frac{1-\cos\frac{2n\pi x}{l}}{2}dx = \frac{1}{2}\left(\int_0^l dx - \int_0^l \cos\frac{2n\pi x}{l}dx\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left[l - \frac{1}{\frac{2n\pi}{l}}\left(\sin\frac{2\pi nx}{l}\,\Big|_0^l\right)\right] = \frac{1}{2}\left[l - \frac{l}{2\pi n}(\sin 2\pi n - \sin 0)\right] = \frac{l}{2}$$

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:

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

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

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

Стац. күйлердегі *E* эн-ның меншікті мәндері

Ψ-ф-ция шекті, үздіксіз және жатық болу к/к)

Ψ-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 Ψ-ф-лар (*E*-нің меншікті мәндеріне сәйкес келетін) - *меншікті функциялар* д/ а.

Стац. күйлердегі *E* эн-ның меншікті мәндерін табу үшін (4) $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ ж/е (5) $k = \frac{n\pi}{l}$ өрнектерін қолд-йық:

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

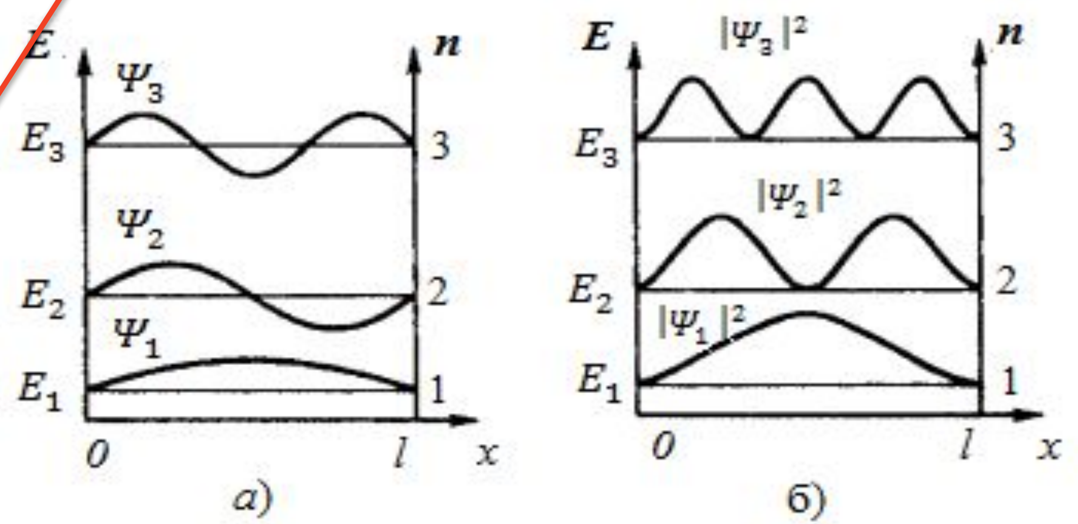
$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 = E_n \qquad (9)$$

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 Ψ-функцияның сызбасы келтірілген:



3-сурет

Энергет-лық деңгейлердің ΔE_n аралығын анықтап, талдау

Сонымен, <u>∞ биік</u> 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 <u>квантталған мәндеріне</u> ие бола алатынын білдіреді (4-сурет).

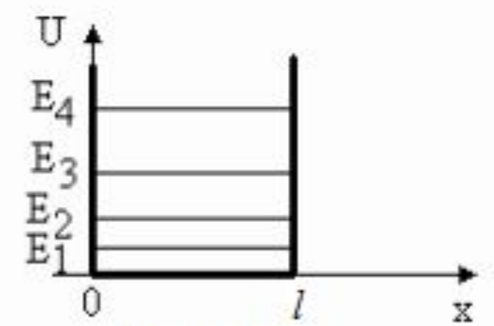
Көршілес энергет. деңгейлердің ΔE_n аралығы n-нің артуына байланысты $\uparrow$:

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

$$= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1) \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n \;\Rightarrow$$

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

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



4-сурет

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 <u>үздіксіз</u> (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 $n \to \infty$ болғанда $\frac{\Delta E_n}{E_n}$ –деңгей-рдің салыст-малы ар-ғын есептейік:

$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} = \frac{2}{n} + \frac{1}{n^2} \approx \frac{2}{n} \to 0$ - 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 принципінің (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.

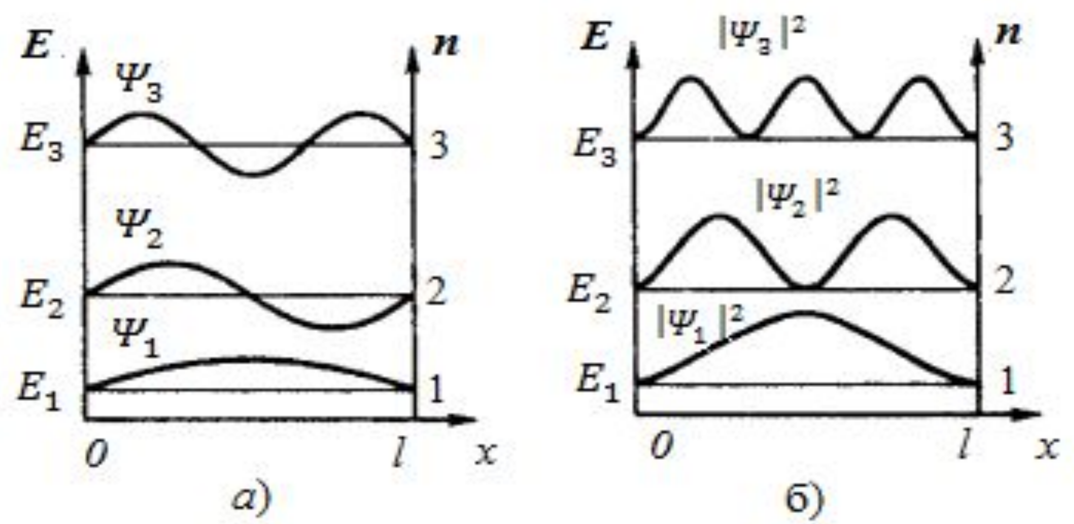
Ал клас. мех-да бөлшек эн-сының мәніне шектеу қойылмайды.

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.



3-сурет

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.

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

Қорытынды:

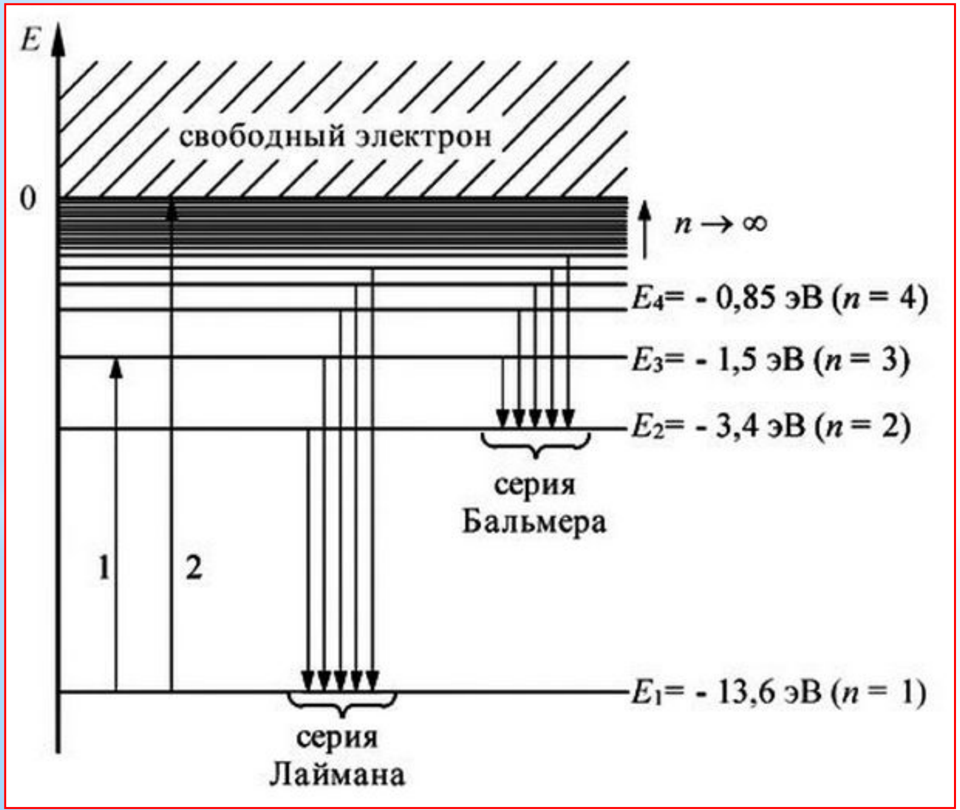
-бөлшектің негізгі күйінің энергиясы $\neq 0$

-бөлшектің энергиясы кванттталған, және оның мәні n^2-қа пропорционал

-бөлшекті табу ықтималдығы бір нүктеден екінші нүктеге өзгереді

-егер $n \to \infty$, онда шешім классикалыққа өтеді

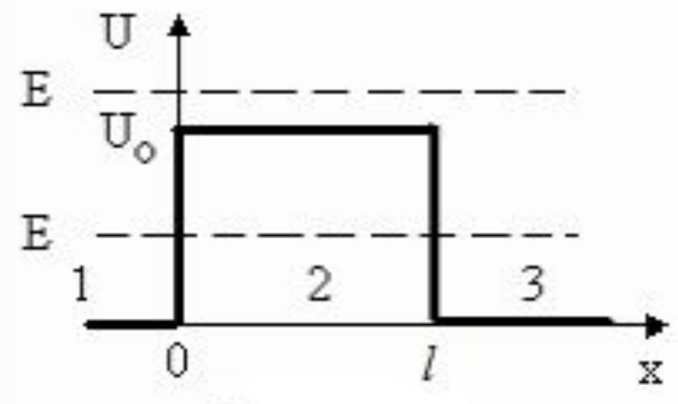
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x$$



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 потенциялық тосқауылдан өтуі**

Массасы m және толық энергиясы E бөлшектің біролшемді тікбұрышты потенциялдық тосқауылдан өтуін қарастырайық.
X өсі бөлшектің қозғалысымен сәйкес келсін.
Бөлшек, потенциялық энергиясы 5-суретте көрсетілген күш өрісінде қозғалады.
Бұл жағдайда бөлшектің $U(x)$ потенциялық энергиясы мына шартты қанағаттандырады:



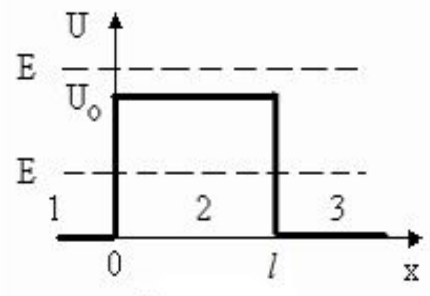
5-сурет

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

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

1) **Осы потенциялдық 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.



5-сурет

$D -$ 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:

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

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

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

Және де мына қатынас орындалу керек:

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

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:

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

$U(x)$ 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 Ψ_1, Ψ_2 және Ψ_3 толқ. ф-цияларды т/к.
Ψ ф-цияның өзінің ж/е $U(x)$ ф-ясы секірмелі өзгеретін аймақтардың шекарасындағы Ψ ф-цияның x коорд. б-ша туындысының Ψ' үзіліссіздік шартынан келесідей шекаралық шарт алынады:

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

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

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

2-аймақ үшін:

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

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:

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

$$\begin{aligned}\Psi_1(x)&=a_1e^{ikx}+b_1e^{-ikx},\\ \Psi_2(x)&=a_2e^{iqx}+b_2e^{-iqx},\\ \Psi_3(x)&=a_3e^{ikx}+\underbrace{b_3e^{-ikx}}_{=0}=a_3e^{ikx}.\end{aligned}\qquad(9)$$

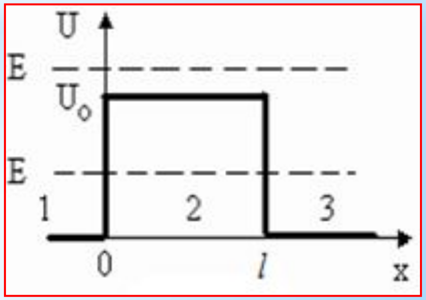
(Себебі, осы шешімдердің әрқайсысын жоғарыдағы өз теңдеулеріне қойсақ, сәйкес теңдеу орындалады, яғни нөлге тең болады: тексер!).

Жалпы шешім - екі дербес шешімнің суперпозициясы болып табылады, оның әрқайсысы де Бройль жазық толқынын береді.
Және де, егер «+» таңбасы бар exp 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:

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

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:

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

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

<u>$x = 0$ үшін:</u>

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

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

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

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

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

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

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

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

$x = l$ үшін:

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

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

$\Psi_2'(l) = \Psi_3'(l)$ шартын қойсақ:

$\Psi_2'(x) = iqa_2 e^{iqx} - iqb_2 e^{-iqx}$. Бұдан $\Psi_2'(l) = iqa_2 e^{iql} - iqb_2 e^{-iql}$

$\Psi_3'(x) = ika_3 e^{ikx}$. 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:

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

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

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

$$R = \left(1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2)^2 \sin^2 ql}\right)^{-1}. \tag{15}$$

(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

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

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

$$a_2e^{ql} + b_2e^{-ql} = a_3e^{ikl}, \qquad (13)$$

$$qa_2e^{ql} - qb_2e^{-ql} = ika_3e^{ikl} \qquad (14)$$

Барлық теңдеулерді a_1-ге бөлейік:

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

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

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

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

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

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

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

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

Белгілеу енгізейік:

$\boldsymbol{B_1 = b_1/a_1}$, $\boldsymbol{A_2 = a_2/a_1}$, $\boldsymbol{B_2 = b_2/a_1}$, $\boldsymbol{A_3 = a_3/a_1}$ **және**

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

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

$$1 + B_1 = A_2 + B_2 \qquad (11)$$
$$i - iB_1 = nA_2 - nB_2 \qquad (12)$$
$$A_2 e^{ql} + B_2 e^{-ql} = A_3 e^{ikl} \qquad (13)$$
$$nA_2 e^{ql} - nB_2 e^{-ql} = iA_3 e^{ikl} \qquad (14)$$

(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:

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

Енді, (13)-ті ($A_2e^{ql} + B_2e^{-ql} = A_3e^{ikl}$) i-ге көбейтіп, шыққанын (14)-тен алайық:

$$\left.\begin{aligned} & nA_2e^{ql} - nB_2e^{-ql} = iA_3e^{ikl} \\ - & \\ & iA_2e^{ql} + iB_2e^{-ql} = iA_3e^{ikl} \end{aligned}\right\} (n-i)\, A_2e^{ql} - (n+i)B_2e^{-ql} = 0 \qquad (17)$$

$(16) \Rightarrow 2i = (n+i)A_2 - (n-i)B_2$:

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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 >>1 б-ды. Сондықтан (18)-дің бөліміндегі e^{-ql} көбейткіші бар қосылғышты, e^{ql} көбейткіші бар қосылғышпен салыстырғанда ескермеуге б-ды

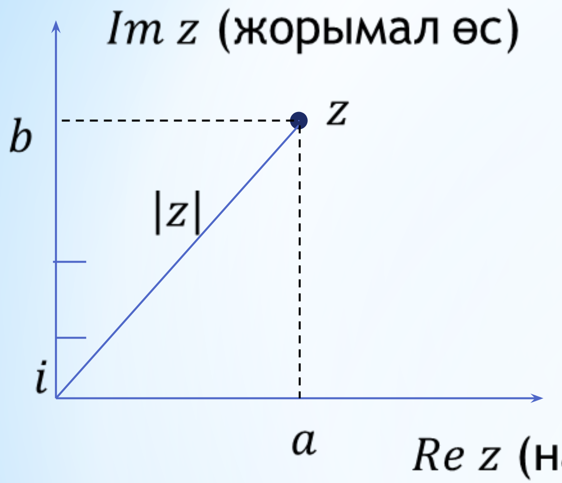
(Түсініктеме: $e^{-ql} = \frac{1}{e^{ql}} \cong \frac{1}{\infty} = 0$)

Сонда (18) $\Rightarrow$

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

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.**
$\boldsymbol{z = a + bi}$ **комплексті санды ($\boldsymbol{a, b}$ – нақты сандар, $\boldsymbol{i}$ – 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, $\boldsymbol{z = a + bi}$ **өрнегін біздің жағдай үшін** $\boldsymbol{z = n - i}$ **жазсақ** $\boldsymbol{(a = n, b = -1)}$**:**

$$\boldsymbol{|z| = |n-i| = \sqrt{a^2+b^2} = \sqrt{n^2+1}}$$ д.к.о.е.

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

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

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

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

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

x мәні 0,04÷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 ($q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)$) :

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

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) $\Rightarrow D_1 = 0,01 = \frac{1}{100^1} = \frac{1}{e^{c\cdot l}} \;\Big|\; l \Rightarrow 2l \;\Big|\; \Rightarrow D_2 = \frac{1}{100^2} = \frac{1}{e^{c\cdot 2l}} = \frac{1}{10^4} = 0,0001$

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

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.

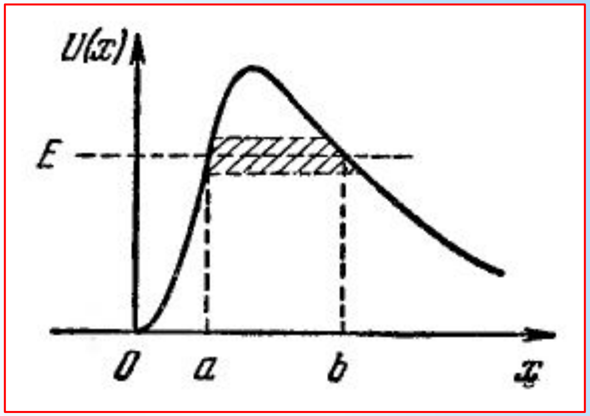
Егер потенциалдық тосқауылдың пішіні кез келген болса (сурет), онда

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

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). ⇒ 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,⇒ 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, Е толық эн-ның нақты мәні болғанымен, ол нақты анықталған Т ж/е U қосындысы түрінде беріле алмайды.
Бұдан: туннельде Т<0 б-ды деген қорытындының негізі жоқ – негізсіз пайымдау.
Мысал (СРС)

Талдау: Савельев 329-330 б. (СРС)