## Физикалық шамалардың кванталуы

- *Стационарлық күйлер. Стационарлық күйлер үшін Шредингер теңдеуі*
- *Кванттау. Меншікті мәндер мен меншікті функциялар*
- *Тік бұрышты потенциалдық шұңқырдағы бөлшек*

  *Шұңқырдағы бөлшектің потенциалдық энергиясы*

  *Шұңқырдағы бөлшек үшін Шредингер теңдеуі*

  *Шредингер теңдеуінің жалпы шешімі*

  *Потенциалдық шұңқырдағы бөлшектің потенциалдық энергия дңгейлері*

  *Потенциалдық шұңқырдағы бөлшектің толқындық функциялары*

  *Бөлшектің әр түрлі кванттық күйлерде болуының ықтималдық тығыздығы*
- *Гармоникалық осциллятор*

  *Гармоникалық осциллятордың потенциалдық энергиясы*

  *Гармоникалық осциллятор үшін Шредингер теңдеуі*

  *Гармоникалық осциллятордың энергия деңгейлері*

*.1. Кванттық және классикалық осциллятор үшін ықтималдық тығыздығы*

**1.** Зат бөлшектерінің толқындық қасиеттері жайындағы де Бройль идеясын дамыта келе, Э.Шредингер кванттық механиканың негізгі теңдеуін постулат ретінде тұжырымдады (1926). Осы теңдеу әр түрлі күш өрістерінде қозғалатын бөлшектің толқындық функцияларын табуға мүмкіндік береді. Шредингер теңдеуі былай жазылады:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi\ , \qquad (1)$$

мұндағы $m$ – бөлшек массасы, $i$ – жорамал бірлік ($\sqrt{-1}$), $U$ – бөлшектің потенциалдық энергиясы, $\Delta \equiv \nabla^2$ – Лаплас операторы. (1) теңдеуінен толқындық функцияның түрін $U$ функция, яғни түптеп келгенде бөлшекке әсер ететін күштердің сипаты анықтайтындығы шығады.

Шредингер теңдеуінің дұрыстығы теория нәтижелерінің эксперимент деректерімен толық үйлесуімен, және де практикада қолданыс тапқан, көптеген болжауларымен расталады.

Кванттық теорияда ерекше рольді **стационарлық күйлер** атқарады, бұларда барлық бақыланатын физикалық шамалар уақыт өткенде өзгермейді.

$\psi$-функцияның өзі негізінде бақыланбайды. Стационарлық күйлерде ол мына түрге келеді

$$\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-i\omega t},\omega=E/\hbar, \tag{2}$$

мұндағы $\psi(\vec{r})$ – функция уақытқа тәуелді емес; $\psi(\vec{r}) = \psi(x,y,z)$.

$\psi$-функция осылай өрнектелгенде $w$ ықтималдық тығыздығы тұрақты болып қалады. Шынында да

$$w=\psi\psi^{*}=\psi(\vec{r})\psi^{*}(\vec{r}), \tag{3}$$

яғни $w$ ықтималдық тығыздығы уақытқа тәуелді емес.

Стационарлық күйлердегі $\psi(\vec{r})$-функцияны табу үшін (2) өрнекті (1) теңдеуіне қоямыз, сонда мына теңдеу шығады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\psi=E\psi\ , \ (4) \quad \Delta\psi+-\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-U(\vec{r})\right]\psi=0\ . \qquad (4)$$

Бұл теңдеу **стационарлық күйлер үшін Шредингер теңдеуі** деп аталады. (1) теңдеуін Шредингердің жалпы теңдеуі дейді.

**2. Кванттaлу.** Бордың теориясында кванттaлу жасанды түрде ендірілген болса, Шредингер теориясында ол өзінен-өзі шығады. Сонда (4) теңдеуінің шешімдері ішінен физикалық мағынаға **табиғи** немесе **үлгі (стандарт) шарттарды** қанағаттандыратын шешімдері ғана ие болатынын ескеру жеткілікті болады. Осы шарттарға сәйкес барлық кеңістікте $\psi(\vec{r})$-функция шектелген, бір мәнді, үздіксіз болуы тиіс.

Осы шарттарды қанағаттандыратын шешімдер $E$ энергияның кейбір мәндерінде ғана мүмкін болады екен. Бұларды **меншікті мәндер** деп, ал энергияның осы мәндерінде (4) теңдеуінің шешімдері болып табылатын $\psi(\vec{r})$-функциялары $E$-нің меншікті мәндеріне сай **меншікті функциялар** деп аталады. Кванттaлудың табиғи және жалпы принципі осы.

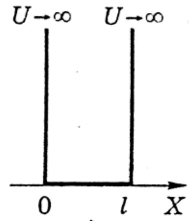
$E$-энергияның меншікті мәндері тиісті стационарлық күйлерге сай энергияның мүмкін мәндері ретінде қабылданады. $E$-энергияның осы мәндері **дискретті** немесе **үздіксіз энергетикалық спектр** түзіп **дискретті** (кванттaлған) немесе **үздіксіз** болуы мүмкін.

Осы теңдеуді тұжырымдап, Шредингер оны бірден сутегі атомына қолданды. Сонда энергия деңгейлерінің спектрі үшін Бордың теориясында алынған спектрмен дәл келетін, демек, бақылау нәтижелерімен дәл келетін спектр алынды.

Бөлшектің меншікті функциялдығын және меншікті энергия мәндерін анықтау үшін Шредингер теңдеуін қоданудың екі мысалын қарастырайық.

### 3. Тік бұрышты потенциалдық шұңқырдағы бөлшек

**3.1.** Шексіз терең бір өлшемді потен-циалдық шұңқырдағы бөлшек үшін меншікті энергия мәндері мен бұларға сәйкес меншікті функцияларды табайық. Массасы m бөлшек (электрон) тек x осі бойымен қозғала алатын болсын; және қозғалыс бөлшекті өткізбейтін x=0 және x=$\ell$ қабырғаларымен шектелген болсын. Осы жағдайда U потенциалдық энергияның түрі 1-суретте көрсетілгендей: $0 \le x \le \ell$ болғанда U=0, x<0 және x>$\ell$ болғанда U=∞ болады.



1-сурет

**3.2.** Шұңқыр ішінде ***U****=0* болатындықтан (4) Шредингер теңдеуі осы жағдайда былай жазылады:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 . \qquad (5)$$

$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ белгілеуін енгізіп, тербелістер теориясынан белгілі теңдеу алынады: $\psi'' + k^2\psi = 0$ .

**3.3**.Бұл теңдеудің жалпы шешімі белгілі, ол мынадай:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx. . \qquad (6)$$

*ψ(0)=0* шекаралық шартынан *B=0* болатындығы шығады; демек *ψ(x)=Asinkx*. (6а)

*ψ(ℓ)=0* шартынан *ψ(ℓ)=Asinkℓ=0* болатындығы шығады, бұл егер

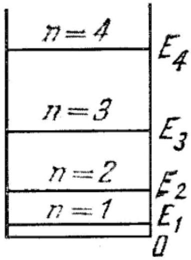
$$k\ell = \pm n\pi\left(n = 1,2,...\right) \qquad (7)$$

болған жағдайда ғана мүмкін болады.

**3.4.** (7) теңдігінің екі жағын да квадраттап және $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ өрнегін ескеріп, бөлшек энергиясының мәнін табамыз:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}n^2 \quad (n = 1,2,...) . \qquad (8)$$

Демек, *E* энергия дискреттік мәндер жиынтығын




2 -сурет

қабылдайды. (8) өрнек қарастырылған потенциалдық шұңқырдағы бөлшектің энергиясын анықтайды. $E_n$ деңгейге сәйкес келетін $n$ бүтін саны осы деңгейдің кванттық саны деп аталады. 2-суретте бөлшектің бірнеше энергия деңгейлерінің орналасуы көрсетілген. Ең аз энергиясы бар күй – негізгі, қалғандары – қозған күй деп аталады. Көрші деңгейлердің аралығы былай анықталады:

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

Яғни бөлшек массасы және шұңқыр ені кеміген сайын $\Delta E$ арта түседі. $n$ артқанда $\Delta E / E_n \approx 1/n$ қатынасы кемиді. Осыдан кванттық күйлердің дискреттігі кіші ***n*** жағдайында айқын байқалады да, үлкен ***n*** жағдайында бәсеңдеп, іс жүзінде жоғалады.

**3.5.** Енді толқындық функцияны табайық. Ол үшін $A$ коэффициент шамасын анықтау керек. Бөлшектің $0 \le x \le l$ аймақта бар екені анық, яғни

$$\int_0^l |\psi|^2 dx = 1 \qquad (9)$$

деп ұйғарып, ***A*** коэффициентін есептеп табуға болады. Осы коэффициентті анықтауға арналған математикалық амал нормалау, ал $A$ нормалау коэффициенті деп аталады. (9) теңдігіне (6а) $\psi(x)$ функцияны қоямыз, сонда

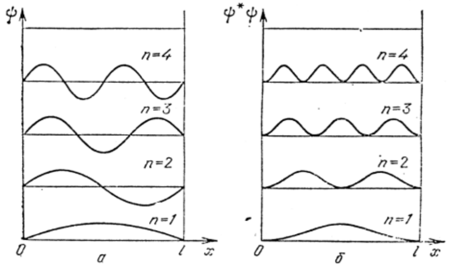
$$A^2\int_0^l sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right)dx = 1, \quad A^2\frac{l}{2} = 1, \quad \text{немесе} \quad A = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2}.$$

Сонымен, потенциалдық шұңқырдағы бөлшек (электрон) үшін Шредингер теңдеуінің толық шешімі мына түрде өрнектеледі:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2m\ell^2}, \quad \psi_n(x) = \left(\frac{2}{\ell}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{\ell}\right), \quad n = 1,2, \qquad (10)$$

$\ell$ кесіндісінің әр түрлі ***dx*** бөліктерінде бөлшектің болу ықтималдығы былай анықталады:

$$w(x)dx = |\psi_n|^2 dx = A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{\ell}\right)dx.$$




3-сурет

**3.6.** **3**-суретте нормаланған $\psi_1$, $\psi_2$, $\psi_3$ толқындық функциялар және $|\psi_1|^2$, $|\psi_2|^2$, $|\psi_3|^2$ ықтималдық тығыздықтары бейнеленген. Осы суреттен $\ell$ кесіндісінің әр жерінде бөлшектің табылу ықтималдығы бірдей емес екендігі көрінеді. $n$-нің өсуімен ықтималдықтың таралу қисығындағы максимум саны артады. $n$-нің үлкен мәнінде максимумның көбейетіндігі соншалықты, $\ell$ кесіндісінің барлық бөліктерінде бөлшектің болу ықтималдығы іс жүзінде бірдей болады. Бұл классикалық механикадағы жағдай сияқты.

## 4. Сызықтық гармоникалық осциллятор

**4.1.** Массасы $m$ бөлшек $\boldsymbol{x}$ осі бойында бөлшектің тепе-теңдік қалыптан ауытқуына тура пропорционал $F=-kx$ квазисерпімді күш әсерінен қозғалатын болсын. Мұндағы $k$ – серпімділік коэффициенті. Осындай бөлшек сызықтық **гармоникалық осциллятор** деп аталады.

Гармоникалық осциллятордың потенциалдық энергиясы былай анықталады:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}. \qquad (11)$$

**4.2.** Осциллятор үшін Шредингер теңдеуі былайша жазылады:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}\right)\psi = 0, \qquad (12)$$

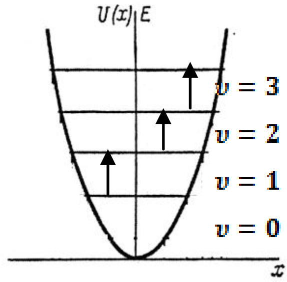
мұндағы $E$ – осцилятордың толық энергиясы.

**4.3.** $E$ параметрі мына мәндерді

$$E_\upsilon = (\upsilon + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad (\upsilon = 0,1,2,...) \qquad (13)$$

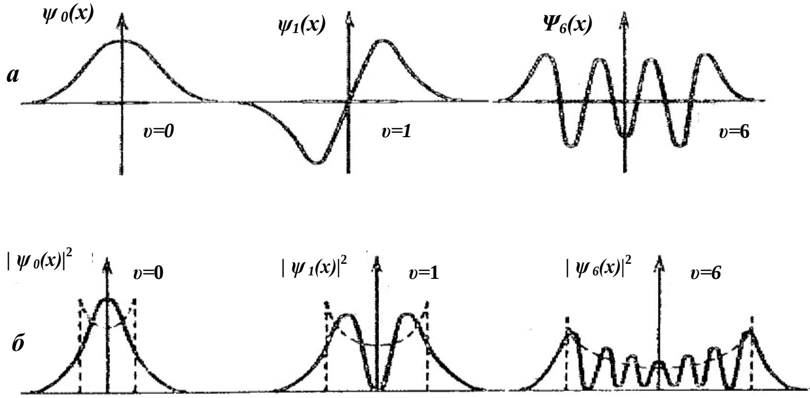
қабылдағанда (12) теңдеуінің шектеулі, бір мәнді және үздіксіз шешімдері болатындығы дифференциалдық теңдеулер теориясында дәлелденген.

Гармоникалық осциллятордың энергия деңгейлері бірінен-бірі бірдей қашықтықта орналасады (4-сурет).




4-сурет

**4.4.** 5-суретте гармоникалық осциллятордың толқындық функциялары (а), кванттық және классикалық осциллятор үшін ықтималдық тығыздықтарының үлестірілуі көрсетілген (б).




5-сурет

Гармоникалық осцилляторды кванттық механикалық қарастыру классикалықтан өзгеше нәтижелер береді. Классикалық механикаға сәйкес осциллятор кез келген энергияға ие бола алады, ал кванттық механика бойынша мүмкін энергия деңгейлері $E_\upsilon = (\upsilon + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$ өрнегімен анықталады, $\upsilon$=0, 1, 2... Классикалық механика тұрғысынан осциллятор тыныштық күйде бола алады және нөлдік энергияға ие бола алады. Кванттық механикаға сәйкес рұқсат етілген төменгі нөлдік деңгей деп аталатын энергия деңгейі $E_\upsilon = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ болады.

Осциллятордың энергия деңгейлерінің дискреттілігі де, нөлдік энергия деңгейінің болуы да молекулалардың инфрақызыл (тербеліс) спектрлерін бақылаумен расталады.

## *Сұрақтар*

1. *Шредингер теңдеуі қандай бөлшектер үшін дұрыс болады?*
2. *Шредингер теңдеуі неге толқындық теңдеу ретінде тұжырымдалған?*
3. *Шредингер теңдеуіне кіретін барлық мүшелерінің физикалық мағынасы қандай?*
4. *Бір өлшемді потенциалдық шұңқырдағы бөлшек үшін энергия деңгейлері ара қашықтығының бөлшек массасына және шұңқыр еніне тәуелділігі қандай?*
5. *Потенциалдық шұңқырдағы бөлшектің ең кіші энергиясы қандай?*
6. *Негізгі күйдің нормаланған толқындық функциясын табыңыз.*
7. *Гармоникалық осцилляторды квантмеханикалық және классикалық бейнелеудің айырмашылығы неде?*
8. *Осциллятордың ең төменгі күйі неліктен нөлдік энергияға ие бола алмайды?*