Толқындық функция. Шредингер теңдеуі

- *Бөлшектердің қозғалысын кванттық механикада бейнелеу ерекшеліктері*
- *Толқындық функцияның ықтималдық мағынасы*
- *Толқындық функцияның қасиеттері*
- *Кванттық күйлердің суперпозиция принципі*
- *Шредингер теңдеуі*

1. Де Бройль гипотезасы бойынша қозғалыстағы бөлшек толқындық қасиеттерге ие және осы қасиеттерді, егер бөлшектердің де Бройльдық $\lambda_б$ толқын ұзындығы бөлшек қозғалатын аймаққа тән L мөлшерімен шамалас немесе одан үлкен $\lambda_б \geq L$ болса, онда ескермеуге болмайды. Бағалау бойынша, $\lambda_б \geq L$ шарты мөлшерлері атомдардың мөлшерлерімен шамалас аймақтарда қозғалатын массалары кіші бөлшектер үшін орындалады. Осындай бөлшектер **микробөлшектер** деп аталады.

Толқындық қасиеттерге ие микробөлшектің классикалық механикадағыдай қозғалысын бейнелеу үшін бөлшек күйін оның әрбір уақыт мезетінде берілген кеңістік координаттары және жылдамдығымен (импульсымен) анықтауға болмайды. Классикалық механикада, егер қайсыбір уақыт мезетінде дененің (материалдық нүктенің) тұрған орны және жылдамдығы белгілі болса, онда дене қалай қозғалатынын қозғалыс теңдеуі көмегімен дәл анықтауға болады. Басқаша айтқанда берілген координаталар мен жылдамдық дененің күйін анықтайды. Осы жағдайда бөлшектің қозғалысы уақыт бойынша оның механикалық күйінің өзгерісімен байланысқан, ал күйлердің үздіксіз ауысуы бөлшектің белгілі траектория бойынша қозғалысына сай келеді.

Микробөлшекте толқындық қасиеттердің болуынан, микробөлшектің координаттары мен импульсын бірдей дәл анықтау мүмкін болмайды. Бұл Гейзенбергтің анықталмағандықтар қатынастарынан келіп шығады. Демек, микробөлшектің механикалық күйі классикалық жолмен берілуі мүмкін емес, ал микробөлшектің қозғалыс траекториясы жайындағы көріністі оның қозғалысын бейнелеу үшін негізінде қолдануға болмайды.

Кванттық механика толқындық қасиетке ие бөлшектердің қозғалысын бейнелейді, және ол классикалық механикаға қарағанда ең жалпы физикалық теория болып табылады. Бірақта,

$\lambda_б \geq L$ шарты орындалатын, бөлшектің толқындық қасиеттерін ескермеуге болатын жағдайда, кванттық механиканың қортындылары классикалық механиканың нәтижелерімен дәл келуі тиіс.

Кез-келген физикалық теория сияқты кванттық механика да кейбір постулаттарға негізделеді. Осы постулаттардың дұрыстығын кванттық механиканың болжауларын бөлшектердің толқындық қасиеттері ескерілетін эксперимент нәтижелерімен салыстырып растауға болады.

Кванттық механиканың бірінші постулаты: бөлшектің күйі кванттық механикада кеңістіктік координаттар және уақыттың функциясы болып табылатын ψ **толқындық функциямен** бейнеленеді.

Кванттық механиканың математикалық аппараты ψ функциямен қайсыбір амалдар (операциялар) істеп, микробөлшектердің қозғалысы жайында толық мәлімет алуға мүмкіндік береді.

2. Микробөлшектердің күйін кез-келген уақыт мезетінде оның координаттары мен жылдамдығы бойынша берудің мүмкін еместігі және қозғалысты траекториямен бейнелеудің жарамауы микробөлшектің қозғалысын ықтималдық тәсілмен бейнелеуге алып келді. Осы жағдайда кванттық механикада бөлшек күйін бейнелегенде берілген уақыт мезетінде кеңістіктің әр түрлі нүктелерінде бөлшектің табылу ықтималдығын анықтау әдісін көрсету керек.

Корпускулалық-толқындық дуализмге сәйкес кванттық теорияда бөлшек күйі $\psi(\vec{r},t)$ –пси функциямен беріледі. Бұл комплекс функция және формальды түрде (сыртқы түрі бойынша) толқындық қасиеттерге ие.

Пси-функцияның физикалық мағынасын ұғыну жеке бөлшектердің толқындық қасиеттері болатындығы анықталғаннан кейін ғана мүмкін болды. Осы деректі (жеке бөлшектің толқындық қасиетін) М.Борнның идеясы бойынша (1926) тек былайша түсіндіруге болады. Кез-келген микробөлшектің қозғалысы жеке алғанда ықтималдық заңдарына бағынады. Бірақ осы қозғалысты сипаттайтын ықтималдықтың үлестірілуі бөлшектердің жеткілікті көп санын тіркеу нәтижесінде білінеді. Сонда үлестірілу толқын интенсивтілігінің үлестірілуі қандай болса, дәл сондай болады

екен: толқын интенсивтілігі үлкен болатын жерде бөлшектердің көп саны тіркеледі.
Кванттық теорияда оқиғаларды дәл болжап айту емес осы оқиғалардың ықтималдықтарын анықтау мәселесі қарастырылады. Ықтималдықтардың мәндері бойынша белгілі ережелерді қолданып физикалық шамалардың кездейсоқ мәндерінің орташасын табуға болады. Бұл тәжірибеде өлшеуге жарамды шама, $\psi(\vec{r},t)$ пси-функция барлық ықтималдықтарды табуға мүмкіндік беретін шама болып табылады.

1926 ж. М.Борн кванттық механикадағы толқындық функцияның ықтималдық мағынасын былайша тұжырымдады: $\psi(x,y,z,t)$ толқындық функцияның модулінің квадраты берілген $t \geq 0$ уақыт мезетінде кеңістіктің координаты x,y,z M=M(x,y,z) нүктесінде бөлшектің табылу ықтималдығының w тығыздығын анықтайды.

Демек,

$$w = \frac{dp}{dv} = |\psi|^2, \tag{1}$$

Осы өрнекті мына түрде жазамыз:

$$\mathrm{dp} = |\psi|^2 dv = \psi^* \cdot \psi dv, \tag{2}$$

мұндағы ψ^*– толқындық ψ функциямен комплекс түйіндес функция, dp – бөлшектің берілген кванттық күйі үшін қайсыбір уақыт мезетінде бөлшектің М нүктесін қоршап тұрған dʋ элементар көлемінде табылу ықтималдығы.

(2) формуладан $\psi(x,y,z,t)$ толқындық функциямен бейнеленетін берілген кванттық күйдегі бөлшекті кеңістіктің көлемі v шектеулі аймағында табу ықтималдығын да есептеуге болатындығы көрінеді. Шынында да

$$\mathrm{P} = \int \mathrm{dp} = \int_v w dv$$

болатындықтан, (1) және (2)-ні ескеріп мына өрнекті аламыз:

$$\mathrm{P} = \int_v |\psi|^2 dv \text{ немесе } P = \int_v \psi^* \psi dv. \tag{3}$$

Кванттық механикада (1) - (3) өрнектері толқындық функцияның ықтималдық мағынасын анықтайды.

3. Егер (3)-те кеңістік аймағы ретінде барлық кеңістік алынса ($V \to \infty$) , онда бөлшектің бүкіл кеңістікте табылуы ақиқат оқиға болып табылады, оның ықтималдығы 1-ге тең. Демек, толқындық функцияның ықтималдық мағынасынан мына өрнек шығады:

$$\int_{v \to \infty} |\psi|^2 dv = 1, \quad \text{немесе } \int_v \psi^* \psi dv = 1. \tag{4}$$

(4) шартты толқындық функцияның **нормалау шарты** деп, ал осы шартты қанағаттандыратын толқындық функцияны *нормаланған* **толқындық функция** деп атайды.

Толқындық функцияның ықтималдық мағынасына байланысты кванттық механика есептерінде толқындық функциялар белгілі шектеулерді, немесе шарттарды қанағаттандырулары тиіс. Толқындық функция шектелген (өйткені ықтималдық 1-ден үлкен бола алмайды), бір мәнді (ықтималдық бір мәнді емес шама бола алмайды), және үздіксіз (ықтималдық секірмелі түрде өзгермейді) болуы тиіс.

1) Толқындық функцияның шектелгендік шарты. Толқындық функция (3) және (4)-дегі интегралдар шектеусіз интегралдарға айналатындай шексіз мәндерді қабылдай алмайды.

2) Толқындық функцияның бір мәнділік шарты. Толқындық функция координаттар мен уақыттың бір мәнді функциясы болуы тиіс, өйткені бөлшектің табылу ықтималдығының тығыздығы әрбір есепте бір мәнді анықталуы тиіс.

3) Толқындық функцияның үздіксіздік шарты. Кез-келген уақыт мезетінде толқындық функция кеңістіктік координаттардың үздіксіз функциясы болуы тиіс.

4. Сонымен, тікелей физикалық мағынаға ψ-функцияның өзі емес, оның модулінің квадраты $|\psi|^2$ немесе $\psi^* \psi$ ие. Осыған қарамастан кванттық теорияда экспериментте бақыланатын шама $|\psi|^2$ –пен емес,ψ-функциямен амалдар істеледі. Бұл микробөлшектердің толқындық қасиеттерін –интерференция және дифракцияны түсіндіру үшін қажет. Мұндағы жағдай толқындық теориядағы жағдайға ұқсас. Толқындық теорияда толқындық өрістер интенсивтіктерінің суперпозиция принципі емес, өрістердің өздерінің суперпозиция принципі қабылданады. Осылай теорияға интерференция және дифракция құбылыстары енгізіледі.

Осыған ұқсастырып кванттық теорияда постулаттардың бірі ретінде ψ-функциялардың суперпозиция принципі қабылданған.

Егер бөлшек ψ_1 толқындық функциямен бейнеленетін кванттық күйде, және де ψ_2 толқындық функциямен бейнеленетін басқа күйде бола алатын болса, онда осы бөлшек $\psi = C_1 \psi_1 + C_2 \psi_2$ (5) толқындық функциямен бейнеленетін күйде де бола алады, мұндағы C_1 және C_2 коэффициенттері жалпы жағдайда комплекс сандар.

Сірә, кванттық күйлердің кез-келген санының суперпозициясы (қосылуы), яғни бөлшектің

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 + \cdots + C_n\psi_n = \sum_{n=1}^{N} C_n\psi_n$$

толқындық функциямен бейнеленетін кванттық күйінің болатындығы жайында айтуға болады. Осы күйде C_n коэффициенті модулінің квадраты $|C_n|^2$ өлшеген кезде бөлшектің ψ_n толқындық функциямен бейнеленетін кванттық күйде табылу ықтималдығын анықтайды.

5. Бөлшектің күйін бейнелейтін $\psi(x,y,z,t)$ толқындық функция Шредингер теңдеуін

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi \qquad (6)$$

шешкенде алынады; мұндағы $\hat{H}$ – Гамильтон операторы, $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$ – жорамал бірлік, ал теңдеу **Шредингердің жалпы теңдеуі** деп аталады. Бұл релятивтік емес кванттық механиканың негізгі теңдеуі.

Сұрақтар

1. *Бөлшек күйін кванттық механикада бейнелеудің, оны классикалық механикада бейнелеуден қандай айырмашылығы бар?*
2. *Микробөлшектің қозғалысын бейнелеу үшін траектория ұғымын неліктен қолдануға болмайды?*
3. *Физикалық мағына ψ–функцияның өзімен емес, оның модулінің $|\psi|^2 = \psi^*\psi$ квадратымен неліктен байланыстырылады?*
4. *Толқындық функцияға қандай шектеу шарттары қойылады?*
5. *Толқындық функцияның берілуі жүйе күйін толық анықтайды деген ұйғарымнан нені түсінеміз?*
6. *Кванттық механикадағы суперпозиция принципін жазып және оны түсіндіріңіз.*