

# **КВАНТТЫҚ МЕХАНИКА**

**жаңа көзқарас**

**1**

**K. Konishi**

University of Pisa and INFN, Pisa

**G. Paffuti**

University of Pisa and INFN, Pisa

# **QUANTUM MECHANICS**

**A New Introduction**

Қазақстан Республикасы  
Білім және ғылым министрлігі

**Кеничи Кониши**  
**Джампьеро Паффути**

# **КВАНТТЫҚ МЕХАНИКА**

**жаңа көзқарас**

**1**

*Оқулық*

Алматы, 2013

ӘОЖ 530.1=3:111=512.122 (075.8)  
КБЖ 22.314 (5 Каз-Англ) я 73  
К55

*Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрлігінің «Оқулық»  
республикалық ғылыми-практикалық орталығы бекіткен*

Ағылшын тілінен қазақ тіліне аударған  
**Сахиев Саябек Қуанышбекұлы** –  
*физика-математика ғылымдарының докторы*

**Кониши К., Паффутти Дж.**

К55 **Кванттық механика: Жаңа көзқарас: Оқулық/ауд.** С. Қ. Сахиев. –  
Алматы, 2013.

ISBN 978-601-7427-22-1  
1-бөлім. – 2013. – 448 б.  
ISBN 978-601-7427-21-4

Оқулық V бөлімде негізделген 24 тараудан құралған. I бөлім – кванттық механиканың негізіне элементарлық кіріспе. II бөлім үш стандарттық жуықтау әдістеріне арналған: ұйтқу теориясы, вариациялық және жартылай классикалық әдістері. Әр тараудың соңында есептердің аналитикалық шешімдері, сондай-ақ сандық әдістерді қолдану арқылы жүргізілген есептеулер келтірілген.

Оқулық университеттердің физика факультетінде берілетін жалпы физика курстарын, кейбір теориялық физиканың курстарын (теориялық механика, электродинамика математикалық физика әдістері) тәмамдаған, сонымен қатар математиканың кейбір (математикалық талдау, аналитикалық геометрия, сызықтық алгебра, дифференциалдық және интегралдық теңдеулер, ықтималдылықтар теориясы, комплекстік айнымалылары функцияларының теориясы, группалар теориясы) салаларымен таныс студенттер, магистранттар, PhD докторанттары үшін арналған. Оған қоса көптеген талдаулар білімі терең белсенді зерттеушілер мен оқытушылар үшін пайдалы анықтамалық құралы болатыны анық.

ӘОЖ 530.1=3:111=512.122 (075.8)  
КБЖ 22.314 (5 Каз-Англ) я 73

© Kenichi Konishi and Giampiero Paffuti 2009

Quantum Mechanics: A New Introduction, First Edition was originally published in English in 2009. This translation is published by arrangement with Oxford University Press.

ISBN 978-601-7427-21-4  
ISBN 978-601-7427-22-1

© Қазақ тіліндегі басылым, ҚР жоғары оқу орындарының қауымдастығы, 2013

## Қазақ оқырмандарына

Биыл Н.Бордың атомдық моделін алғаш ұсынғанына 100 жыл толды. Атомның осы жартылай классикалық моделі ғылымының жаңа дәуіріне есік ашып бергені сөзсіз. Кезінде ғылымның сапасы мен оның бағасының қатынасы жөнінен жетекші мемлекеттердің бірі болған Кеңестер Одағының ғалымдары да осы салада көштің соңында қалған жоқ. Кванттық механиканы игеріп қана қоймай, оны дамытуға, зерек жастарды талпындыруға арналған оқулықтар мен оқу бағдарламаларын айтып жеткізу мүмкін емес. Ағылшын, неміс, француз және т.б. тілдерінен орысшаға аударылған оқулықтардың саны қаншама, ал олардың сапасы жөнінде тек жылы сезіммен еске аламыз. Дегенімен, оқулықтардың түпнұсқасымен танысқан оқырман, оқулық авторларының төлтума бақылаулардың қызықты интерпретациясын, кеңінен танымал нәтижелердің жаңа әдістемелерін түйеді. Сондықтан да болар, кванттық механика қосымшаларының ұсынылған шешімдері көңілге қонымды, талдауға әсерлі жолдарын ашып береді. Оқулықтың атауы затына сай деп ойлаймын.

Кітаптың шыққанына үш-төрт жыл ғана болды, ал ғылымның дамуы екпіндеп жылжып барады. Айқын айғағы, 2013 жылғы физика саласындағы Нобель сыйлығы П.Хиггс (Ұлыбритания) пен Ф.Энглерге (Бельгия) бұйыртқаны және оның себептері баршаға мәлім. Оқулықта Үлкен Адрондық Коллайдердегі эксперименттердің болашағы жөнінде авторлар үлкен үмітпен жазғанын оқыған сәтте, әрине, еріксіз езу тартарсыз. WMAP мәліметтеріне сәйкес Ғалам құрамының 95%-дан астамын қараңғы энергия мен қараңғы материя құрайды. Табиғаттың құпиясына жарық шашып, адамзат игілігіне жарататын ғалымдардың арасында тәуелсіз Қазақстанның жаңа буын ғалымдары болатынына зор үмітпен қараймын. Барлық жаңалықтар әлі алда!

Әр еңбектің өз ерекшелігі болатыны хақ. Осы орайда көмегін төккен әріптестерім мен техникалық қолдау көрсеткен шәкірттеріме шын ықыласыммен ризашылығымды жеткіземін.

*С.Қ.Сахиев  
Желтоқсан, 2013 жыл*

## Қазақ тіліндегі басылымға алғы сөз

Кванттық механика жөніндегі біздің оқулығымыздың қазақша баспадан шыққанына өте қуаныштымыз. Осы кішігірім кіріспе арқылы қазақ оқырмандарын шын көңілден қарсы аламыз.

Бүгінде технологиялық және ғылыми өрлеудің үдемелі дамуы күнделікті өмірімізді микроскопиялық әлемнің тылсым құбылыстарына жақындата түсті: олар заманауи барлық электрондық құрылғылардың және ақпараттық технологиялардың негізі болып табылады. Сонымен қатар, қазіргі заманғы технологиялар бізге электрондар мен фотондардың кванттық механикалық тәртібін бүгінде өз көзімізбен «көруге» мүмкіндік береді. Айқын мысалы ретінде, оқулықтың Кіріспесінде көрсетілген Тономураның жүргізген электрондардың дифракциялық интерференциясының тәжірибесін айтуға болады. Мұның бәрі кванттық механиканы біз үшін түсінуді бұрынғыдан да гөрі танысырақ етеді.

Ағылшын тіліндегі кіріспесінде аталып өткендей, бұл – заманауи оқулық. Сонымен қатар, салыстырмалы түрде кванттық механиканың жан-жақты қолданыстары көптеп көрсетілген. Алайда мұның тіпті кванттық механиканы жаңа бастағалы отырған студенттерге де жақсы кіріспе оқулығы болуы үшін біз барлық мүмкіншіліктерді пайдаландық. Оқулықтағы негізгі идеялар мен есептеулер ережелерін игеру бірден тым күрделі болмас деп үміттенеміз. Сондықтан тараудан тарауға өту барысында кванттық механиканың кең әрі сан алуан қосымшалары мен түйіндеулеріне жету мақсатында бірте-бірте олардың түсініктемесін де тереңдете бердік. Сондай-ақ, жеке компьютерлер және солармен байланысты қосымшалар (бағдарламалық қамтамасыздандыру) студенттерге есептерді шығаруды әлдеқайда жеңілдетеді. Демек, алдыңғы буын студенттерге карағанда қазіргі заманғы білім алушыларына көптеген кванттық механикалық мәселелердің табиғатын тереңірек деңгейде қабылдауына септігін тигізуде. Шындығында, Mathematica бағдарламасында жүргізілген көптеген сандық талдаулар, сонымен қатар аналитикалық есептердің қалың шешімдерінің саны оқулыққа тән ерекшеліктердің бірі болып табылады.

Осы кітапты жазудағы негізгі ықыласымыз неғұрлым көбірек жастарға табиғаттың кейбір таңғажайып ерекшеліктерін қаншалықты құнды және оларды түсіндірудегі Кванттық механика әдістерінің таңғаларлықтай әсемдігімен таныстыру болып табылады. Осы оқулықты ана тілінде оқып шыққан қазақстандық оқырмандардың легі бүкіл әлемдегі физик-ынтагерлер қоғамдастығының қатарына қосылса, біздің ең ізгі үмітіміздің ақталғаны болар еді.

*Кеничи Кониши және Джампьеро Паффутти  
Пица, 2013 жылдың 22 шілдесі*

## Кіріспе сөз

Студенттердің кванттық механикамен алғашқы кездесуі жеңіл болмауы мүмкін. Уақыт ( $t$ ) бойынша дифференциалдық теңдеуінің, яғни Ньютонның классикалық қозғалыс теңдеуінің орнына, ол: жаңа механиканың әдетте нақтыланған ықтималдылықтармен болжайтынын (!) көреді; электрондардың тәртібі толқындар тәрізді болатынын естиді. Ақылға қонбайтын түсініктер, алайда эмпирикалық факт.<sup>1</sup>

Студент өзінің зерттеулерінде қандай да ілгерлеу барысында мәселенің соншалықты жаман еместігін бірте-бірте түсіне бастайды. Жаңа механиканың негізгі теңдеуі – Шредингер теңдеуі – нақтылы анықталған, уақыт бойынша тамаша, байсалды сызықтық дифференциалдық теңдеуі екеніне микроскопиялық жүйеге сыртқы әсер болмаса, оның қатал детерминанттық модаға сәйкес дамитынына көзі жетеді. Тек қана бұл емес, шектік қозғалысты кванттаудың арқасында онымен тығыз байланысқан Табиғаттың іргелі тұрақтысы – Планк тұрақтысының  $h$  көмегімен классикалық физикаға қарағанда атомдардың қасиеттерін кванттық механика әлдеқайда дәл (кейде әлдеқайда жеңіл) түсіндіреді. Мысалы, типтері бірдей болатын атомдардың қасиеттері қалыпты жағдайда қатаң түрде бірдей болады. Бұл фактының макроскопиялық әлемдегі (қатты денелер, кристалдар, биологиялық құбылыстар және т.с.с.) регулярлық құрылымдар және регулярлық жұмыс құрылымдары үшін іргелі мағынасы бар. Әрине, жаңа механиканың классикалықтан артықшылығы тек атомдармен шекараланып қоймайды. Біздің күнделікті өмірімізде алуан түрлі құбылыстар: электроөткізгіштік, лазер, электроника, кванттық оптика және осылармен байланысты заманауи технологиялар, барлығы кванттық механиканы дұрыс түсінуді талап етеді.

Білімін тереңдету барысында студент қазіргі заманғы физиктердің стандарттық моделінің шеңберінде кейде мюонның (ауыр электрон түрінің бірі) аномальдық магниттік моментіне қатысты он бірінші санына дейін жуықтай алатынын білуі мүмкін. Әрине осы мысалда біз Табиғаттың нақты моделін экспериментпен салыстырдып отырмыз. Алайда, іргелі әсерлесулердің стандарттық моделі – күшті әсерлесу үшін КХД, электроөлсіз әсерлесу үшін Глэшоу-Вайнберг-Саламның теориясы, барлығы релятивистік кванттық механикаға негізделген. Атомдық физикада теория мен эксперименттің арасындағы үйлесімдік жақсы болуы мүмкін, ал кейде тіпті әсерлі де болуы. Осының барлығы ақырында оны физикадағы белгілі ең дәл және, мүмкін, ең әсем теориямен шұғылданатынына

---

<sup>1</sup> Оқулықтың (ағылшын тіліндегі түпнұсқасының) мұқабасындағы суретте кіп-кішкентай тесіктері бар жұқа коллоидтық қабықшаны 50 кВ электрондық шоғырлармен атқылағандағы электрондық толқынның шымырлануы көрсетілген. Бүкіл беттегі сурет шындығында 0,6 мкм қабықшаның ұлғайтылуына сәйкес келеді (Др. Акира Тономураның фотосы, Хитачи Жетекші Ғылыми-зерттеу зертханасы, Сайтама, Жапония).

көзін жеткізетіні сөзсіз.

Күндерің күнінде оның зерттеуші немес ұстаз болуы мүмкін, сөйтіп ол кванттық механика курсын шәкірттеріне оқуды бастауы да ықтимал. Көптеген жылдардан соң ол кванттық механиканың қарапайымдылығы мен әдемілігіне, сонымен қатар оның нәзік, әрі тереңге кететін салдарларына таңғалауын қоймайтыны шүбәсіз.

Осы оқулықтың негізгі мақсаттарының бірі болып физиканың сұлулығын бағалай бастаған жас студенттерге осы таңғалу сезімін жеткізу табылады.

Оқулық кванттық механикаға кіріспе ретінде жазылды: бірінші рет бастаған және біршама хабары бар студенттер үшін жеткілікті дәрежеде арналған. Классикалық физиканың стандарттық курстары, оның ішінде классикалық механика, электромагнетизм, статистикалық механика және термодинамика, сондай-ақ математиканың негіздері қажетті іргетасын қамтамасыз етуі қажет.

Сонымен қатар, шығарылған есептердің көптеген мысалдары, сол сияқты көптеген талқылаулар білімі тереңірек, активті зерттеушілер және оқытушылар үшін пайдалы анықтамалық құралы болады деген үміттеміз.

Оқулықтың кейбір инновациялық ерекшеліктеріне тоқталайық. Кванттық механиканы педагогикалық тұрғысынан көрсету үшін ептеген күш жұмсалды, сонымен қатар мүмкіндігінше логикалық айқындықты және оны дамытуға тырыстық. Тұжырымдамалар мен әдістер біртіндеп енгізілді, оқулықта олар тереңдей түскен сайын мұқият әзірленген және дәлідігі арта береді. Расында, элементарлық қосымшаларды түсіндірудегі ең негізгі анықтамалардан бастап, артынша симметрия, статистика және кванттық механиканың аспектілері тәрізді құрылымдық сұрақтарға өтуі жүргізілген, одан соң бірнеше стандарттық жуықтау әдістері зерделенген. Осылайша қаруланғаннан соң физикалық қызықты әртүрлі қолданулары талқыланады, сол кезде, әрине, барлық артиллерия пайдаланылады.

Оқулықтың мазмұнына тоқталатын болсақ, көпшілік бөлігі әдеттегідей, стандартты. Сонымен қатар кейбір талқылаулар оқулықтың негізгі мәтінінде келтірілген, мысалы, 12-тарауда уақытқа тәуелді гамильтониандары жалпы болатын жүйелер, 13-тарауда метаорнықты күйлер, ал 15-тарауда атомдар және бірнеше тақырыптар Қосымшаларда (20-тарау) қарастырылған. Бұларды стандарттық оқулықтарда табыла бермейді.

Әр тараудың соңында аналитикалық шешуді қажетсінетін бір қатар есептер келтірілген, сондай-ақ олардың бір бөлігі сандық әдістерімен есептелуге тиісті. Екі түрлі есептердің шешімдері қоса берілген компакт-дискіде орын алады: аналитикалық есептер – PDF файлдарында, ал сандық әдістермен есептелгендері - Mathematica бағдарламасында (барлығы 88 файл). Соңғыларына ұсынылған шешімдердің экспозициясына түсіндірмелері, сондай-ақ Mathematica бағдарламасында қолданылатын командалар жөніндегі элементарлық нұсқаулықтары кіреді. Сондықтан осының барлығы тіпті Mathematica бағдарламасымен алғаш танысқан оқырмандар үшін де қолдануды жеңілдетуі керек. Оқырманға бағдаламаны қосып, ондағы толқындық функциялардың

дамуынан, мысалы есепті өзгертудің немесе кеңейтудің арқасында есептердің дәлдігін арттырып көруге және т.с.с. тағлым алу ұсынылады. (Бастағалы отырғандар үшін нақтылы кеңестер: біріншіден, ең алдымен мұқият ReadmeFirst файлын оқып шығыңыз; екіншіден, жұмысты жалғастармастан бұрын әрбір NB файлдың көшірмесін жасаңыз және сол көшірме-файлмен жұмысты жалғастырыңыз, ал түпнұсқасына тиіспеген абзал).

Ал кейбір жағдайларда (мысалы, ұйтқу теориясындағы қатардың жинақтылығы және қайта қосындылау; метаорнықты жүйелерді зерттеу; жалпы элементтер үшін атомдарының спектрлерін нақтылы анықтау және т.с.с.) кванттық механиканың оқулықтарындағы деңгейде емес, тереңірек талдауды қажет етеді. Бірақ әрқашан нақтылы, физикалық мағынасына үңіліп отырып, ал математикасының егжей-тегжейіне мән берудің қажеттілігі жоқ.

Жалпы, оқулықты кванттық механика жөнінде заманауи, сонымен қатар салыстырмалы түрде автономды және кешенді етіп жазуға тырыстық.

Кітап келесідей топтастырылған. I бөлім - кванттық механиканың негізіне элементарлық кіріспе. II бөлімде берілген ұйтқу теориясының және вариациялық әдістердің кейбір бастапқы параграфтары мен I бөлімді біріктіріп, көптеген университеттерде кванттық механика пәнінің бірінші семестрындағы кіріспе курсының стандарттық материалы ретінде беруге болады. II бөлім үш стандарттық жуықтау әдістеріне арналған: ұйтқу теориясы, вариациялық әдіс және жартылай классикалық. Міне осылардың тұжырымдамасының көмегімен теория өзінің одан әрі дамуына ие болды және қолданылуы облысын әлдеқайда кеңейте алды. III бөлімінде әртүрлі: гамильтониандары стационарлық емес, метаорнықты жүйелердің жалпы талқылауларында, зарядталған бөлшектердің электромагниттік өрістеріндегі қозғалысы, атомдар, шашырау есептері және элементарлық бөлшектер тәрізді физикалық жағдайлардағы қолдануларын талдаудың формализмдері мен әдістері әзірленген.

IV тарау екі негізі тұжырымдамалық сипатты сұрақтырына арналған: кванттық шатасу мен өлшеу мәселелері.

V бөлім – Қосымшалар – табиғаттары әртүрлі пікірталастардың топтамасы: пайдалы формулалардың шолуы мен жеке тақырыптардың кестелерінен бастап, техникалық сұрақтар, сондай-ақ математикалық қосымшалары кіреді. Ол өзара тәуелсіз, яғни араларында байланыс жоқ, ал кейбіреулер тіпті негізгі мәтінге де тәуелді емес. Сондықтан олардың әрқайсысын әрбір оқырман ыңғайлы уақыт моментінде еркін оқи алады.

Жоғарыда атап өткеніміздей, қоса берілетін компакт-дискіде Mathematica бағдарламасының және PDF файлдары бар, онда әрбір тараудың соңында ұсынылған есептердің шешімдері талқыланған. Әрбір тарау үшін субфайлдар осы тараудың барлық қажетті файлдарынан құралған, олардың файлдары Guide-to-NB.nb атауларымен қоса көрсетілген. Сол файлда сәйкес келетін тараудың барлық қажетті Mathematica бағдарламасының ескертулерінің тізімі және

олардың қысқаша сипаттамасы берілген. Барлық талдаулар **Mathematica 6**, Wolfram Research бағдарламасында беріліп, жаңадан шыққан **Mathematica 7** бағдарламасында тестіленген.

Оларды жаңарту және түзетулер енгізу қажеттілігі туындаса, біздің веб-парақшаларымыздан

<http://www.df.unipi.it/~konishi>

<http://www.df.unipi.it/~paffuti>

кеңес алуларыңызға болады.

Біз Оксфорд Университи Пресс (OUP) ұйымында қызмет атқаратын Марк Сеймурға (Mark Seymour) біздің ағылшын тіліндегі мәтінімізді түзетулері үшін және оқулықтың сыртқы түрін жақсартудағы бағасыз көмегіне ризамыз. Әрине, оқулық мәтінінде немесе формулаларда қателіктердің болуы, сонымен қатар сөйлемді жаңылыс түсінуге әкелетін оқулықтағы құрылымдарға немесе оларды түзету кезінде жасалған қателіктердің табылуы мүмкін. Оларға, сөзсіз, тек қана біз жауаптымыз.

Сол сияқты біз Шарлотт Гринге (Charlotte Green, OUP) редакциялық көмегіндегі айқын тәсілдемесіне, сонымен қатар Сонку Адлунгке (Sonke Adlung) – физика жөніндегі аға редакторға, оқулықты дайындау барысында ұзақ уақыт аралығындағы керемет шыдамдылығына ризашылығымызды жеткіземіз.

Біздің достарымыз бен әріптестерімізге: кішігірім және айтарлықтай жолдармен әртүрлі моменттерде көрсеткен көмектері үшін шын жүректен алғысымызды білдіреміз. Қысқаша тізімі: A. Bonaccorso, D. M. Brink, P. Calabrese, P. Cecchi, R. Collina, E. D’Emilio, A. Di Giacomo, G. Dunne, T. Elze, M. Fukugita, C. Giannessi, V. Gracco, R. Guida, R. Jackiw, F. Maccarrone, G. March- esini, M. Matone, P. Menotti, M. Mintchev, F. M. Miranda, G. Morchio, E. Onofri, L. Picasso, M. Rocca, S. Shore, A. Toncelli, M. Tonelli, A. Tonomura, P. Truini, A. Vainshtein және G. Veneziano.

Баршаңызға (әсіресе жастарға) соңғы жолдауымыз:

Оқыңыздар және ләззат алыңыздар!

*Пица, 2009 жылдың ақпаны  
К. Кониши және Дж. Паффутти*

# Мазмұны

## БІРІНШІ КІТАП

### I Кванттық механиканың негіздері

<b>1 Кіріспе</b>	<b>2</b>
1.1 Электронның кванттық тәртібі	2
1.1.1 Кванттық әлемге шолу – дифракция және интерференция	2
1.1.2 Атомдардың орнықтылығы жән тектестігі	5
1.1.3 Туннельдік эффектілер	7
1.2 Кванттық механиканың басталуы	8
1.2.1 Меншіктік жылусыйымдылық теориясынан Планк формуласына	8
1.2.2 Фотоэлектрлік эффект	15
1.2.3 Бор атомының моделі	17
1.2.4 Бор-Зоммерфельдтің кванттау шарты; де Бройль толқыны	19
Тереңдетіп оқу үшін	20
Қосымшаларға нұсқаулық	21
Есептер	21
Сандық талдау	22
<b>2 Кванттық механиканың заңдары</b>	<b>24</b>
2.1 Кванттық күйлер	24
2.1.1 Құрамдас жүйелер	28
2.1.2 Фотонның поляризациясы және кванттық механиканың Статистикалық табиғаты	29
2.2 Анықталмағандық принципі	31
2.3 Іргелі постулат	36
2.3.1 Проекциялық операторы және күй векторының редукциясы	39
2.3.2 Эрмиттік операторлар	39
2.3.3 Операторлардың көбейтінділері, коммутаторлар және бірге бақыланатындар	41
2.3.4 Координата және импульс операторлары, іргелі коммутатор және Гейзенберг қатынасы	44
2.3.5 Гейзенбергің қатынастары	45
2.4 Шредингер теңдеуі	46
2.4.1 Шредингер теңдеуі жөнінде толығырақ	48
2.4.2 Гейзенберг көрінісі	49
2.5 Үздіксіз спектр	50
2.5.1 Дельта-функция	52
2.5.2 Ортогональдылық	54
2.5.3 Координата және импульс операторларының өзіндік күйлері; импульс проекциясының операторы ығысу операторы ретінде	54
2.6 Толықтылық	56
Тараудың қорытындысы	58
Есептер	58
Сандық талдау	61
<b>3 Шредингер теңдеуі</b>	<b>62</b>
3.1 Жалпы қасиеттері	62

3.1.1	Шекаралық шарттар	62
3.1.2	Эренфест теоремасы	64
3.1.3	Ток тығыздығының ықтималдылығы және ықтималдылықтың сақталуы	66
3.1.4	Вириал және Фейнман-Гелл-Манн теоремалары	67
3.2	Бірөлшемді жүйелер	68
3.2.1	Еркін бөлшек	70
3.2.2	Топологиялық тривиалдық емес кеңістік	71
3.2.3	Бірөлшемді Шредингер теңдеулерінің арнайы қасиеттері	73
3.3	Потенциалдық шұңқырлар	77
3.3.1	Шексіз терең шұңқыр (қабырға)	77
3.3.2	Шекті тікбұрышты шұңқыр	78
3.3.3	Қосымшалар	83
3.4	Гармоникалық осциллятор	85
3.4.1	Толқындық функция және Эрмит полиномдары	85
3.4.2	Жарату және жою операторлары	91
3.5	Шашырау есептері және туннельдік эффект	96
3.5.1	Потенциалдық тосқауыл және туннельдік эффект	97
3.5.2	Дельта-функция потенциалы	102
3.5.3	Шашырау есептерінің жалпы аспектілері	106
3.6	Периодтық потенциалдар	109
3.6.1	Энергия спектрінің зоналық құрылымы	110
3.6.2	Талдау	112
	Қосымшаларға нұсқаулық	117
	Есептер	117
	Сандық талдау	122
<b>4</b>	<b>Бұрыштық момент</b>	<b>124</b>
4.1	Коммутациялық қатынастар	124
4.2	Кеңістік бұрылыстар	127
4.3	Кванттау	129
4.4	Штерн-Герлах тәжірибесі	133
4.5	Сфералық функциялар (гармоникалар)	134
4.6	Ж операторының матрицалық элементтері	137
4.6.1	Спин $1/2$ және Паули матрицалары	139
4.7	Қосу ережесі	141
4.7.1	Клебш-Гордан коэффициенттері	145
4.8	Спин	146
4.8.1	Спині $1/2$ үшінбұрылыс матрицалары	148
	Қосымшаларға нұсқаулық	150
	Есептер	151
<b>5</b>	<b>Симметрия мен статистика</b>	<b>154</b>
5.1	Табиғаттағы симметриялар	154
5.2	Кванттық механикадағы симметриялар	158
5.2.1	Негізгі күйжәне симметрия	161
5.2.2	Жұптылық ( $P$ )	163
5.2.3	Уақыттың кері бұрылуы	168
5.2.4	Галилей түрлендіруі	170
5.2.5	Вигнер-Эккарт теоремасы	173
5.3	Тектес бөлшектер: Бозе-Эйнштейн және Ферми-Дирак статистикалары	176
5.3.1	Тектес бозондар	181

5.3.2	Тектес фермиондар және Паули принципі	183
	Қосымшаларға нұсқаулық	185
	Есептер	185
<b>6</b>	<b>Үшөлшемді есептер</b>	<b>188</b>
6.1	Қарапайым үшөлшемді жүйелер	188
6.1.1	Келтірілген масса	188
6.1.2	Сфералық симметриялық потенциалдағы қозғалыс	189
6.1.3	Сфералықтолқындар	190
6.2	Потенциалдық шұңқырлардағы байланысқан күйлер	195
6.3	Үшөлшемді осциллятор	197
6.4	Сутегі атомы	199
	Қосымшаларға нұсқаулық	206
	Есептер	207
	Сандық талдау	208
<b>7</b>	<b>Кванттық механиканың кейбір ерекшеліктері</b>	<b>210</b>
7.1	Көріністер	210
7.1.1	Координаттық және импульстік көріністер	212
7.2	Күйлер мен операторлар	215
7.2.1	Бра және кет; абстрактылық гильберттік кеңістік	215
7.3	Шектелмеген операторлар	220
7.3.1	Өзіне түйіндес операторлар	222
7.4	Унитарлық түрлендірулер	232
7.5	Гейзенберг көрінісі	235
7.5.1	Гейзенберг бейнелеуіндегі гармоникалық осциллятор	238
7.6	Анықталмағандық принципі	240
7.7	Аралас күйлер мен тығыздық матрицасы	241
7.7.1	Фотон поляризациясы	245
7.8	Жалпыланған координаталардағы кванттау	247
	Тереңдетіп оқу үшін	252
	Қосымшаларға нұсқаулық	252
	Есептер	253
<b>8</b>	<b>Траекториялар бойынша интегралдар</b>	<b>254</b>
8.1	Грин функциясы	254
8.2	Траекториялар бойынша интегралдар	258
8.2.1	Туындылау	260
8.2.2	Тербелмелі моданы жіктеу	265
8.2.3	Фейнман диаграммалары	268
8.2.4	Кері қарапайым уақытқа (Миньковский уақытына) оралу	275
8.2.5	Туннельдік эффект және инстантондар	277
	Тараудың қорытындысы	282
	Тереңдетіп оқу үшін	282
	Сандық талдау	283
<b>II</b>	<b>Жуықтау әдістері</b>	<b>292</b>
<b>9</b>	<b>Ұйтқу (пертурбация) теориясы</b>	<b>286</b>
9.1	Уақытқа тәуелді ұйтқулар	287
9.1.1	Сетінеген деңгейлер	294
9.1.2	Сутегі атомының $n=2$ деңгейі үшін Штарк эффектісі	297
9.1.3	Дипольдік әсерлесулер мен поляризациялану	300
9.2	Кванттық өтулер	303
9.2.1	Ақтық интервалға созылатын ұйтқу	305

9.2.2	Периодтық ұйтқу	308
9.2.3	Дискреттік спектрдегі өтулер	308
9.2.4	Екі деңгей арасындағы резонанстық осциллятор	317
9.3	Континуумға өтулер	312
9.3.1	Күйдің тығыздығы	315
9.4	Ыдыраулар (бөлінулер)	316
9.5	Электромагниттік өтулер	322
9.5.1	Дипольдік жуықтау	324
9.5.2	Сәулеленудің жұтылуы	328
9.5.3	Индукцияланған (немесе мәжбүрлі) сәулеленулер	330
9.5.4	Спонтандық сәулелену	331
9.6	Эйнштейн коэффициенттері	333
	Қосымшаларға нұсқаулық	335
	Есептер	335
	Сандық талдау	339
<b>10</b>	<b>Вариациялық әдістер</b>	<b>341</b>
10.1	Вариациялық принцип	341
10.1.1	Төменгі шектер	343
10.1.2	Қиылған гильберттік кеңістік	345
10.2	Қарапайым қосымшалар	347
10.2.1	Гармоникалық осциллятор	347
10.2.2	Гелий: элементарлық вариациялық есептеулер	348
10.2.3	Вириал теоремасы	352
10.3	Гелийдің негізгі күйі	353
	Қосымшаларға нұсқаулық	360
	Есептер	361
	Сандық талдау	362
<b>11</b>	<b>Жартылай классикалық жуықтау</b>	<b>364</b>
11.1	ВКБ жуықтауы	365
11.1.1	Байланыс формулалары	369
11.2	Бор-Зоммерфельдтің кванттау ережелері	373
11.2.1	Кванттық күйлерді есептеу	375
11.2.2	Тек $x > 0$ үшін анықталған потенциал	378
11.2.3	$\hbar \rightarrow 0$ шегінің мағынасы	379
11.2.4	Бұрыштық айнымалылар	380
11.2.5	Радиалдық теңдеулер	384
11.2.6	Мысалдар	387
11.3	Туннельдік эффект	390
11.3.1	Қос шұңқыр	405
11.3.2	Ыдырау үдерістерінің жартылай классикалық теориясы	399
11.3.3	Гамов-Зигерт теориясы	403
11.4	Фазалық ығысу	408
	Тереңдетіп оқу үшін	415
	Қосымшаларға нұсқаулық	415
	Есептер	416
	Сандық талдау	418
	<b>Пәндік көрсеткіштер</b>	<b>420</b>
	<b>Сілтемелер</b>	<b>423</b>

## ЕКІНШІ КІТАП

### III Қосымшалар

#### 12 Уақыт бойынша эволюция

- 12.1 Уақыт бойынша эволюцияның жалпы сипаттамалары
- 12.2 Стационарлық емес унитарлық түрлендірулер
- 12.3 Адиабаталық үрдістер
  - 12.3.1 Ландау – Зинер өтулері
  - 12.3.2 Импульстік жуықтау
  - 12.3.3 Берри фазасы
  - 12.3.4 Мысалдар
- 12.4 Кейбір тривиалдық емес жүйелер
  - 12.4.1 Қабырға ішіндегі қозғалыстағы бөлшек
  - 12.4.2 Резонанстық тербелістер
  - 12.4.3 Соленоидпен қоршалған бөлшектер
  - 12.4.4 Ақаулы сақина
- 12.5 Циклдік гармоникалық осциллятор теоремасы
  - 12.5.1 Жиіліктің кері сызықтық өзгерісі
  - 12.5.2 Тербелетін қуыстың ішіндегі Планктың таралуы
  - 12.5.3 Жиілікке тәуелді жалпы қуат
  - 12.5.4 Экспоненталық тәуелділік
  - 12.5.5 Жаратылу және жою операторлары; байланысқан осцилляторлар

Қосымшаларға нұсқаулықтар

Есептер

Сандық талдау

#### 13 Метаорнықты күйлер

- 13.1 Грин функциясы
  - 13.1.1 Резольвентаның (қалықтардың) аналитикалық қасиеттері
  - 13.1.2 Еркін бөлшектер
  - 13.1.3 Жалпы өлшемдіктердегі еркін Грин функциясы
  - 13.1.4  $H_I$  дәрежесі бойынша жіктеу
- 13.2 Метаорнықты күйлер
  - 13.2.1 Есептің қойылымы
  - 13.2.2 Метаорнықты күйдің ені; жартылай ыдыраудың орташа уақыты
  - 13.2.3 Формальдық шешім
- 13.3 Мысалдар
  - 13.3.1 Дискреттік-үздіксіздікбайланысы
- 13.4 Комплекстікмасштабықтүрлендіру
  - 13.4.1 Аналитикалық жалғасы
- 13.5 Қосымшалар мен мысалдар
  - 13.5.1 Гелийдегі резонанстар
  - 13.5.2  $V_0 r^2 e^{-r}$  потенциалы
  - 13.5.3 Шектелмеген потенциал; Ло Сурдо-Штарк эффектісі

Тереңдетіп оқу үшін

Есептер  
Сандық талдау

#### 14 Электромагниттік әсерлесулер

- 14.1 Электромагниттік өрістегі зарядталған бөлшектің қозғалысы
  - 14.1.1 Классикалық бөлшектер
  - 14.1.2 Электромагниттік өрістеріндегі кванттық бөлшектер
  - 14.1.3 Дипольдық және квадрупольдық әсерлесулер
  - 14.1.4 Магниттік әсерлесулер
  - 14.1.5 Релятивистік түзетулер:  $LS$  байланысы
  - 14.1.6 Өте нәзік әсерлесулер

- 14.2 Ааронов-Бом эффектісі
  - 14.2.1 Асқын өткізгіштер

- 14.3 Ландау деңгейлері
  - 14.3.1 Холлдың кванттық эффектісі

- 14.4 Магниттік монополярлар

Қосымшаларға нұсқаулық

Есептер

Сандық талдау

#### 15 Атомдар

- 15.1 Электрондық конфигурациялар
  - 15.1.1 Иондалу потенциалы
  - 15.1.2 Сілтілік металдар спектрі
  - 15.1.3 Х-сәулелері (рентген сәулелері )

- 15.2 Хартри жуықтауы
  - 15.2.1 Өзі мен келісілген өрістер және вариациялық принцип
  - 15.2.2 Кейбір нәтижелер

- 15.3 Мультиплеттер
  - 15.3.1 Мультиплеттердің құрылымы

- 15.4 Слэтер анықтауыштары

- 15.5 Хартри-Фок жуықтауы

- 15.5.1 Мысалдар

- 15.6 Спин-орбиталдық әсерлесулер

- 15.6.1 Сутегі атомы

- 15.7 Сыртқы электр өрісіндегі атомдар

- 15.7.1 Дипольдік әсерлесу мен поляризациялану

- 15.7.2 Квадрупольдік әсерлесу

- 15.8 Зееман эффектісі

- 15.8.1 Кванттық механикадағы Зееман эффектісі

Тереңдетіп оқу үшін

Қосымшаларға нұсқаулық

Есептер

Сандық талдау

#### 16 Серпімді шашырау теориясы

- 16.1 Көлденең қима

- 16.2 Парциалдық толқындар жуықтауы

- 16.2.1 Жартылай классикалық шек
- 16.3 Липпман-Швингер теңдеуі
- 16.4 Борндық жуықтау
- 16.5 Эйконалдық жуықтау
- 16.6 Төменгі энергиялық шашырау
- 16.7 Кулондықшашырау: Резерфорд формуласы
  - 16.7.1 Тектес бөлшектердің шашырауы

Тереңдетіп оқу үшін

Қосымшаларға нұсқаулар

Есептер

Сандық талдау

## 17 Атом ядросы және элементарбөлшектер

- 17.1 Атом ядросы
  - 17.1.1 Жалпы ерекшеліктері
  - 17.1.2 Изоспин
  - 17.1.3 Ядролық күштер, пион алмасуы және Юкава потенциалы
  - 17.1.4 Радиоактивтілік
  - 17.1.5 Дейтрон және екі нуклондық күштер
- 17.2 Элементар бөлшектер: өрістің релятивистік кванттық теориясының қажеттілігі
  - 17.2.1 Клейн-Гордон және Дирак теңдеулері
  - 17.2.2 Клейн-Гордонның еркін өрісінің квантталуы
  - 17.2.3 Дирактың еркін өрісінің квантталуы және спин мен статистика байланысы
  - 17.2.4 Себеptілік және локальдылық
  - 17.2.5 Өзімен әсерлесетін скалярлық өрісі
  - 17.2.6 Абельдік емес өлшемдік түрлендіруі: Стандарттық Модель

Тереңдетіп оқу үшін

## IV Шатасу мен өлшеу

### 18 Кванттық шатасу

- 18.1 ЭПР қиялдағы эксперимент және кванттық шатасу
- 18.2 Аспе тәжірибесі
- 18.3 Екіден артық бөлшектердің шатасуы
- 18.4 Көбейткіштерге жіктеу және шатасу
- 18.5 Шатасудың өлшемі: энтропия

Тереңдетіп оқу үшін

### 19 Ықтималдылық және өлшеу

- 19.1 Кванттық механиканың ықтималдылық табиғаты
- 19.2 Өлшеу және күйді дайындау: ПМӨ және ООМӨ
- 19.3 Өлшеу «мәселелері»
  - 19.3.1 ЭПР «парадоксы»
  - 19.3.2 Өлшеу – физикалық үдеріс: декогеренция және классикалық шек
  - 19.3.3 Шредингер мысығы

- 19.3.4 Іргелі постулат және Шредингер теңдеуі
- 19.3.5 Кванттық механика өте дәл ме?
- 19.3.6 Космология және кванттық механика
- 19.4 Жасырын параметрлер теориясы
  - 19.4.1 Белл теңсіздіктері
  - 19.4.2 Кохен-Шпекер теоремасы
  - 19.4.3 «Кванттық локальдық емес» және «локальдық себептік теориялары» немесе «локальдық реализм»

Тереңдетіп оқу үшін

Қосымшаларға нұсқаулық

## V Қосымшалар

### 20 I бөлімнің қосымшалары

- 20.1 Классикалық механика
  - 20.1.1 Лангранжформализмі
  - 20.1.2 Гамильтон (канондық) формализмі
  - 20.1.3 Пуассон жақшалары
  - 20.1.4 Канондық түрлендірулер
  - 20.1.5 Гамильтон-Якоби теңдеуі
  - 20.1.6 Адиабаталық инварианттары
  - 20.1.7 Вириал теоремасы
- 20.2 Вакуумдегі электромагниттік сәулеленудің гамильтонианы
- 20.3 Бірөлшемді дельта-функция потенциалындағы жүйенің ортогоналдылығы мен толықтығы
  - 20.3.1 Ортогональдылық
  - 20.3.2 Толықтық
- 20.4  $S$ -матрицасы; толқындық пакеттің шашырауды сипаттауы
  - 20.4.1 Толқындық пакетті қолданып сипаттау
- 20.5 Лежандр полиномдары
- 20.6 Группалар және көріністер
  - 20.6.1 Группаның аксиомалары; кейбір мысалдары
  - 20.6.2 Группаның көріністері
  - 20.6.3 Ли группалары және Ли алгебралары
  - 20.6.4  $U(N)$  группасы және кварктар
- 20.7 Бұрыштық моменттің формулалары
- 20.8 Юнг сызбалары
- 20.9  $N$ -бөлшектік матрицалық элементтер
- 20.10 Фок көрінісі
  - 20.10.1 Бозондар
  - 20.10.2 Фермиондар
- 20.11 Екінші рет кванттау
- 20.12 Кванттық механикадағы суперсимметрия
- 20.13 Екі- және үш-өлшемді дельта-функциялық потенциалдары
  - 20.13.1 Байланысқан күйлер
  - 20.13.2 Өзіне түйіндес кеңеуі
  - 20.13.3 Екі өлшемдік дельта-функциялық потенциал:

## кванттық аномалия

- 20.14 Супер таңдау ережелері
- 20.15 Кванттық көріністер
  - 20.15.1 Вейльдің коммутациялық қатынастары
  - 20.15.2 фон Нейман теоремасы
  - 20.15.3 Бұрыштық айнымалылар
  - 20.15.4 Канондық түрлендірулер
  - 20.15.5 Өзіне түйіндес кеңеюі
- 20.16 Гаустық интегралдар мен Фейнман диаграммалары

**21 II бөлімнің қосымшалары**

- 21.1 Ұйтқу теориясының қосымшалары
  - 21.1.1 Шекаралық шарттардың өзгерісі
  - 21.1.2 Екі деңгейлі жүйелер
  - 21.1.3 Ван-дер-Ваальс әсерлесуі
  - 21.1.4 Дальгарно-Льюис әдісі
- 21.2 Сутегі атомының нәзік құрылымы
  - 21.2.1 Лэмб ығысуының жартылай классикалық моделі
- 21.3 Сутегінің өте нәзік әсерлесуі
- 21.4 Ұйтқу қатарларының жинақсыздығы
  - 21.4.1 Ұйтқу қатарларының жоғары реттері: ангармоникалық осциллятор
  - 21.4.2 Шашыраңқылық негізі
  - 21.4.3 Аналитикалық облысы
  - 21.4.4 Асимптотикалық қатарлар
  - 21.4.5 Дисперсия заңы
  - 21.4.6 Ұйтқу-вариациялық жуықтауы
- 21.5 Жалпы жүйелер үшін жартылай классикалық жуықтауы
  - 21.5.1 Кіріспе
  - 21.5.2 Келлер кванттауы
  - 21.5.3 Интегралданатын жүйелер
  - 21.5.4 Мысалдар
  - 21.5.5 Каустикалар
  - 21.5.6 КАМ теоремасы және кванттау

**22 III бөлімінің қосымшалары**

- 22.1  $K^0 - \overline{K^0}$  жүйесі және  $CP$ -бұзылуы
- 22.2 Деңгей тығыздығы
  - 22.2.1 Еркін бөлшек
  - 22.2.2  $g(E)$  және статистикалық қосынды
  - 22.2.3  $g(E)$  және қысқа қашықтағы тәртібі
  - 22.2.4 Деңгей тығыздығы және шашырау
  - 22.2.5 Тұрақтандыру әдісі
- 22.3 Томас прецессиясы
- 22.4 Сытқы өрістегі релятивистік түзетулер
- 22.5 Зарядталған бөлшектер әсерлесуінің гамильтонианы
  - 22.5.1 Әсерлесу потенциалдары

- 22.5.2 Спинге тәуелді әсерлесулер
  - 22.5.3 Кванттық гамильтониан
  - 22.5.4 Электрон-электрондық әсерлесуі
  - 22.5.5 Электрон-ядролық әсерлесуі
  - 22.5.6  $1/M$  түзетулері
  - 22.6 Электромагниттік өрісті кванттау
    - 22.6.1 Матрицалық элементтер
  - 22.7 Атомдар
    - 22.7.1 Томас-Ферми жуықтауы
    - 22.7.2 Хартри жуықтауы
    - 22.7.3 Сләтер анықтауыштары мен матрицалық элементтер
    - 22.7.4 Тұйықталған қабықшалардың гамильтонианы
    - 22.7.5 Орташа энергия
    - 22.7.6 Толмаған қабықшалардың гамильтониандары
    - 22.7.7  $N$  өзіндік мәндері
    - 22.7.8 Мультиплеттердің элементарлық теориясы
    - 22.7.9 Хартри-Фок теңдеулері
    - 22.7.10 Лагранж көбейткіштерінің рөлі
    - 22.7.11 Купманс теоремасы
  - 22.8  $H_2^+$
  - 22.9 Гросс-Питаевский теңдеуі
  - 22.10 Жартылай классикалық шашыраудың амплитудасы
  - 22.11 Каустика және кемпірқосақтар
- 23 IV бөлімнің қосымшалары**
- 23.1 Кванттық механикадағы сипатталатындар мен сипатталмайтындар
    - 23.1.1 Жасырын параметрлер үшін Белл моделі
    - 23.1.2 Бомның сынақ толқыны
    - 23.1.3 Көпәлемдік интерпретациясы
    - 23.1.4 Спонтандық толқындық функцияның коллапсы
- 24 Математикалық қосымшалар мен кестелер**
- 24.1 Математикалық қосымшалар
    - 24.1.1 Лаплас әдісі
    - 24.1.2 Тоқымдық әдіс
    - 24.1.3 Эйрифункциялары

**Пәндік көрсеткіштер**

**Сілтемелер**

## 1-БӨЛІМ

# КВАНТТЫҚ МЕХАНИКА НЕГІЗДЕРІ

Оқулықтың 1-бөлімінде кванттық механиканың негізгі түсініктері: кванттық механиканың негізгі ережелері мен негізгі постулаттары, бірөлшемді жүйелердегі қарапайым қосымшалар мен бұрыштық момент, қарапайым үшөлшемді жүйелер мен кванттық механикалық заңдардың кейбір ерекшеліктері көрсетілген. Кванттық механикадағы Фейнманның траекториялар бойынша интегралдаудың тұжырымдамасы енгізілген.

# Кіріспе

# 1

## 1.1 Электронның кванттық тәртібі

### 1.2 Кванттық механиканың басталуы

Тереңдетіп оқу үшін

Қосымшаларға нұсқаулық

Есептер

Сандық талдау

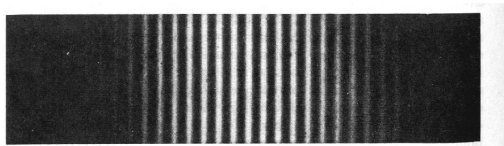
Микроскопиялық әлемдегі физикалық құбылыстар қарапайым емес, кейде күнделікті байқап жүргенімізбен салыстырғанда жиі парадокстық болып көрінеді. Алайда, сол физикалық құбылыстарды мұқият зерттегенде, түсіндіруде олар әрі жеңіл әрі қонымды. Кванттық механика курсының кіріспесі ретінде электронды мысалға ала отырып, осындай бірнеше ерекшеліктерді талдап көрейік. Сондай-ақ кванттық механиканың ашылуына әкелген дамудың тарихи кезеңдеріне қысқаша тоқталайық.

## 1.1 Электронның кванттық тәртібі

Таңдап алынған мысалдар: атомдардың дифракциясы және интерференциясы, орнықтылығы және тектестігі (түрлерінің бірдейлігі), оған қоса туннельдену феномені.

### 1.1.1 Кванттық әлемге шолу – дифракция және интерференция

Электрондардың «классикалық емес» тәртібінің ең қызықтысы – олардың дифракциясы және интерференциясы, яғни тәртібінің толқын тәрізді болуы. Жарықтың электромагнит өрістерінің таралушы толқыны екенін бәрі біледі. Ал толқынның қасиеті ретінде оның дифракциясы мен интерференциясын бақылаймыз. Мысал ретінде Юнгтың (1801 жылғы) атақты қос тесіктік экспериментін қарастырайық. Жарықтың қос тесіктен өтуі кезінде әдеттегі интерференциялық сақиналары байқалады (*1.1-суретті қараңыз*).



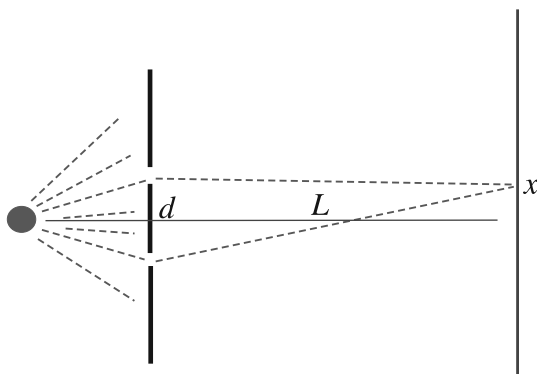
1.1-сурет. Юнг экспериментіндегі интерференциялық бейне.

Белгілеулер енгізейік:  $d$  – екі тесіктің арақашықтығы,  $L$  – экран мен тесіктердің арақашықтығы, ал  $x$  – жолақтың ені (1.2-суретті қараңыз). Осы жағдай үшін дифракция бұрышы шамамен  $\theta \sim \frac{x}{L}$  болады (мұнда,  $d \ll L$ ,  $x \ll L$  шарттары орынды деп жорамалдайық). Онда екі сәуленің жол айырымы:

$$\Delta d \simeq d \sin \theta \simeq d\theta \simeq \frac{dx}{L}.$$

Осылайша толқын ұзындығы  $\lambda$  болатын жарық үшін интерференцияның конструктивті немесе деструктивті болуының шарттары төмендегідей жазылады:

$$\frac{\Delta d}{\lambda} = n \text{ немесе } n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



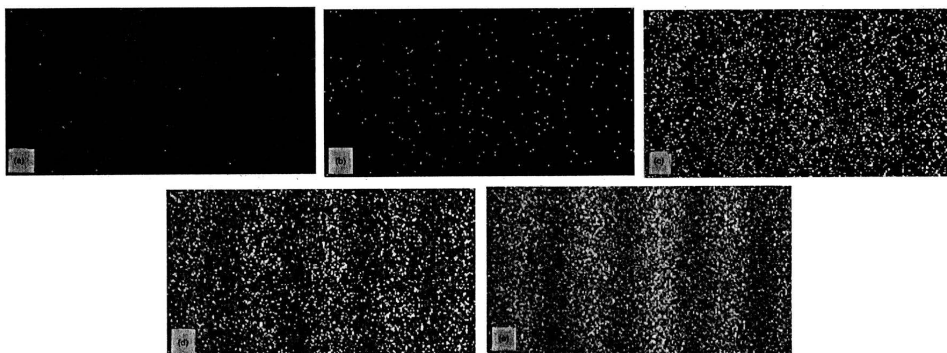
1.2-сурет. Эксперименттің сызбалық бейнесі.

1.1-суреттегі экспериментте орындалған қатынастарды келтірейік:  
 $L / d \sim 10^3$ ,  $\lambda \sim 10^3 \text{ \AA} = 10^{-5} \text{ см}$ .

Сонымен интерференциялық жолақтардың арасы – шамамен 0.1 мм.

Электрондық шоғыр пайдаланылған аналогиялық эксперимент алғашқы рет тек 1939 жылы жасалды! Эксперименттердің мұндай түрлерін ертерек «Gedanken-эксперимент», яғни «қиялдағы» немесе «гипотетикалық» деп атаған. Қазіргі заманда олар іс жүзінде жүргізілген. Тономура және басқалардың [Тономура (1989)] мақаласынан алынған суреттерден Юнг эксперименттерімен таңғаларлықтай ұқсастықты көреміз (1.1-сурет). Алайда, кейбір айырмашылықтар

да бар. Біріншісі – масштабтарының айырмашылығы. Көрінетін жарық үшін интерференциалық жолақтардың арақашықтығы 0.1 мм болса, электрондық шоғырлармен жүргізілген экспериментте –  $10^{-4}$  мм. Бірақ бұл айырмашылық (сапалық емес, мөлшерлік) аса маңызды емес, ол тек сондай эксперименттерді дайындаудағы едәуір техникалық қиындықтарды ғана сипаттайды. Әрине, мұндағы маңызды айырмашылық – ол электрондардың массасы және заряды бар бөлшектер болуы (ал жарық – «өлбетте» толқын). *1.3-суреттен* электрондардың жекеленген бөлшектер екені анық көрінеді. Оған қоса, осы экспериментте электрондардың өлсіз шоғыры  $10^3$  сек<sup>-1</sup> пайдаланылды. Егер электрондардың орташа жылдамдығы  $\sim 0.4c$  деп есептейтін болсақ, онда электрондардың орташа арақашықтықтары  $\sim 150$  км болар еді. Екінші жағынан, эксперименттік қондырғының ұзындығы бар-жоғы 1.5 м. Әрине мұндай жағдайда электрондар «біртіндеп» жетеді, яғни электрондар өзара әсерлеспейді. *1.3-суретте* көрсетілген бес бейне 10, 100, 3000, 20 000 және 70 000 электрондардың өткеніне сәйкес келеді.



1.3-сурет. Жеке электрондардың интерференциясы.

Бұдан парадокстық қорытынды жасауға болады: электрон – бөлінбейтін бөлшек, алайда, екі тесіктен өткізгенде оның тәртібі толқын сияқты өзгереді. Яғни электрон екі тесіктен бір мезгілде өтеді және сонымен қатар толқындық пакеттер интерференцияланады! Бұл қасиет әдетте, «корпускулалық-толқындық дуализм» деп аталады. Мұның іргелі маңыздылығы: дуализм түсінігі электрондар шоғырына емес, тек жекеленген электронға ғана қатысы бар. Сонымен бұл қасиет тек кванттық механикалық бөлшектерге тән.

Заманауи технологиялардың көмегімен Юнг экспериментін төменгі интенсивтілікті жарық үшін қайталауға, яғни жарық кванттары – фотондар «біртіндеп» келетіндей етіп жасауға болады.<sup>1</sup> Шындығында Юнг және Тономураның (және басқалардың) эксперименттерінің бір-бірінен елеулі айырмашылықтары жоқ.

<sup>1</sup>

Шындығында мұндай эксперимент жүргізілген [Taylor (1909)].

Атомдық әлемде барлық бөлшектер (элементар бөлшектер, ядролар, атомдар, молекулалар) корпускулалық-толқындық дуализм қасиетіне ие (Луи де Бройль, 1925 жыл) болады екен. Оның мөлшерлік өрнегін жазайық, импульсі  $p$ -ге тең бөлшектің тәртібі толқын ұзындығы  $\lambda$  болатын толқын сияқты, мұндағы  $\lambda = h / p$ . Және керісінше, толқын ұзындығы  $\lambda$  жарық квантының тәртібі – импульсі  $p = h / \lambda$  болатын бөлшек тәрізді.

### 1.1.2 Атомдардың орнықтылығы және тектестігі

Микроскопиялық әлемдегі физикалық құбылыстардың екінші ерекшелігі – атомдардың орнықтылығы мен олардың абсолюттік тектестігі. Мысал ретінде сутегі атомын – электрон мен протонның байланысқан күйін қарастырайық. Классикалық механикада протон айналасындағы электронның қозғалыс теңдеулері:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{e^2}{r^2} + mr\dot{\theta}^2; \quad r^2\dot{\theta} = \text{const.}, \quad (1.1)$$

мұнда жеңіл болуы үшін электрондар радиусы  $r$  болатын шеңберлік орбиталармен қозғалады деп қабылдадық. Кулонның статикалық күші – электромагниттік әсерлесудің көп жақтылығының бірі. Ал Максвелдің теориясына сәйкес зарядталған бөлшек үдемелі қозғалыс кезінде жарық шығарып, өзінің энергиясын бірте-бірте жоғалтуы тиіс. Тұрақты  $r$  радиусты орбита орнықты бола алмайды. Үдемелі  $\dot{\mathbf{v}}$  қозғалатын электрон энергиясының уақыт бірлігіндегі шығынын:

$$S = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} (\dot{\mathbf{v}})^2 \quad (\text{эрг/сек}) \quad (1.2)$$

формуласымен табамыз (қараңыз [Landau and Lifshitz (1976 b)]). Энергияның шығыны өте аз деп жорамалдасақ, онда көптеген циклдер үшін орбитаны шеңбер ретінде қарастыруға болады. Онда (1.1) теңдеуінен табамыз:

$$|\dot{\mathbf{v}}| = \frac{e^2}{mr^2}.$$

Мұны (1.2) теңдеуіне апарып қойғаннан соң,

$$S = -\frac{dE}{dt} = \frac{2e^6}{3m^2c^3r^4}$$

бірлік уақыттағы энергия шығынын аламыз. Ал шеңбер бойымен

қозғалатын электронның толық энергиясы:

$$E = \frac{1}{2} mv^2 - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r}.$$

Демек,

$$r^2 \dot{r} = -\frac{4e^4}{3m^2 c^3}.$$

Енді электрон-протон жүйесінің толық жойылу уақытын  $t_c$  белгілеп,  $r(t_c) = 0$  теңдеуін шешелік. Бастапқыда жүйе қарапайым атомның радиусымен  $a \sim 10^{-8}$  см шамалас деп жорамалдайық. Жоғарыдағы теңдіктерден оңай табамыз:

$$t_c = \frac{m^2 c^3}{4e^4} a^3 \simeq 10^{-10} \text{ сек.}$$

Яғни сутегі атомы  $\sim 10^{-10}$  секунд шамасында жойылып кетуі қажет! Бақытымызға қарай Табиғатта мұндай үдерістер жоқ.

Тіпті, қандай да белгісіз себептің салдарынан (1.2) теңдеуі атомдық әлемде қолдануға келмейтін болса да, Максвелдің теориясы макроскопиялық әлемде пайдаланылады емес пе?! Егер осы қиындықты ескермеген күннің өзінде, одан басқа өте күрделі мәселе – атомдардың «планетарлық» моделінің шешімін табу қажет. Демек, атомдардың радиустары әртүрлі және оларды қалыптастыруға (яғни бастапқы шарттарға) тәуелді.

Одан әргі талдауымыздан барлық периодтық қозғалыстардың «квантталатынын» көреміз: орбиталардың тек қана нақтылы дискреттік жиынтығы болады. Осының салдарынан бірдей атомдардың негізгі күйінде (яғни ең төменгі энергиясында) қасиеттері *қатаң тектес* болатынын көреміз. Кванттау орнықсыздықтың проблемасын да жеңіл табиғи түрде шешеді: кванттық стационарлық орбиталарға мүмкін болатын минималдық энергиялар сай келеді. Электрондар осы орбиталарда ешқандай шығынсыз қозғала алады, себебі басқа күйге өту үшін одан төмен энергиялық күй жоқ.

Неліктен (1.1) теңдеуінің бастапқы шарттарға тәуелсіз анықталған немесе өзіне тән радиус үшін шешімі болмайтынын байқау жеңіл. Біздің қолымызда бар шамалық параметрлер  $m$  мен  $e$ , ал олардың өлшем бірліктерімен

$$m = [\text{г}]; \quad e = [\text{г}^{1/2} \text{см}^{3/2} \text{сек}^{-1}]$$

өлшем бірлігі ұзындық болатын ешқандай шама ала алмаймыз. Қайта кванттық механикада Планк тұрақтысы  $h$  бар, ол динамика теңдеулеріне қатысады және оның өлшем бірлігі:

$$h \cdot \text{см}^2 / A = \text{эрг} \cdot \text{сек.}$$

Оның сандық мәні мынаған тең:

$$h = 6.62606896(33) \times 10^{-27} \text{ (эрг} \cdot \text{сек.)}$$

Ал егер қолымызда үш тұрақты:  $m$ ,  $e$ , және  $h$  болса, онда олардың комбинациясынан өлшем бірлігі ұзындық болатын шама құрастыра аламыз:

$$r_B = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2},$$

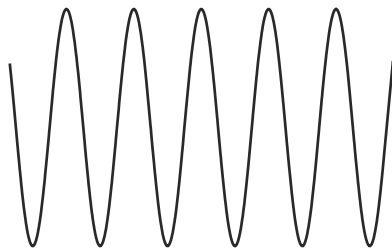
бұл Бор радиусы немесе атом радиусы деп те аталады. Оның сандық мәні:

$$r_B \simeq 5 \times 10^{-9} \text{ см.} \quad (1.3)$$

Макроскопиялық әлемнің (кристалдар, жұлдыздар, планеталар, биологиялық жүйелер, т.с.с.) реттелгендігі мен орнықтылығының негізін элементар бөлшектердің, атомдардың немесе молекулалардың ішкі қасиеттерінің абсолюттік тектес болуы құрайды. Мұндай тәртіпсіз микроскопиялық деңгейдегі құрылымдардың төтенше жоғары дәлдікті талап ететін биологиялық құбылыстары мүмкін болмас еді. Микроскопиялық әлемнің қарапайымдылығы біз өмір сүріп жүрген макроскопиялық әлемнің шексіз әралуандылығымен бір жағынан қарама-қайшылықта болса, екінші жағынан тылсым үйлесімде.

### 1.1.3 Туннельдік эффектiлер

Үшінші мысал бізге таныс электр өтімділік құбылысымен байланысты. Жеңілдетілген модельде электрондар *1.4-суретте* көрсетілген периодтық потенциалда қозғалады. Бұл – металдың кристалдық торының бір өлшемді көрінісі.



1.4-сурет. Периодтық потенциал.

Тосқауылдың биіктігінен кем энергиялы классикалық бөлшек бірінші потенциалдық шұңқырдан екіншісіне өте алмайды. Ол үшін потенциалдық тосқауылдан өтетіндей сыртқы күшті өріс қажет. Ал электрон кванттық механикалық бөлшек/толқын ретінде тосқауылдар арасында еркін қозғала алады (ол үшін оның энергиясы анықталған диапазонда табылуы қажет), сондықтан электрөтімділік орын алады. Бұл туннельдік эффектiнiң мысалы және корпускулалық-толқындық дуализммен тікелей байланысқан.

Кванттық механика осы және көптеген өзге де микроскопиялық әлемнің құбылыстарын тізбектей және әсем математикалық формализмімен баяндайды.

## 1.2 Кванттық механиканың басталуы

Кванттық механиканың өзін таныстырмастан бұрын 1900-1925 жылдары орын алған оқиғаларды талдап көрейік. Классикалық теорияның шеше алмаған бірқатар мәселелері: меншіктік жылу сыйымдылық, қара дененің жарық шығаруы, сондай-ақ атомның спектрлік сызықтары. Бұл мәселелердің сырын түсіндіре алмауына байланысты көп күш жұмсалды. Ақыр аяғы осы мәселелер кванттық механиканың тұжырымдамасына және әдеттегіден тыс ғылыми жаңалықтарға жетеледі.

### 1.2.1 Меншіктік жылу сыйымдылық теориясынан Планк формуласына

Канондық айнымалылармен  $\{p_i, q_i\}$ ,  $i = 1, \dots, s$  өрнектелетін макроскопиялық жүйені қарастырайық. Еркіндік дәрежесінің саны өте көп, реті Авагадро санына жақын:  $N_A \simeq 6 \times 10^{23}$ . Осындай жүйе  $T$  жоғары температуралы ыдыспен жылулық тепе-теңдікте деп жорамалдалық. Жүйенің энергиясын  $E(q_1, p_2, \dots, q_s, p_s)$  деп белгілейік. Больцман теориясына сәйкес жүйенің микрокүйі  $(q_1, q_1 + dq_1)$ ,  $(p_1, p_1 + dp_1)$ ,  $\dots$ ,  $(p_s, p_s + dp_s)$  аралығында табылуының ықтималдылығы:

$$P(q_1, \dots, p_s) dq_1 \cdots dp_s = \frac{1}{\mathcal{N}} e^{-E(q_1, p_1, \dots, p_s)/kT} \quad (1.4)$$

формуласымен анықталады.

Мұндағы  $\mathcal{N}$  – нормалаушы көбейткіш,  $k = 1.380658 \cdot 10^{-23}$  Дж · К<sup>-1</sup> – Больцман тұрақтысы.

Больцман заңынан «энергияның бірқалыпты таралу (эквипартиция)

заңы» шығады. Жүйе гамильтонианының түрі

$$H = \sum_{i=1}^s (\alpha_i p_i^2 + \beta_i q_i^2) \quad (1.5)$$

болса, онда гамильтонианның әрбір мүшесінің орташа мәні:

$$\langle \alpha_n p_n^2 \rangle = \langle \beta_n q_n^2 \rangle = \frac{1}{2} kT. \quad (n\text{-ге тәуелсіз}).$$

Яғни әрбір еркіндік дәрежесі энергияның  $\frac{1}{2} kT$  теңдей үлесіне ие болады. Ал меншікті жылу сыйымдылығының теориясы эквипартиция заңының қарапайым салдары болып табылады. Шындығында, идеалдық бір атомды газдар, яғни инерттік газдар үшін  $\alpha_i = \frac{1}{2m}$ ,  $\beta_i = 0$ , ал екі атомдық газдар үшін (мысалы  $H_2$ ,  $O_2$ , т.с.с.) энергияның өрнегі:

$$E = \sum_j E_j; \quad E_j = \frac{(p_{jx}^2 + p_{jy}^2 + p_{jz}^2)}{2m} + \frac{(p_\theta^2 + p_\varphi^2 / \sin^2 \theta)}{2I}$$

болады. Соңғы екі мүше айналмалы еркіндік дәрежесін (мұнда біз екі атомдар арасындағы тербелмелі қозғалысты ескермедік) білдіреді. Онда сәйкесінше бір атомдық және екі атомдық газдардың бір мөлі үшін толық энергия:

$$U = \frac{3}{2} k T N_A = \frac{3}{2} RT \quad \text{және} \quad U = \frac{5}{2} k T N_A = \frac{5}{2} RT.$$

Демек, газдың тұрақтысы үшін:

$$R = N_A k \approx 8.31441 \times 10^7 \text{ эрг} \cdot \text{моль}^{-1} \text{К}^{-1} = 1.987 \text{ кал} \cdot \text{моль}^{-1} \text{К}^{-1}.$$

Осы жағдайлар үшін меншік жылу сыйымдылық (молекулярлық масса бірлігінде,  $\text{кал} \cdot \text{моль}^{-1} \text{К}^{-1}$ ):

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \begin{cases} \frac{3}{2} R \approx 2.98 & \text{бір атомды газдар үшін,} \\ \frac{5}{2} R \approx 4.97 & \text{екі атомды газдар үшін.} \end{cases}$$

Осы нәтижелер бөлмелік температурада эксперименттік мәндермен жақсы үйлесімде. Бірақ температураны төмендеткен сайын  $C_V$  шамасы болжамдалған шамадан кеміп кетеді. Мысалы, 50 К екі атомдық газдар үшін бақыланатын  $C_V$ -нің мәні  $\frac{3}{2} R$  жақындайды.

Аналогиялық нәтижелер, яғни бөлмелік температурада қатты денелер үшін  $C_V = 3R \approx 5.9$  кал моль<sup>-1</sup>К<sup>-1</sup> (Дюлонг-Пти заңы) орындалатыны, ал температураның абсолюттік нөлге жақындағанда оның нөлге ұмтылатыны анықталды.

Қалайда болса эквипартиция заңы болжағандай кез келген температурада барлық еркіндік дәрежелері «тиесілі» үлесі  $\frac{1}{2}kT$  энергиясына ие бола бермейді. Температура төмендеген сайын еркіндік дәрежелері тоңазытылып, кеми бастайды да, соңында барлық еркіндік дәрежелері жоқ болады.

Осылайша 19-ғасырдың соңғы онжылдығында классикалық физика өзінің позицияларын жоғалта бастады. Бұл проблема *қара дененің жарық шығаруы* деген атпен танымал.

Тұрақты  $T$  температуралы ортаға бос резонаторды орналастырайық. Енді оны резонатор қабырғасымен жылулық тепе-теңдікте болатын электромагниттік жарықпен толтырайық. Резонатор ішіндегі жарықтың түсі қандай болады? Іштегі жарықтың толқын ұзындығы және салыстырмалы интенсивтілігі қандай болады? Резонатордың температурасын бір градусқа арттыру («вакуумнің меншікті жылу сыйымдылығы») үшін қанша жылу қажет?

Классикалық физиканың тұрғысынан жауап келесідей болады. Вакуумдағы электромагниттік өрістердің энергиясы мына түрде анықталады (*қараңыз* [Landau and Lifshitz (1976 b)]):

$$H = \frac{1}{8\pi} \int_V (E^2 + H^2) dV.$$

Векторлық потенциалды енгізейік және есептеуді жеңілдету мақсатында толық шағылуға сәйкес болатын шекаралық шарттарды қабылдайық:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{c^2}{4} \mathbf{p}_{(1)}^2 + \mathbf{k}^2 \mathbf{q}_{(1)}^2 \right) + \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{c^2}{4} \mathbf{p}_{(2)}^2 + \mathbf{k}^2 \mathbf{q}_{(2)}^2 \right).$$

Бұл жүйе екі тәуелсіз гармоникалық осциллятордың шексіз жиынтығына эквивалент. Қуысымыз куб (жақтарының ұзындығы  $L$ ) пішінді болсын. Онда  $k$  толқындық сандары дискреттік мәндерді қабылдайды (*20.2-қосымшаны қараңыз*):

$$k_x = \frac{\pi n_x}{L}; \quad k_y = \frac{\pi n_y}{L}; \quad k_z = \frac{\pi n_z}{L}; \quad n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \dots, \infty.$$

Осы гамильтонианның түрі (1.5) стандарттық болғандықтан, толық

энергияны эквипартиция заңына сәйкес есептеп табамыз. Жауабы өте қарапайым

$$U = f k T,$$

мұндағы  $f$  (еркіндік дәрежелерінің саны)  $= \infty$ , осылайша

$$U = \infty; \quad C = \frac{\partial U}{\partial T} = \infty.$$

Басқаша айтатын болсақ, Максвелл теориясына сәйкес тұрақты  $T$  температурада орналасқан резонатордағы электромагниттік жарықтың энергиясы шексіз болады. Резонатор ішіндегі температураны бір градусқа арттыру үшін жылудың шексіз мөлшерін жұмсау қажет! Бірлік көлемдегі қара дене жарығының энергиясын:

$$U = \sigma T^4; \quad \sigma = 7.64 \times 10^{-15} \text{ эрг см}^{-3} \text{ К}^{-4}. \quad (1.6)$$

эмпирикалық формуламен есептеп табайық. Бұл формула Стефан-Больцман заңы ретінде танымал.

Бұл мәселені *қара дененің жарық шығаруы* деп атайды.

Бұрыс нәтиженің себебін түсіндіру оңай: қуыстың іші толған жоғары жиілікті шексіз тербелмелі модалар – оларға  $n_x, n_y, n_z$ -тің кез келген мәндері сәйкес келеді, ал оның әрбірі  $kT$  энергияның өзіне тиесілі «үлесін» талап етеді. Кез келген температурадағы эффективті активті еркіндік дәрежелері әлдеқайда кем болатынын эксперимент жүзінде дәлелденген.

Алайда, бәрі өлі алда. Толық энергияны тікелей есептегенше

$$U = \int_0^{\infty} dv u(v),$$

жиіліктің шектелген  $(v, v + \delta v)$  аралығындағы әсерін қарастырайық.

Енді  $v_{(n)} = \frac{|n| c}{2L}$  ескеретін болсақ, одан:

$$dn = \frac{2L dv}{c}$$

теңдігін аламыз. Әрбір тербелмелі модаға оң бүтін сандардың  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$  жиынтығы сәйкес келеді. Ал  $v$  және  $v + dv$  жиіліктерінің арасындағы *тербелмелі модалардың саны*

$$N(v)dv = 2 \frac{1}{8} (4\pi n^2) dn = \frac{8\pi L^3}{c^3} v^2 dv$$

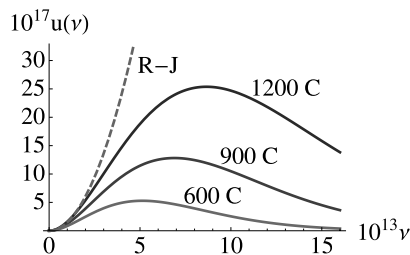
формуласымен анықталады

Мұндағы “2” көбейткіші поляризацияның мүмкін болатын варианттарын ескереді. Эквипартиция заңын қолдана отырып, бірлік көлемдегі жарық шығару энергиясының спектрлік тығыздығы және  $T$  температурасындағы жиіліктің анықталған диапазоны үшін:

$$u(\nu)d\nu = kTN(\nu)d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (1.7)$$

формуласын аламыз. Бұл  $u(\nu)$  үшін классикалық формуланы *Рэлей-Джинстің* формуласы деп атайды. Эксперименттердің нәтижелеріне сәйкес:

- (1) төменгі жиіліктер үшін Рэлей-Джинстің формуласы кез келген температураларда эксперименттік нәтижелермен жақсы үйлесімде болады;
- (2) Рэлей-Джинстің формуласы орындалатын жиіліктер диапазоны  $T$  температураны арттырған сайын жоғары жиіліктер жағына ығысады (*1.5-сурет*).
- (3) қажетті жоғары температураларда кез келген жиіліктер үшін классикалық формула дұрыс болғанымен, төменгі температураларда орындалмайды. Бұдан меншікті жылу сыйымдылығының классикалық теориясының шеше алмаған мәселесіне ұқсас екені шығады. Температура төмендеген сайын еркіндік дәрежелерінің тоңазытылатын сандары көбейе түседі, содан энергияның өзіне «тиесілі» үлесін ала алмайды.



**1.5-сурет.** Абсолют қара дененің жарық шығару спектрі. Мұнда  $T = 1200$  C болғандағы Рэлей-Джинстің (*R-J*) формуласы салыстыру үшін көрсетілген.

Мәселені шешу жөнінде алғашқы қадамды 1893 жылы Вильгельм Вин жасады. Ол эксперименттік мәліметтердің «ығысу заңын» қанағаттандыратынын байқады:

$$u(v)dv = \frac{8\pi}{c^3} F\left(\frac{v}{T}\right) v^3 dv, \quad (1.8)$$

мұндағы  $F$  функциясы эмпирикалық жолмен анықталады. Нақтылап айтқанда, егер  $u(v)$  кез келген температурада белгілі болса, онда (1.8) пайдаланып, кез келген басқа температуралар үшін таралуды табамыз. Оған қоса (1.8) формуласы Стефан-Больцман заңымен үйлеседі. Ығысу заңын (1.8) теориялық жолмен термодинамикадан да алуға болады [Tomonaga (1968)].

Вин  $F(x)$  функционалдық пішінін анықтай алмаса да, есесіне ол  $x$ -тің үлкен мәндеріндегі  $F(x)$  эмпирикалық тәртібін тапты:

$$F(x) \simeq k\beta e^{-\beta x}; \quad \beta = \text{const.}$$

Енді (1.8) формуласында алмастыру жасап, «Виннің формуласын» аламыз

$$u(v) dv = \frac{8\pi k\beta}{c^3} e^{-\beta v/T} v^3 dv = \frac{8\pi h\nu}{c^3} e^{-h\nu/kT} v^2 dv, \quad (1.9)$$

мұндағы

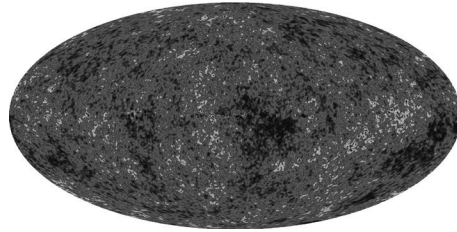
$$h \equiv k\beta = 6.626 \times 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}. \quad (1.10)$$

Сонымен, төменгі жиіліктердегі спектрлік тығыздықтарды дұрыс сипаттайтын (1.7) классикалық формуласын және жоғары жиіліктер үшін жарамды (1.9) Вин формуласын білеміз. Алайда, 1900 жылы Планк атақты формуласын қорытып шығарды (Планк таралуы):

$$u(v) dv = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} v^2 dv, \quad (1.11)$$

ол екі формуланың да интерполяциясы болды. Енді барлық есептеулер белгілі эксперименттік мағлұматтармен сәйкестенді.<sup>2</sup>

<sup>2</sup> Бүкіл Ғалам – Ғаламның кеңею моментінен бастап, осы күнге дейін 2.725 К температураға сәйкес келетін алғашқы сәулеленумен толтырылған «абсолют қара дене». Яғни ғарыштық микротолқындық фондық сәулелену [ағылшын тілінде CMB – *cosmic microwave background radiation*]. Анизотропия шамасының 0.0002 К (2003 ж.) болуы, материяның пайда болу моментінен бастап, температураның тербелуін меңзейді. Ал материяның пайда болуы галактикалардың құрылуымен байланысты (1.6-суретіне қараңыз).



**1.6-сурет.** WMAP ғылыми тобы түсірген СМВ анизотропиясы (бізге ұсынылған бейне үшін WMAP ғылыми тобына алғысымызды білдіреміз).

Оқырман осы формуланың  $h\nu / kT \ll 1$  немесе  $h\nu / kT \gg 1$  диапазонында болуына байланысты сәйкесінше, (1.7) немесе (1.9) өрнектеріне өзгеретініне көз жеткізуі қажет. Тоқ етері, егер:

$$\langle E \rangle = kT; \quad \Rightarrow \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1} \quad (1.12)$$

алмастыруын жүргізетін болсақ, онда Планк таралуы дұрыс болады. Бұл –  $T$  температурасындағы жиілігі  $\nu$  осциллятордың *энергия үлесінің* классикалық эквипартиция заңы. Онда (1.12) теңдеуінің мағынасы қандай?

Планктың физикаға қосқан іргелі үлесі кванттық физиканың пайда болуына әсерін тигізді: жоғарыда аталған алмастыру «энергия квантын» енгізуді білдіреді. Енді эквипартиция заңының орнына энергия квантының гипотезасы (1.12) энергияның таралуына әкелетінін қысқаша қарастырайық. Өрбір жиілік пен поляризация үшін электромагниттік тербелістердің гамильтонианы осцилляторлық болады:

$$H = aq^2 + bp^2.$$

Полярлық координаталарды  $E \equiv x^2 + y^2$ ;  $\theta \equiv \arctg y / x$  түрінде өрнектеледі, мұндағы  $x = \sqrt{aq}$ ;  $y = \sqrt{bq}$ , ал орташа энергия:

$$\langle E \rangle = \frac{\partial}{\partial (-1 / kT)} \log \mathcal{N}', \quad \mathcal{N}' = \int dE e^{-E/kT}.$$

Мұнда алымы мен бөліміндегі бұрыштық айнымалылар бойынша тривиалдық интегралдау қысқарып кетеді. Егер біз  $E$  бойынша интегралдайтын болсақ, онда, әрине,  $kT$  эквипартиция заңын аламыз.

Оның орнына түсуші энергия (кейбір себептер бойынша)  $\epsilon$  бірлік

кванттарға еселі деп жорамалдайық:

$$E_n = n\epsilon, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Онда интегралдаудың орнына:

$$\int dE \rightarrow \epsilon \sum_n, \quad (1.13)$$

қосындылау белгісін жазуымыз керек. Нәтижесінде алатынымыз:

$$\langle E \rangle = \frac{\partial}{\partial(-1/kT)} \log \mathcal{N}'' , \quad \mathcal{N}'' = \epsilon \sum_n e^{-n\epsilon/kT} = \frac{\epsilon}{1 - e^{-\epsilon/kT}}.$$

Яғни:

$$\langle E \rangle = \frac{\epsilon}{e^{-\epsilon/kT} - 1}.$$

Егер энергияның бірлігі ретінде

$$\epsilon = h\nu$$

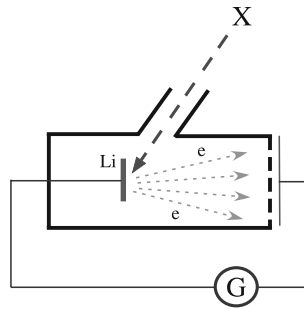
таңдап алсақ, онда (1.12) теңдігінен Планк формуласын аламыз!

Сонымен, Планктың формуласы электромагниттік энергияны кванттайды: әрбір кванттың толқын ұзындығы  $\lambda=c/\nu$ , ал энергиясы –  $h\nu$ . Эквипартиция заңы жоғары жиілікті ( $h\nu / kT \gg 1$  жағдайларында) тербелу модалары үшін орындалмайды. Тербеліс күйлерін кванттауды ескеретін меншікті жылу сыйымдылығының теориясын уақыт өткен соң, Дебай мен Эйнштейн бір-бірінен тәуелсіз жазды.

## 1.2.2 Фотоэлектрлік эффект

Абсолют қара дененің жарық шығаруының мәселесі шешілуі мен Планктың энергия квантын ашуы кванттық физиканың пайда болуына әкелді. Бұл идеяларды бірнеше жылдар бойы ғылыми қоғам қабылдамай келді. Жарықтың кванттық теориясы жөнінде тікелей дәлелдемелер қажет болды. Осындай дәлелдемені 1905 жылы Эйнштейн жасады: ол – фотоэмиссия эффектісі болатын (1887 жылы Герц тапқан). Оның эксперименттерінде X-сәулелері<sup>a</sup> (өте жоғары жиілікті электромагниттік сәулелер) сілтілік металдың (мысалы, Li) бетіне түсірілді. Метал бетінен шыққан электрондар фотоэлектрлік тогы ретінде тіркелді және оның күші өлшенді (1.7-суретті қараңыз).

<sup>a</sup> Орыс тіліндегі әдебиетте осы сәулелерді, әдетте, рентген сәулелері деп аталады



1.7-сурет. Фотоэлектрлік эффектiнiң сызбалық көрiнiсi.

Ең айтарлықтай ерекшелiктерiн атап өтейiк:

- (i) Жекеленген электрондардың энергиясы түсетiн X-сәулелерiнiң интенсивтiлiгiне тәуелсiз;
- (ii) X-сәулелерiнiң интенсивтiлiгiн жоғарылатқан сайын электрондар саны (фотоэлектрлiк тогы) артты;
- (iii) Электрондардың энергиясы түсушi жарықтың жиiлiгiне (толқын ұзындығына) тәуелдi: түсушi сәуленiң толқын ұзындығы қысқарған сайын, электронның энергиясы арта түстi;
- (iv) Бетке X-сәулелерi түскен сәттен бастап, фотоэлектрлiк тогының ағысы басталады.

Максвелл теориясының көмегiмен осы ерекшелiктердi түсiндiру мүмкiн болмады [Томонага (1968)]. Аталған ерекшелiктердiң барлығы Планк ұсынған жарықтың кванттық теориясының дұрыстығын тiкелей дәлелдейтiнiн Эйнштейн атап өттi. Шындығында, X-сәулелерiн әрқайсысы  $h\nu$  энергиясын (монохроматтық сәуле) тасымалдайтын фотондар ағыны деп жорамалдайық. Оған қоса, бастапқыда металл бетiндегi байланысқан электрон ендi бетке түскен барлық фотонның энергиясын жұтады делiк. Егер түскен энергия байланыс энергиясымен салыстырғанда артық болса, онда электрон босайды. Теория жарық жиiлiгi мен босаған электронның максималдық энергиясының өте қарапайым қатынасын болжайды (Эйнштейн өрнегi):

$$E = h\nu - A, \quad (1.14)$$

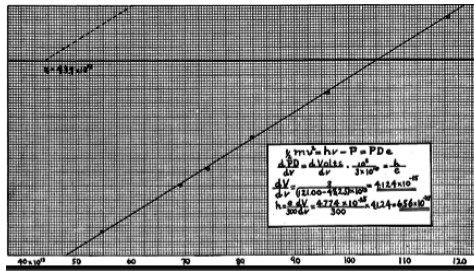
мұндағы  $A$  тұрақтысы қолданылған металдың түрiне тәуелдi. Шындығында эксперименттiк мағлұматтар Эйнштейн өрнегi

болжағандай сызықтық байланысты көрсетеді (1.8-суретті қараңыз). Көлбеу сызықтың бойымен нүктелерді интерполяциялап,  $h$ -тің мәнін табамыз (экспериментте бес спектрлік сызықтар пайдаланылған):

$$h \simeq 6.65 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек.}$$

Нәтижесі абсолют қара дененің жарық шығаруын зерттеу барысында Планктың тапқан шамасымен ((1.10)-өрнек) жақсы үйлесімде болды.

Келесі құбылыс – *Комптон эффектісі* (1.2-есебі) де жарықтың корпускулалық-толқындық табиғатын растайды.



1.8-сурет. Милликеннің [Millikan (1916)] экспериментінің нәтижесі. 1916 ж. Америкалық физикалық қоғамдастығы ©.

### 1.2.3 Бор атомының моделі

Кванттық механиканың ашылуына 1913 жылы шешуші қадам жасаған Нильс Бор болды. Сол уақытта жоғары температураға дейін қыздырылған газ өзіне тән спектрлік жарық шығаратыны белгілі болатын. (Мысалы, натрий лампы өзіндік қызғылт түс шығарады). Сутегінің спектрлік сызықтарының сериясына кіретін жарықтың толқын ұзындықтары 6562.8 Å, 4861.3 Å, 4340.5 Å, 4101.7 Å және т.б. Ал 1885 жылы Бальмер осы сызықтарды:

$$\lambda = \frac{n^2}{n^2 - 4} \lambda_0, \quad \lambda_0 = 3645.6 \text{ Å}, \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

эмпирикалық формуладан алуға болатынын тапты. Кейінірек Ридберг толқын ұзындығының орнына оның жиілігін пайдаланатын болса, заңдылықты:

$$\nu(n_2, n_1) = T_2(n_2) - T_1(n_1) \quad (1.15)$$

сияқты әлдеқайда қарапайым түрде жазуға болатынын байқады.

Мұндағы  $T(n)$  – серияны сипаттайтын спектрлік терм. Дербес жағдайда, әртүрлі сілтілік металдардың спектрлік сызықтары:

$$\frac{v}{c} = \frac{1}{\lambda} = \frac{R}{(m+a)^2} - \frac{R}{(m+b)^2} \quad (1.16)$$

сияқты өте қарапайым пішінде жазылады.

Мұндағы  $a, b$  – элементке тәуелді тұрақтылар. Ал  $R$  – Ридберг тұрақтысы, ол әмбебап тұрақты (яғни элементке тәуелді емес):

$$R = 109\,678 \text{ см}^{-1}.$$

(1.16) немесе (1.15) формулалары әртүрлі элементтердің сызықтық спектрлерін жақсы келтіреді және атап айтқанда, алгебралық қатынастарды қанағаттандырады

$$v(n_3, n_1) = v(n_3, n_2) + v(n_2, n_1).$$

Мұны Ритцтің комбинациялық ережесі деп атайды. Енді Ридберг формулаларын түсіндірейік.

Бордың идеясына сәйкес: қуыстағы электромагниттік өрістің энергиясы тәрізді байланысқан электрондардың энергиясы да тек квантталған мәндерді ғана қабылдай алады. Дәлірек айтқанда, атомдар жөнінде Бор келесі гипотезаларды (*Бор атомының моделі*) тұжырымдады:

- (1) Атомдағы байланысқан электрондардың мүмкін болатын энергиялары квантталады  $E_1, E_2, \dots$  (*энергия деңгейлері*). Электрон осы рұқсат етілген күйлердің (*стационарлық күй*) бірінде болғанда, ол жарық шығармайды.
- (2) Электрон бір күйден ( $n$ ) екінші күйге ( $m$ ) өткенде атом жарық шығарады; осындай өтулердегі шығарылатын немесе жұтылатын жарықтың жиілігі:

$$h\nu = E_n - E_m. \quad (1.17)$$

- (3) Стационарлық күйдегі электрон классикалық механиканың заңдарына сай қозғалады.<sup>3</sup>
- (4) Өте жоғары орбиталар үшін ( $n \gg 1$ ) жаңа механиканың нәтижелері классикалық физиканың нәтижелерімен үйлесімділікте болуы қажет. Бұл гипотезаны *Бордың сәйкестік принципі* деп атайды.

<sup>3</sup> Бұл гипотезаға кванттық механиканың тиісті тұжырымдамасы елеулі түзетулер енгізеді.

Бордың гипотезалары *1.1.2-бөлімінде* талдаған атомдардың «планетарлық моделіндегі» қиындықтарды жояды. Алғашқы екі гипотеза спектрлік термге (немесе  $E_n$  энергиялық деңгейлерге) іргелі мағына бере отырып, Ридберг формуласының табиғи түсініктемесіне әкеледі. Эмпирикалық  $E_n \propto -\frac{1}{n^2}$  формуласын және классикалық (1.1)

формуласын сәйкестендіру принципінң көмегімен біріктіріп, Бор сутегі атомының энергиялық деңгейлерін алды:

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}; \quad n = 1, 2, \dots$$

Олар *Бор деңгейлері* деп аталады. Сонымен қатар  $m$ ,  $e$ ,  $c$  және  $h$  тұрақтыларын пайдаланып, Ридберг тұрақтысын анықтап берді:

$$R = \frac{2\pi^2 me^4}{ch^3} \simeq 1.09 \times 10^5 \text{ см}^{-1},$$

ол өзінің эмпирикалық мәнімен сәйкес келеді ([Tomonaga (1968)] *қараңыз*). Одан басқа, Бор сутегі атомының мөлшерін анықтай алды (*Бор радиусы*)

$$r_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 0.529177 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

мұндағы  $\hbar$  тұрақтысы  $h$ -пен байланысты және Планк тұрақтысы деп аталады:

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \simeq 1.05 \times 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}.$$

Атомда стационарлық күйлердің бар болуы 1913 жылы Франк пен Герц жүргізген бірнеше әсем эксперименттерде көрсетілді.

## 1.2.4 Бор-Зоммерфельдтің кванттау шарты; де Бройль толқыны

Сонымен, бастапқыда электромагниттік өрістің энергиясын кванттау (Планк), заттағы атомның (немесе молекуланың) тербеліс энергиясы (Дебай-Эйнштейн) және атомдағы байланыс энергиясы (Бор) көрсетілді. Бірақ кванттық механиканың тиісті тұжырымдамалары Гейзенбергтің (1925 ж.), Шредингердің (1926 ж.) және басқа да ғалымдардың еңбектерін күтіп отырды. Кванттық механика жөнінде бастамастан бұрын, ерекше тарихи және ұстаздық мәнге ие болған екі түйінді

идеяларды талдауды жөн көрдік.

Бор мен Зоммерфельд кез келген классикалық шектелген қозғалысқа қолдануға болатын кванттаудың әмбебап әдісін тұжырымдауға тырысты. Бор-Зоммерфельдтің кванттау ережесіне сәйкес мүмкін болатын классикалық траекториялардың ішінде тек келесі төмендегі шартты қанағат ететіндерді (жеңіл болу үшін ережені бір өлшемді қозғалыс үшін жазамыз) ғана кванттауға болады:

$$\oint pdq = nh \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.18)$$

мұндағы  $q$  және  $p$  – канондық айнымалылардың жұбы, ал интегралдау классикалық қозғалыстың толық периоды бойынша жүргізіледі.

### Ескертулер

- Квазипериодтық қозғалыспен шектеу маңызды. Одан кейінірек Эйнштейн классикалық интегралданатын жүйелер үшін жалпы түрін алды. Оған қоса (1.18) теңдеуі одан да жалпы жүйелермен үйлесімде болатыны көрсетілді. *21.5-қосымшаны қараңыз.*
- Гармоникалық осциллятор үшін (1.18) теңдеуі Планк гипотезасымен  $E_n = n\omega\hbar = nh\nu$  жақсы үйлесімде. Бірақ қатаң қарайтын болсақ, кванттық механиканың нәтижесінен аддитивтік тұрақтыға айырмашылығы бар (*3.4-бөлімін қараңыз*).
- Сутегі атомы үшін (1.18) теңдеуі Бордың энергиялық деңгейлерін дұрыс көрсетеді.
- Формализмнің үйлесімді болуы үшін (1.18) теңдеуіндегі интеграл *адиабаталық инвариант* болуы маңызды. Яғни, егер гамильтониандағы параметр баяу өзгертін болса, онда осы уақыт периодында интеграл инвариантты болып қала береді.
- Бор-Зоммерфельд кванттауының шарты қатал емес: кванттық механикада ол тек жартылай классикалық жуықтауында орынды.

Корпускулалық-толқындық дуализм кванттық механиканың тұжырымдамасын толықтай аяқтау үшін жетіспей тұрған бөлігі болатын. Бірінші ол жарық, одан соң электрон үшін табылды. Шындығында, дуализм кез келген атомдық бөлшектер (де Бройль, 1925 жыл) үшін орынды. Импульсі  $p$ -ге тең бөлшекке толқын сәйкес келеді, оның ұзындығы

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (1.19)$$

Бұл – *де Бройль толқыны*. Және керісінше, монохромат жарық

(толқын ұзындығы  $\lambda$ ) импульсі  $p$  болатын бөлшек сияқты.

Дәлірек айтқанда, бөлшек толқындық пакетпен сипатталады, ал пакет импульсінің құраушылары де Бройль формуласы арқылы әртүрлі Фурье құраушыларымен байланысқан. Бөлшектің жылдамдығы толқындық пакеттің фазалық жылдамдығына емес, оның группалық жылдамдығына тең [Born (1989)]. Де Бройльдің пайымдауынша Бор-Зоммерфельд кванттауы (1.19) теңдігінің салдары болып табылады.

Қарапайым (1.19) теңдігі іргелі мағынаға ие. Ол корпускулалық-толқындық дуализмнің әдеттен тыс түсінігінің сандық интерпретациясының алғашқы қадамы болды.

---

### Тереңдетіп оқу үшін

Тарихи дамумен жете танысу үшін Макс Борнның *Атомдық физика* кітабын *қараңыз* [Born(1989)]. Кванттық физиканың тарихы: оның кіріспесінен сол кездегі тұжырымдамасына дейін келтірілген бірден-бір оқулық Томонаганың кітабы [Tomonaga (1968)] болып табылады.

Кванттық механика жөніндегі түпнұсқалық мақалалардың ағылшын тіліндегі аударамаларының басылымдары [Heisenberg (1925), Born, Heisenberg, and Jordan (1926), Schrodinger (1926)]. Елеулі үлес қосқан басқа да авторлардың (Бор, де Бройль, Дирак, Эйнштейн, ван Влек, Паули және т.б.) еңбектерін мына екі кітаптан табуға болады: *Кванттық механиканың бастаулары* [van der Waerden (1968)] және *Толқын механикасы* [Ludwig(1968)]. Өкінішке орай, Шредингердің (неміс тіліндегі) іргелі мақалалары тек бөлектей ғана жаңғыртылған.

---

### Қосымшаларға нұсқаулық

*20.1-қосымшада* классикалық механиканың лагранждық және гамильтондық формализмдердің ең елеулі ерекшеліктері қарастырылған. *20.2-қосымшада* вакуумдегі электромагниттік өрістерді шексіз тәуелсіз гармоникалық осцилляторлар арқылы қалайша өрнектеуге болатындығы көрсетілген.

### Есептер

(1.1)  $m_e$ ,  $h$ , және  $e^2$  тұрақтыларының көмегімен өлшемі ұзындық болатын шамалардың толық жиынын құрастырыңыздар. Олардың қатарына жарық жылдамдығын  $c$  қосып, қайта көріңіздер.

(1.2) X-сәулелердің тыныштық күйіндегі электрондағы шашырауын зерттейік. Толқын ұзындығы  $\lambda$  болатын X-сәулелерді энергиясы  $h\nu$  және импульсі  $p = \frac{h\nu}{c}$  (мұндағы  $\nu = \frac{c}{\lambda}$ ) болатын фотондар ағыны деп қарастырайық. Электронның соңғы күйінің импульсі мен энергиясын  $p$  және  $E$ , түскен және шашыраған фотонның арасындағы бұрышты  $\phi$ , ал түскен фотон мен электрон импульсінің арасындағы бұрышты  $\theta$  деп белгілейік. Фотонның соңғы күйіндегі энергиясы мен импульсі  $h\nu'$  және  $h\nu'/c$ . Энергияның және импульстің сақталу заңдарын пайдаланып, Комптон формуласын алыңыздар:

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{mc} \sin^2 \left( \frac{\phi}{2} \right).$$

(1.3) Сутегі атомын (массалары  $m_p \simeq 1836 m_e$  болатын протон мен электроннан құралады) қарастырайық. Келтірілген массаны  $\mu$  есептеңіздер және оны  $m_e$  салыстырыңыздар. Шеңбер радиусы  $r$  үшін қозғалыстың классикалық теңдеуін шешіңіздер және пішіні  $\theta(t) = 2\pi\nu t + \delta$  болатын  $\theta$  бұрыштық айнымалысы үшін шешімін жазыңыздар. Электронның  $r = 5 \cdot 10^{-9}$  см болғандағы  $\mathbf{v}$  жылдамдығын есептеңіздер. Энергияны есептеңіздер  $h\nu$  және оны  $T = 290$  K температурасында жылулық энергиясымен  $kT$  салыстырыңыздар, мұндағы  $k$  – Больцман тұрақтысы  $k = 1.38 \times 10^{-16}$  эрг  $\times$  K $^{-1}$ .

(1.4) Сыртқы электромагнит өрісінде қозғалатын зарядталған бөлшектің гамильтонианы: 
$$H = \frac{\left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2}{2m} + q\phi.$$

Оның Лагранж функциясынан шығатынын тексеріңіздер:

$$L = m \frac{\dot{\mathbf{r}}^2}{2} + \frac{q}{c} \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A} - q\phi(\mathbf{r}).$$

Осындай бөлшек үшін Эйлер-Лагранж және Гамильтон теңдеулерін салыстырыңыздар.

- (1.5) Классикалық механикада фазалық кеңістіктің  $(q_i, p_i)$  және  $(q_i + \delta q_i, p_i + \delta p_i)$  аралығындағы толтырылған деңгейлердің көлемі инвариантты болып қалатынын көрсетіңіздер. Сонымен қатар жүйенің уақыт бойынша дамуын тоқтатпайды (Лиувилль теоремасы).
- (1.6)  $V$  жылдамдығымен қозғалатын бақылаушы үшін Планктың таралуын жазыңыздар.
- (1.7) Жазық айна  $z$  осіне перпендикуляр орнатылған. Ол температурасы  $T$  болатын жарық шығарушы қуысқа  $z$  осінің бойымен  $V$  жылдамдығымен қозғалады. Айнаның үйкеліс күшін есептеңіздер.

---

### Сандық талдау

- (1.1) Планк таралуының температуралық тәуелділігін зерттеңіздер.

# Кванттық механиканың заңдары

## 2

- 2.1 Кванттық күйлер
  - 2.2 Анықталмағандық принципі
  - 2.3 Іргелі постулат
  - 2.4 Шредингер теңдеуі
  - 2.5 Үздіксіз спектр
  - 2.6 Толықтылық
- Тараудың қорытындысы  
Есептер  
Сандық талдау

Осы тарауда кванттық механиканың негізгі принциптері көрсетілген.

### 2.1 Кванттық күйлер

*1-тарауда* талданған Тономура және басқалардың эксперименттері де Бройль қатынасын тікелей дәлелдейді. Бұл жүйенің күйін классикалық механикадағыдай барлық канондық айнымалылардың  $\{p, q\}$  бір уақыттағы мәндерінің терминдерінде емес, толқын түрінде анықтауға мүмкіндік береді.

#### Кванттық механиканың іргелі заңына

сәйкес жүйенің кванттық күйі  $\psi(\{q\}, t)$  комплексті функциясымен сипатталады және оны *толқындық функция* деп атайды:

$$\boxed{\text{кванттық күй} \sim \psi(\{q\}, t)} . \quad (2.1)$$

Ол түйіндес импульстерге емес, канондық координаталар мен уақытқа тәуелді.<sup>1</sup>

Толқындық функцияны білу күй жөніндегі толық ақпаратты

---

<sup>1</sup> Мұндай сипаттауда біз симметрияның әсемдігіне азды-кемді «шығынданамыз»: классикалық механиканың гамильтондық тұжырымдамасында канондық координаталар мен импульстер енгізіледі. Шындығында, кванттық механикалық заңдылықтар аналогиялық  $p \leftrightarrow q$  симметрияға ие болмайды: оның (кванттық механиканың) айқын кемшілігі нақты көріністі таңдаумен байланысты. Оны 7.1-бөлімінде толығырақ түсіндіреміз.

қамтиды. Бұл сол күйдегі жүргізілген кез келген өлшеулердің әртүрлі нәтижелерін алудың ықтималдылығын анықтауға мүмкіндік береді.

Формальдық ұқсастыққа қарамастан, толқындық функцияның кванттық және классикалық механикалардағы мағыналарының арасында әлдеқандай айырмашылық бар. Классикалық механикадан айырмашылығы: толқындық функция материяның немесе энергияның кеңістіктік-уақыттық таралуын сипаттамайды.  $\psi$  -дің интерпретациясы ықтималдылық сипаттамаға ие.

Мысалы, күйдің кеңістігі  $[q, q + dq]$  аралығында табылуының кванттық механикалық ықтималдылығы келесі өрнекпен анықталады:

$$dP = |\psi(\{q\}, t)|^2 dq, \quad (2.2)$$

мұндағы  $dq \equiv dq_1 \cdot dq_2 \cdot \dots \cdot dq_s$ . Қарапайым үш өлшемдегі қозғалатын бөлшек үшін  $\mathbf{r}$  нүктесінің айналасында табылуының ықтималдылығы

мынаған тең:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}. \quad (2.3)$$

Еркіндік дәрежесі  $s$ -ке тең үш өлшемді кеңістігінде  $\psi(\{q\}, t)$  функциясы  $s$  айнымалылардың санына тәуелді болады (мысалы, екі бөлшектен тұратын жүйе үшін  $s = 6$ ). Бұл  $\psi$  -дің үш өлшемді кеңістіктегі материяның қандай да қасиеттерімен тікелей байланысты болмайтындығының айғағы.

Толық ықтималдылық бірге тең болуы қажет, демек,

$$\|\psi\|^2 \equiv \int |\psi(\{q\}, t)|^2 dq = 1.$$

Бұл – күйдің нормасы. Кез келген толқындық функция үшін  $\int |\psi(\{q\}, t)|^2 dq$  интегралын сәйкес тұрақтыға көбейту арқылы нормалауға болады, сол тұрақтыны – *нормалаушы көбейткіш* деп атайды.<sup>2</sup> Бұдан  $\psi$  және  $C \cdot \psi$  (мұндағы  $C$  – нөлге тең емес комплекстік көбейткіш) толқындық функциялары бірдей физикалық күйді сипаттайтынын табамыз, яғни

$$\psi \sim C\psi, \quad C \neq 0.$$

Басқа сөзбен айтатын болсақ, кванттық күй  $\mathcal{H}^3$  кеңістігіндегі

<sup>2</sup> Мысалы,  $\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{r}^2}$  функциясын нормалауға келмейді, мұндай функция қандай да физикалық күйді сипаттай алмайды.

<sup>3</sup> Дәлірек айтқанда  $\psi$  функциясы Гильберт кеңістігінде жатады, 7.2-бөлімін қараңыз.

нормаланған функциямен өрнектеледі.

Толқындық функциялар арқылы өрнектелген физикалық күйлер іргелі маңызы бар қасиетке ие: олар

### суперпозиция принципін

қанағаттандырады. Суперпозиция принципіне сәйкес егер  $\psi_1$  және  $\psi_2$  екі мүмкін болатын (кванттық) күй болса, онда олардың сызықтық комбинациясы да

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2,$$

(мұндағы  $c_1, c_2$  – кез келген екі комплекстік сан, олар  $|c_1|^2 + |c_2|^2 \neq 0$  шартын қанағаттандырады<sup>4</sup>) мүмкін болатын күйді өрнектейді. Мұны математикалық жалпылауға болады, ол үшін рұқсат етілген күйлердің ансамблі толқындық функциялардың  $\mathcal{H}$  сызықтық кеңістігін құрайтынын атап өтеміз.

Одан әрі тізбектілікті қамтамасыз ету үшін толқындық функцияның уақыт бойынша эволюциясы төмендегі теңдеумен сипатталуын суперпозиция принципі талап етеді

$$\mathcal{L}\psi = 0,$$

мұндағы  $\mathcal{L}$  – келесі шартты қанағаттандыратын сызықтық оператор

$$\mathcal{L}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\mathcal{L}\psi_1 + c_2\mathcal{L}\psi_2.$$

Ал  $\mathcal{L}$  операторының айқын пішінін кешірек көрсетеміз.

Жоғарыда атап өткеніміздей, кванттық механиканың ықтималдылық интерпретациясы  $\mathcal{H}$  кеңістігінде жататын функцияларға қосымша талаптар қояды: олар келесі шартты қанағаттандыруы қажет

$$\int |\psi|^2 dq < \infty,$$

яғни, олардың квадраттары интегралдануы ( $\mathbb{L}^2$  кеңістігі) керек. Шекті өлшемді векторлық кеңістікте скалярлық көбейтіндісінің ұғымы енгізіледі. Мысалы,  $\mathbb{R}^3$  кеңістігінде оның түрі келесідей болады

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3.$$

Бұл вектордың нормасын  $\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$  анықтауға мүмкіндік береді. Аналогиялық түрде толқындық функциялардың кеңістігінде екі  $\psi_1, \psi_2$  векторлар күйлерінің арасындағы скалярлық көбейтіндіні төмендегідей енгізуге болады

<sup>4</sup> Осы ереже орындалмайтын маңызды жағдайлар да кездеседі, алайда кітапта бұл сұраққа енді қайтып оралмаймыз.

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^* \psi_2 dq, \quad (2.4)$$

Ал күй векторы нормасының анықтамасы, әрине, келесідей болады

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}.$$

Кез келген екі элементтер жұбының арасындағы скалярлық көбейтінді көрсетілген түрде анықталатын болса, онда векторлық кеңістікті *Гильберттік* деп атайды. Осыдан скалярлық көбейтіндісі (2.4) формуласымен анықталатын  $\mathbb{L}^2$  кеңістігі гильберттік болатынын көреміз.

Жоғарыда біз Дирактың  $|\psi\rangle$  «кет» және  $\langle\psi|$  «бра» деп аталатын күйлердің векторлары үшін енгізген белгілеулерін пайдаландық. Ағылшын тілінен «bracket» сөзінің қазақша аудармасы «жақша». Осы векторлардың абстрактылық мағынасын кейінірек талдаймыз.

### Ескертулер

Кванттық күйдің толқындық функциямен сипатталуы классикалық толқындық динамикамен кейбір ұқсастығын көрсетеді. Сондықтан ертеде «толқындық механика» термині кванттық механиканың теңдеулері (Шредингер) үшін пайдаланылды. Алайда, классикалық және кванттық динамиканың арасында едәуір айырмашылықтар да бар. Толқындық функциясының өзіндік мағынасы мен кез келген классикалық толқынның амплитудасымен айырмашылығын талдағанбыз.

Мысалы,  $\psi$  және  $C \cdot \psi$  (мұндағы  $C \neq 0$ ) толқындық функциялары бір күүді сипаттайды, ал амплитудасының көбейткішімен ерекшеленетін екі классикалық толқындар энергиялары әртүрлі болатын физикалық түрлі құбылыстарды сипаттайды.

Суперпозиция түсінігі интерпретациясының кванттық механика және классикалық физикадағы едәуір айырмашылығы бар. Мысал ретінде екі  $A$  және  $B$  күйлерінде бола алатын жүйені қарастырайық. Ал  $O$  айнымалысы өлшеулерінің нәтижелері  $a$  ( $A$  күйінде) немесе  $b$  ( $B$  күйінде) болады деп жорамалдайық. Енді суперпозиция принципіне сәйкес басқа  $C$  күйі (мүмкін болатын физикалық күй) келесі күүдің векторымен анықталады

$$|C\rangle = c_A |A\rangle + c_B |B\rangle, \quad |c_A|^2 + |c_B|^2 \neq 0,$$

мұндағы  $c_A$  және  $c_B$  – қандай да бір кез келген комплекстік сандар. Жаңа  $C$  физикалық күйі  $A$  және  $B$  күйлерінің арасында анықталған. Оны қалайша түсінуге болады? Дербес жағдайда, егер  $O$  айнымалысының өлшеуі  $C$  күйінде жүргізілсе, онда нәтижесі қандай

болар еді?

Кванттық механиканың заңдылықтарына сәйкес нәтижесі не  $a$ , не  $b$  болады, ал олардың әрқайсысының ықтималдылығы мынаған тең

$$\mathcal{P}_a = \frac{|c_A|^2}{|c_A|^2 + |c_B|^2}; \quad \mathcal{P}_b = \frac{|c_B|^2}{|c_A|^2 + |c_B|^2}.$$

Басқа ешқандай варианты жоқ, тіпті егер  $O$  айнымалысы *априори* басқа мүмкін мәндерді қабылдай алатын болса да. Осылайша,  $C$  күйінің аралықтық сипаттамасы: *бастапқы күйлерге сәйкес келетін аралықтық болатын нәтиже арқылы емес, бастапқы күйлерге сәйкес келетін ықтималдылықтарының аралығындағы аралықтық болатын әрі бақыланатын шаманың анықталған нәтижесінің ықтималдылығы арқылы өрнектеледі* (дәйексөз Дирак кітабының §4-нан сөзбе-сөз келтірілді [Dirac (1958)]).

### 2.1.1 Құрамдас жүйелер

Екі (немесес одан артық) әсерлеспейтін және өзара тәуелсіз  $A$  және  $B$  субжүйелерінің толық толқындық функциясының түрі

$$\Psi_{A,B} = \Psi_A \cdot \Psi_B, \quad (2.5)$$

яғни екі жүйенің күйлерін сипаттайтын  $\Psi_A$  және  $\Psi_B$  толқындық функцияларының көбейтіндісі ретінде жазылады. Бұдан ықтималдылықтардың көбейтіндісі шығады, ал ол жүйелердің тәуелсіздігін көрсетеді. Әрине, кез келген дұрыс құрылған теория өте зерделі болжамдарға негізделеді. Кванттық механиканың көптеген практикалық қосымшаларындағы жетістіктері (2.5) көбейтіндісінің қасиеті өте жоғары дәлдікпен орындалатындығында.

Екінші жағынан, кванттық механикада тектес бөлшектер (электрондар, протондар және т.б.) жүйесінің толқындық функциясы сол бөлшектердің орын алмастыруына байланысты симметрияның анықталған қасиеттеріне бағынуы қажет. Ол талаптар Бозе-Эйнштейн (БЭ) статистикасы немесе Ферми-Дирак (ФД) статистикасы деп аталады және типтері бірдей бөлшектердің арасындағы корреляциясын, тіпті өзара әсерлесулері өте әлсіз болғанда да сипаттайды. Бозе-Эйнштейн және Ферми-Дирак **статистикаларының** кванттық механиканың барлық қосымшаларында өте терең салдарлары бар: элементар бөлшектер физикасында, ядролық, атомдық және молекулалық физикада, конденсацияланған орта физикасында және астрофизикада. *5.3-бөлімін қараңыз.*

Жалпы, егер тіпті статистикалық мағлұматтар ертеде әсерлескен екі (немесе одан артық) жүйелердің бөліктеріне сәйкес келмесе де,

олар кванттық механикада нақтыланған қатынастармен өрнектеледі. Анықталған жағдайларда осыған тән корреляцияларды **кванттық шатасу** деп атайды және оларды кейде тіпті бөлек бөліктері қазіргі моментте және келешекте себеп-салдарлы әсерлесе алмаса да тәжірибеде байқауға болады. Корреляциялар локальдық те емес және себеп-салдарлық пішінде де емес болатыны айқын. Ал бұл іргелі, яғни күшті және электроөлсіз әсерлесулердің локальдік және себептік теориялардың арқасында таңғаларлық жоғары дәлдікпен сипатталатындығына толықтай қарама-қайшылықта.<sup>5</sup>

Кванттық механиканың осындай ерекше аспектілері кітаптың IV бөлігінде талданған.

### 2.1.2 Фотонның поляризациясы және кванттық механиканың статистикалық табиғаты

Классикалық физикада жарықтың поляризациясы вектор-потенциалды сипаттайтын  $\epsilon^\lambda(\mathbf{k})$  поляризациялау векторы арқылы өрнектеледі

$$\mathbf{A} = A^\lambda(\mathbf{k}) \cdot \epsilon^\lambda(\mathbf{k}) \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} + \dots$$

Түсінуді жеңілдету мақсатында жарықты монохроматтық деп қабылдадық. Өлшемдік жарық үшін келесі теңдеулерді пайдаланайық

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \epsilon \cdot \mathbf{k} = 0.$$

Соңғы өрнек мүмкін болатын екі тәуелсіз поляризацияны көрсетеді. Мысалы,  $x$  бағытындағы сызықтық поляризация векторының құраушысы  $\epsilon^1 = (1, 0, 0)$ ,  $\mathbf{k} = (0, 0, k)$  болады. Сондықтан

$$E_x = \frac{A^1}{c} \omega \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad E_y = 0;$$

аналогиялы, егер поляризация  $y$  бағытында болса, онда  $\epsilon^2 = (0, 1, 0)$ . Аралық бағыттағы  $(\cos \theta, \sin \theta, 0)$  поляризацияланған жарық  $\epsilon = (\cos \theta, \sin \theta, 0)$  поляризация векторымен өрнектеледі. Ал шеңберлік поляризацияланған жарық, мысалы,  $\epsilon^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i, 0)$  поляризация векторымен сипатталатын болса, оның электр  $\sqrt{2}$  өрісінің құраушылары

<sup>5</sup> Іргелі, яғни күшті әсерлесу үшін кванттық хромодинамика және электроөлсіз әсерлесуі үшін Глэшоу-Салам-Вайнбергтің стандарттық теориясы – ол нүктелік бөлшектердің қатал локальдік және себептік байланыстарға негізделген теориялар. Олар Табиғатты, ең болмағанда,  $\sim 10^{-16}$  см шамалар масштабында өте дәл сипаттайды.

$$E_x = \frac{A^+}{\sqrt{2c}} \omega \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad E_y = \frac{A^+}{\sqrt{2c}} \omega \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

түрінде жазылады. Сол сияқты эллипстік поляризацияланған жарық –  $\epsilon = \frac{1}{\sqrt{5}}(2, i, 0)$  және т.с.с. өрнектеледі. Онда поляризация күйі үшін жалпы түріндегі теңдеуді төмендегідей жазуға болады

$$\epsilon = c_1 \epsilon^1 + c_2 \epsilon^2, \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (2.6)$$

Кванттық механикада жарық шоғыры дегеніміз ол – фотондар ағыны, ал оның поляризациясы жеке фотондардың сипаттамаларымен, нақтылап айтқанда, фотонның мүмкін болатын екі күйлерімен (яғни берілген толқынның ұзындығы мен оның таралу бағытымен) анықталады. Егер басқа физикалық қасиеттерін ескермейтін болсақ, онда бір фотонның күйін келесі күй векторымен<sup>6</sup> өрнектеуге болады

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle, \quad (2.7)$$

мұндағы  $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ . Мысалы,  $|1\rangle$  және  $|2\rangle$  күйлерін  $x$  және  $y$  осьтері бойынша екі сызықтық поляризациялар көрінісі үшін келесі түрінде таңдап алуымызға болады, сонымен қатар

$$\langle 1 | 1 \rangle = \langle 2 | 2 \rangle = 1, \quad \langle 1 | 2 \rangle = 0.$$

Осы күйлер (2.6) классикалық поляризациялық векторына сәйкес келеді. Таралуының бағытына перпендикуляр жазықтықта жататын  $(\cos\theta, \sin\theta)$  бағытында сызықтық поляризацияланған фотон коэффициенттері  $c_1 = \cos\theta$ ,  $c_2 = \sin\theta$  болатын (2.7) күй векторымен өрнектеледі.

Кейбір кристалдардың келесі қасиетке ие болатыны мәлім: жарықтың поляризациялық векторы кристалдың поляризация осі деп аталатын өзіне тән ось бойымен бағыттас болса, онда жарық кристалдан өтеді. Қарапайым мысал ретінде *Поляроид* деп аталатын пластикалық материалды келтірейік. Егер түсетін жарық кристалдың поляризация осінің бойымен поляризацияланған болса, онда жарық толықтай өтеді. Егер жарық кристалдың поляризация осімен  $\theta$  бұрышын құрайтын бағыттың бойымен сызықты поляризацияланған болса, онда өтетін жарықтың интенсивтілігі келесі эмпирикалық ережеге бағынады

$$I(\theta) = I(0) \cdot \cos^2 \theta, \quad (2.8)$$

<sup>6</sup> Фотонның поляризациясы «екі күйлер жүйесінің» немесе «екі деңгейлі жүйенің» әдеттегі мысалы болып табылады. Ал ақпараттың кванттық теориясында ондай жүйені кванттық бит немес жай ғана *кубит* деп атайды.

оны Малюс заңы деп атайды.

Енді осы тамаша эмпирикалық заңның физикасын кванттық механика тұрғысынан қарастырайық. Түсетін фотон дұрыс поляризациялансын (мысалы,  $|1\rangle$ ) деп жорамалдайық, демек, ол кристалл арқылы өтеді. Ал егер оның поляризациясы бұрыс болса (яғни,  $|2\rangle$ ), онда ол өте алмайды. Егер түсуші фотон  $(\cos\theta, \sin\theta)$  бағытында поляризацияланған болса, онда оның күй векторын

$$|\psi\rangle = \cos\theta |1\rangle + \sin\theta |2\rangle$$

түрінде өрнектеуге болады ма? Нақтыланған  $h\nu$  энергиялы фотон бөліне алмайды. Экранға жетудің екі жолы бар: ол тесіктен не өтеді, не өтпейді. Қойылған сұрақтың жалғыз орынды жауабы: осындай фотонның тесіктер арқылы өтудің ықтималдылығын және өтпеудің ықтималдылығын анықтау болады. Енді  $P_+ = |c_1|^2 = \cos^2\theta$  өту ықтималдылығы және  $P_- = |c_2|^2 = \sin^2\theta$  өтпеу ықтималдылығы деп белгілейік. Онда осылайша поляризацияланған фотондардың жиынтығынан құралған жарық шоғыры үшін кристалл арқылы өтетін фотондардың саны  $I(0) \cdot \cos^2\theta$  болады. Мұндағы  $I(0)$  – түсетін фотондардың саны. Сонымен, өтетін жарық (кристалл арқылы өтетін фотондардың санына пропорционал болатыны анық) үшін Малюс заңын кванттық механикадан алдық!

Бұдан кванттық механиканың ықтималдылық интерпретациясы жарық жөніндегі кейбір эмпирикалық фактілердің тікелей салдары болатынын анық көреміз. Тіпті, бұл – фактілердің жалғыз логикалық түсініктемесі болып табылады.

## 2.2 Анықталмағандық принципі

Егер электронды толқын сияқты өрнектей алатын болсақ, онда бөлшектің қозғалыс траекториясының классикалық ұғымы кванттық механикада мағынасыз болып қалады. Яғни бір мезгілде электронның координаталары мен импульсін анықтау мүмкін емес. Алайда бұдан бөлшектің координатасы мен импульсінің тұжырымдамасы өзінің мағынасын жоғалтады деген қорытынды жасауға болмайды. Кванттық механикадағы күйді сипаттау –  $q_i$  канондық координаталардың және  $p_i$  канондық импульстердің белгіленген мәндерінің жиынтығына эквивалент емес.

Сонымен қатар шектік жағдайда  $h$  Планк тұрақтысын ескермеуге болатындай кіші шама деп есептейтін болсақ, онда кванттық механика заңдары классикалық механика заңдарына ауысуы (көшуі) қажет. Яғни,  $h$  тұрақтысы классикалық және кванттық формулаларының

орындалатын облыстарының арасындағы шекара қызметін атқарады.

Осы «шекараның» математикалық өрнегін Гейзенберг анықтаған болатын. Біз бөлшектің координатасы мен импульсінің нақты мәндерінің сәйкесінше әрбір құраушылары үшін  $\Delta x_i$  және  $\Delta p_i$  дәлдігімен анықтап көрейік. *Гейзенбергтің анықталмағандық принципіне* сәйкес, олар келесі теңсіздіктерді қанағаттандырады

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.9)$$

Осы анықталмағандық теңсіздіктері бөлшектердің күйлерін толқындық функцияның терминінде сипаттаудан шығады. Мысалы,  $t=0$  уақыт моментіндегі гаустік пішіндегі толқындық пакетті қарастырайық, ол келесі өрнекпен анықталады

$$\psi(x, 0) = \text{const} \cdot e^{-x^2/d^2}.$$

Таралу  $x = 0$  нүктесінің төңірегінде концентрацияланғанымен, оның дисперсиясы:

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} \sim d. \quad (2.10)$$

Мұны пакет орнының (координатасының) анықталмағандығы ретінде де интерпретациялауға болады. Өткен параграфта көрсеткеніміздей, мысалы,  $x^2$  орташа мәнін  $|\psi(x)|^2$  ықтималдылық тығыздығының көмегімен есептеуге болады.

Сонымен қатар  $\psi(x)$  толқындық функциясын жазық толқындарына жіктеуге болады. Шындығында, оның Фурье-жіктеуі келесідей болады

$$\psi(x) = \int_0^{\infty} d\lambda \left( a(\lambda) e^{2\pi i x / \lambda} + a^*(\lambda) e^{-2\pi i x / \lambda} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda a(\lambda) e^{2\pi i x / \lambda}.$$

Енді  $p = \frac{h}{\lambda}$  де Бройльдің қатынасын пайдаланып, осы жіктеуді гаустік типтегі толқындық пакеттің әртүрлі импульстік құраушылары арқылы қайта жазайық:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}(p) e^{ipx/\hbar},$$

мұндағы  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ . Гаустік толқындар үшін оның  $\tilde{\psi}(p)$  Фурье-құраушылары жеңіл есептеп табылады:

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} e^{-ipx/\hbar} e^{-x^2/d^2} = \text{const} \cdot e^{-p^2 d^2 / 4\hbar^2}.$$

Мұндай нәтиже, әрине, импульс анықталмағандығының дәрежесін төмендегідей деп түсіндіруге болады

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{d}. \quad (2.11)$$

Гейзенберттің қатынастары (2.10) және (2.11) теңдеулерінің салдары.

Егер бөлшектің кеңістіктегі орны нақты белгілі болса, онда анықталмағандық қатынастарынан оның импульсін өлшеу мүмкін емес және керісінше болатынын көреміз. Жалпы, анықталмағандықтарының

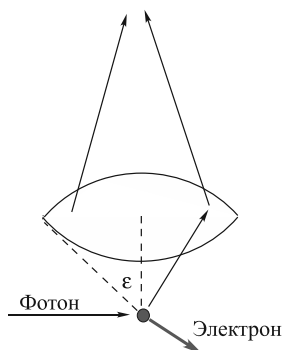
көбейтінділері  $\frac{\hbar}{2}$ -ден кем болмайды.

Мұндай шекаралаудың физикалық мағынасы қандай? Сонда импульстің  $z$ -құраушысы  $p_z=0$  дәл анықталғандай етіп жақсы фокусталған бөлшектердің шоғырын (мысалы,  $x$  осінің бойымен) дайындау мүмкін емес пе? Оған қоса, өлшеулердің көлбеу  $z$  құраушысын қалағанымызша жоғары дәлдікпен, яғни  $p_z$  және  $z$  дәл мәндерін бір мезгілде білетіндей етіп ондай күйді жасай алмаймыз ба? Немесе, ең болмағанда алдындағы – дәл күйге максималды жақын болатын күйді жасай алмаймыз ба?

Бұл сұрақтарды бірқатар «Gedanken-эксперименттерді» (гипотезалық немесе қиялдық эксперименттерді) жүргізу арқылы Гейзенберг талдаған болатын [Heisenberg (1930)]. Бұл жерде біз тек екеуін қарастырайық. Біріншісі оптикалық микроскоптағы электронның көлденең орнын өлшеуге байланысты (2.1-сурет). Жарық сол жақтан түсіп, электрондардан шашырап, объективтен көрінеді. Оптикадан белгілі, құралдың жіктеу мүмкіншілігі келесі формуламен анықталады

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \epsilon},$$

мұндағы  $\lambda$  – түсетін толқынның ұзындығы, ал  $\epsilon$  – объективтің бұрыштық апертурасы.



**2.1-сурет.** Микроскоп арқылы электронның көлденең орнын өлшеу

Өлшеу үдерісі кезінде комптондық шашыраудың нәтижесінде электрон  $h\nu/c$  серпу импульсін алады (1.2-есепті қараңыз). Фотонның бағыты тек  $\epsilon$  бұрыштық апертурамен анықталғандықтан, электронның көлденең құраушысы да (импульстің сақталу заңының салдарынан) келесі шамаға өзгереді

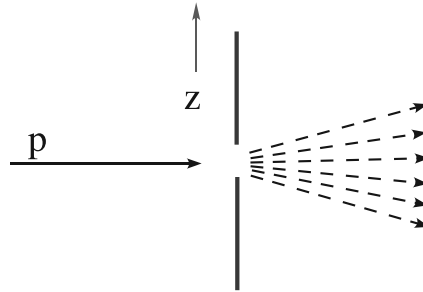
$$\Delta p_x \sim \frac{h\nu}{c} \sin \epsilon \sim \frac{h}{\lambda} \sin \epsilon.$$

Осыдан анықталмағандық қатынасы шығады

$$\Delta x \Delta p \sim h$$

Осы жағдай үшін жарықтың корпускулалық-толқындық дуализмі ең жартымды аргумент болып табылады.

Екінші қиялдық эксперимент тесік арқылы қабырғаға түсетін электрондардың көлбеу ( $z$ ) құраушысын (2.2-сурет) өлшеуге қатысты.



2.2-сурет. Тесіктен өтетін электронның көлбеу құраушысын анықтау

Қабырғаға дейін шоғыр өте жақсы фокусталған болсын, яғни импульстің көлбеу құраушысын нөлге тең деп есептейік. Тесіктің ені (апертурасы) электронның тесіктен өткеннен соң орнын табу кезінде анықталмағандық туғызады:

$$\Delta z \sim d.$$

Де Бройльдің гипотезасына сәйкес импульсі  $p$  электронның тәртібі ұзындығы  $\lambda = h/p$  толқын сияқты болады. Егер расында солай болса, онда тесіктен өткен электронның шашырау бұрышы  $\alpha$  болатын дифракцияға ұшырайды:

$$\sin \alpha \sim \frac{\lambda}{d},$$

мұнда біз өзге белгілі оптиканың нәтижесін пайдаландық. Сонымен, тесіктен өткен электронның анықталмағандық реті

$$\Delta p_z \sim |p| \sin(\alpha) = \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d}$$

импульске ие болады.

Ал электронның координатасы мен импульсінің көбейтіндісінен біз тағы да анықталмағандық қатынасын табамыз

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \sim h.$$

Бұл жолы да анықталмағандық принципін қорытып шығарғанда электронның корпускулалық-толқындық дуализмі шешуші рөл атқарды.

### Ескертулер

- Бұл теңсіздіктер бізге түйіндес айнымалылардың біруақытта өлшеуі жөнінде ақпарат береді. Мұнда біруақыттылыққа сәйкес келетін физикалық мағынада болатынын түсіну қажет. Өзге жағдаймен салыстырғанда электронның тесікті өткенге дейінгі  $p_z$  импульсінің анықталмағандығы мен оның тесікті өткеннен кейінгі  $z$  координатасы анықталмағандығының көбейтіндісін қажетті дәлдікке дейін кіші етуге болады. Алайда, мұндай көбейтіндінің тек философиялық мағынасы болады: одан арғы оқиғаларды зерттеуге және болжауға оның (осындай көбейтіндінің) бастапқы шарты ретінде қолдануға келмейді.<sup>7</sup>
- Гейзенбергтің теңсіздіктері сыртқы шарттарға (қолданылған әдістемелер, экспериментатордың тәжірибесіне, пайдаланатын қондырғылардың сапасына және т.б.) тәуелсіздігінің объективтілігін, физикалық шарттарын бейнелейді. Олар өлшеулерді жүргізу кезіндегі физикалық үдерістерінің динамикалық ерекшеліктерімен тікелей байланысты болатынын көрсетеді.
- Осы талдаулар кванттық механикалық өлшеулер аспектісінің өте маңыздылығын білдіреді: атомдық немесе субатомдық жүйелердің қатысуымен жүретін эксперименттердегі микроскопиялық жүйелерді өлшеу үдерістерінің нәтижесінде болатын бұрмаланулар белгіленген шекке дейін бақылауға алынбайды.
- Өлшеу нәтижелерінің кванттық механикалық болжаудың ықтималдылық сипаттамасы Гейзенбергтің анықталмағандық принципін сөзсіз салдары.

Өлшеу кезінде детерминизмінің классикалық мағынасының жоғалуы Гейзенбергтің анықталмағандық қатынастарының салдары

<sup>7</sup> Жалпы математикалық көбейтінді ұғымын енгізудің ешқандай қиындығы жоқ. Бірақ та іс-жүзінде нақты эксперименттерде қатаң *біртегізділікті* жүзеге асыру мүмкін емес. Одан да зоры: арнайы салыстырмалық теориясының тұжырымдамасына сәйкес уақыттың санақ жүйесіне тәуелділігі туындайды.

болып табылады. Бар айырмашылығы, жүйе ауытқымай қала береді және Шредингер теңдеуіне сәйкес уақыт бойынша абсолюттік детерминацияланған түрінде дамиды. Ал Шредингер теңдеуі – уақыт бойынша сызықтық дифференциалдық теңдеу.

Мұның бәрі классикалық механикамен айқын қарама-қайшылықта. Микроскопиялық үдерістерде жүйедегі өлшеулермен байланысты ауытқуларды әдетте, ескермеуге болады. Детерминизмнің классикалық тұжырымдамасы осындай үнсіз болжамға тәуелді.<sup>8</sup>

### 2.3 Іргелі постулат

Жоғарыда атап өткеніміздей, кванттық күй  $\psi(\{q\}, t)$  комплексті функциясымен сипатталады. Мұндай формализмде динамикалық айнымалылармен қалайша жұмыс жасауға болады? Өлшеулердің мүмкін болатын нәтижелері қандай? Жаңа механика нені болжай алады?

Кванттық механикада әрбір  $f$  динамикалық айнымалысына  $\hat{f}$  *сызықтық операторы* сәйкес келеді және ол толқындық функцияларға  $\mathcal{H}$  кеңістігінде әсер етеді. Анықтамаға сәйкес сызықтық оператор келесі шартты қанағаттандырады

$$\hat{f}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{f}\psi_1 + c_2\hat{f}\psi_2,$$

мұндағы  $c_1$  және  $c_2$  – кез келген комплекстік сандар.<sup>9</sup>

Мысал ретінде бөлшектің кеңістіктегі орнын қарастырайық.  $|\psi(q)|^2$  ықтималдылық тығыздығы ретінде интерпретацияланғандықтан, енді  $\psi$  күйіндегі  $q$ -ді өлшейтін болсақ, онда оның орташа мәнін беретінін нық сенімді түрде айта аламыз:

$$\langle q \rangle_\psi = \int dq q |\psi(q)|^2 = \int dq \psi^*(q) q \psi(q)$$

ретінде анықталады. Мұны Гейзенберг принципімен үйлестіре отырып  $q$ -дың тек орташа мәнін болжай аламыз: ықтималдылық таралуынан

<sup>8</sup> Соңғы екі онжылдықтың ішінде *тіпті классикалық механиканың кейбір облыстарында* дәстүрлі абсолюттік детерминизмге маңызды соққы жасалғанын ескеру қажет. Ол үшін хаос, *көбелек эффектісі*, ауа райының ұзақ мерзімді болжамының мүмкін еместігі және т.б. сызықтық емес құбылыстардың физикасын еске түсірудің өзі жеткілікті.

<sup>9</sup> Мысалы, үш өлшемді кеңістікте қозғалатын бөлшектің толқындық функциясының түрі  $\psi(\mathbf{r}, t)$ ; келесі операторлардың  $\frac{\partial}{\partial t}$ ,  $\frac{\partial}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial}{\partial z}$ ,  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  барлығы да сызықтық сондықтан,  $\psi \rightarrow U(\mathbf{r})\psi$  болады, ал  $\hat{Q}\psi = \psi^2$  операторы сызықтық емес.

$q$ -дың орташа мәнінің нөлдік емес дисперсиясын  $\langle (q - \langle q \rangle)^2 \rangle$  табамыз. Ал оның (дисперсияның) сандық мөлшері  $p$  импульсінің аналогиялық дисперсиясымен Гейзенбергтің анықталмағандық қатынастары арқылы байланысқан болуы қажет. Енді осыны талдайық.

Кез келген координатаға тәуелді  $f(q)$  функциясына аналогиялық  $\hat{f}$  сызықтық операторын сәйкес қояйық және операторды келесі түрде анықтайық

$$\hat{q}\psi(q) = q\psi(q); \quad \hat{f}\psi(q) = f(\hat{q})\psi(q) = f(q)\psi(q);$$

оның күтілетін мәні сәйкесінше келесі өрнекпен анықталады

$$\langle \psi_n | \hat{f} | \psi_n \rangle = \int dq \psi_n^*(q) \hat{f}\psi(q).$$

Осы ережелердің одан да жалпы динамикалық айнымалыларды сипаттайтын операторлар үшін орындалатынын көреміз.

Жоғарыда айтылған орташа мәндер эксперименттік бақыланатын шамалармен қай мағынада байланысқан? Қай уақытта белгілі шаманы тектес шарттарда бірнеше рет өлшеп, нәтижесінде оның  $f_1, \dots, f_n$  шамаларын алуға болады? Анықтамаға сәйкес  $n$ -нің үлкен шегінде күтілетін (немесе орташа) шамалар  $\sum f_i / n$ -ге тең. Кванттық механикада  $f$  динамикалық айнымалы үшін тәжірибе жүзінде мүмкін болатын нәтижелері  $\hat{f}$  операторына сәйкес келетін өзіндік мәндері болып табылады:

$$\hat{f}_n \psi_n = f_n \psi_n, \quad \|\psi_n\| = 1, \quad (2.12)$$

мұндағы  $\psi_n$  функциялары  $\hat{f}$  операторының *өзіндік функциясы* немесе *өзіндік векторы* деп аталады. Осы функциялар  $f$ -тің сандық өлшемдерінің қандай да ықтималдылықпен нәтижелері  $f_n$  болатын кванттық күйлерді береді. Сәйкес келетін күйді  $f$ -тің *өзіндік күйі* деп атайды. Мұндай күйде расында дисперсия болмайды:

$$\langle \psi_n | \hat{f}^2 | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \hat{f} | \psi_n \rangle^2 = 0.$$

Еркін күйді кез келген  $\hat{f}$  операторының  $\{\psi_n\}$  өзіндік функциялары арқылы өрнектеуге болады

$$\psi(q) = \sum c_n \psi_n(q), \quad \|\psi_n\| = 1. \quad (2.13)$$

Ал  $f$  шамасын осы кванттық күйде өлшейтін болсақ, не болар еді?

### Кванттық механиканың іргелі постулаты

$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q)$  күйіндегі  $f$  шамасының өлшеу нәтижесінде  $f_n$  мәнін алудың ықтималдылығы келесі жолмен анықталатынын бекітеді

$$P_n = |c_n|^2. \quad (2.14)$$

Егер өзіндік күйлер ортогональдылығының шартын (төменде оны дәлелдейміз)

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \int dq \psi_n^* \psi_m = \delta_{nm}, \quad (2.15)$$

және  $\psi$  толқындық функциясының

$$\|\psi\| = 1$$

нормасын пайдаланып, күтудің толық ықтималдылығы үшін келесі нәтижені аламыз

$$\sum_n P_n = \sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Онда  $f$  операторының орташа мәні мынаған тең болады:

$$\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int dq \psi^*(q) \hat{f} \psi(q) = \sum_n |c_n|^2 f_n = \sum_n P_n f_n, \quad (2.16)$$

мұнда оператордың сызықтық қасиетін пайдаландық. (2.16) өрнегі  $f$  операторының орташа мәнін, өзіндік мәндердің ықтималдылығын және өзіндік мәндерін байланыстырады.

Ықтималдылық үшін (2.14) балама формуласын келтірейік:

$$P_n = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2, \quad (2.17)$$

мұнда біз  $\{\psi_n\}$  функциялары ортонормаланғандығының шартын пайдаланып, келесі өрнекті аламыз

$$\langle \psi_n | \psi \rangle = \int dq \psi_n^*(q) \psi(q) = c_n.$$

Басқа сөзбен айтатын болсақ,  $f$  өлшеулері кезінде  $f_n$  мәндерінің табылу ықтималдылығы –  $\psi$  толқындық функциясының  $\psi_n$  өзіндік функцияларына сәйкес келетін проекцияларының абсолюттік мәндерінің квадратына тең.

### 2.3.1 Проекциялық операторы және күй векторының редукциясы

Шындығында кванттық механиканың (2.14) және (2.17) негізгі постулаты айқын емес постулатымен толықтырылуы қажет: нәтижесі  $f_n$  болатын өлшеуден соң бірден жүйе келесі күйде

$$|\psi\rangle = |n\rangle$$

табылады және ол сәйкес келетін өзіндік күйлерге проекцияланады

$$|\psi\rangle \Rightarrow \mathcal{P}_n |\psi\rangle = |n\rangle \langle n | \psi \rangle = c_n |n\rangle \sim |n\rangle. \quad (2.18)$$

Мұндағы

$$\mathcal{P}_n \equiv |n\rangle \langle n|$$

келесі шарттарды қанағаттандыратын проекциялық оператор

$$\mathcal{P}_n^2 = \mathcal{P}_n, \quad \mathcal{P}_n \mathcal{P}_m = 0, \quad m \neq n.$$

Осы нақты нәтиженің ықтималдылығы (2.14) және (2.17) теңдеулерін тағы басқа пішінде, яғни проекциялық оператордың  $|\psi\rangle$  күйіндегі орташа мәні тәрізді жазуға мүмкіндік береді:

$$\boxed{\mathcal{P}_n = \langle \psi | \mathcal{P}_n | \psi \rangle.}$$

(2.18) шарты бірінші өлшеуден соң бірден қайталанған тура сол эксперимент қайта сол  $f_n$  нәтижені беретінін білдіреді. Эксперименталдық бақылаулармен дәлелдеген осы ереже расында жалпы теорияның мағынасын анықтау үшін қажет. Жүйені одан әрі зерттеу және оның дамуын тізбектей болжау үшін өлшеудің нәтижесі күйді дайындау немесе бастапқы шарт пайдаланылуы керек.

### 2.3.2 Эрмиттік операторлар

Орынды сұрақ туындайды: барлық мүмкін болатын сызықтық операторлардың қандай түрлері динамикалық айнымалыны (бақыланатын) сипаттауға үміткер бола алады? Физикада өлшеудің нәтижелері нақты сан болуы үміткер-операторлар үшін ерекше талаптарды қоятыны рас. Сондықтан  $f$  операторының барлық  $f_n$  өзіндік мәндері нақты болуы қажет, себебі олар эксперимент жүзіндегі өлшеулердің ықтималдылық нәтижелерін көрсетеді. Әрине, салдары ретінде олардың орташа мәні де нақты сан болады.

Енді  $\hat{f}^T$  операторының транспонирленуінің анықтамасын жазайық.

Ол үшін күйдің  $\psi$  векторы берілсін. Егер  $\chi \in \mathcal{H}$  функциясы үшін келесі қатынас орындалатын болса

$$\int dq(\hat{f}\phi^*)\psi = \int dq\phi^*\chi,$$

мұндағы  $\phi \in \mathcal{H}$  – кез келген функция, онда

$$\chi \equiv \hat{f}^T\psi.$$

Осы жағдайда эрмиттік түйіндес операциясы келесі түрде анықталады

$$\hat{f}^\dagger \equiv (\hat{f}^T)^* = (\hat{f}^*)^T$$

Оператор эрмиттік (немесе симметриялы) болады, егер  $\hat{f}^\dagger = \hat{f}$ . Басқаша айтқанда

$$\boxed{\langle \phi | \hat{f} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{f} \phi \rangle^* = \langle \hat{f} \phi | \psi \rangle, \quad \forall \psi, \phi \in \mathcal{D}(\hat{f})}, \quad (2.19)$$

мұндағы  $\mathcal{D}(\hat{f})$  –  $\hat{f}$  операторының анықталу облысы, яғни,  $\phi \in \mathcal{D}(\hat{f})$  егер  $\hat{f}\psi \in \mathcal{H}$ . Сонымен, динамикалық айнымалы эрмиттік операторымен сипатталады. Расында, эрмиттік операторлар үшін ((2.19) теңдеуінде  $\psi = \phi$  етіп таңдап) кез келген күйінде нақты  $\langle \hat{f} \rangle = \langle \hat{f} \rangle^*$  болатынын көреміз.  $\psi = \psi_n$  күйі үшін ерекше таңдау одан әрі  $f^* = f_n$  әрбір өзіндік мән үшін нәтижесін талап етеді. Ал  $\hat{f}$  операторы эрмиттік болуы қажетті. Енді  $\langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle^*$  қатынасы қандай да  $\psi$  функциясы үшін орындалады деп жорамалдайық. Келесі  $\psi = \chi + e^{i\alpha}\phi$  алмасуын жасайық. Онда

$$e^{i\alpha} \langle \chi | \hat{f} | \phi \rangle + e^{-i\alpha} \langle \phi | \hat{f} | \chi \rangle \in \mathbb{R}$$

өрнегінің кез келген  $\alpha$  – нақты тұрақты параметрі үшін орындалатынын көреміз. Бұдан келесі салдарды табамыз

$$\langle \phi | \hat{f} | \chi \rangle = \langle \chi | \hat{f} | \phi \rangle^*,$$

мұндағы  $\chi, \phi$  – кез келген және  $\hat{f}$  – (2.19) теңдеуімен анықталған эрмиттік операторы үшін орынды. Демек, келесі қорытынды жасауға болады: *әрбір динамикалық айнымалыға сызықтық эрмиттік оператор сәйкестендіріледі.*<sup>10</sup>

<sup>10</sup> Мысалы:  $x, y, x^2, i\partial/\partial x, i\partial/\partial t$  және т.б. операторлар эрмиттік, ал  $\partial/\partial x$  операторы эрмиттік емес

**2.1-теорема.** *Әртүрлі өзіндік мәндерге сәйкес келетін эрмиттік операторлардың өзіндік күйлері өзара ортогональды.*

**Дәлелдеме.** (2.12) теңдеуінен келесі қатынасты аламыз

$$\int dq \psi_m^* \hat{f} \psi_n = f_n \int dq \psi_m^* \psi_n. \quad (2.20)$$

Егер  $n$  және  $m$  орындарын алмастырсақ, онда аналогиялық теңдеу табылады

$$\int dq \psi_n^* \hat{f} \psi_m = f_m \int dq \psi_n^* \psi_m. \quad (2.21)$$

Енді (2.20) қатынасынан (2.21) алып тастап және  $\hat{f}$  операторының эрмиттілік қасиетін пайдаланып, табамыз:

$$(f_n - f_m) \int dq \psi_m^* \psi_n = \int dq \psi_n^* \psi_m. \quad (2.22)$$

Оған қоса біз барлық  $\{f_n\}$  нақты және  $\hat{f}^\dagger = \hat{f}$  болатынын пайдаландық. Бұдан шығады

$$\int dq \psi_m^* \psi_n = 0, \quad \text{егер } f_n \neq f_m. \quad \square$$

### 2.3.3 Операторлардың көбейтінділері, коммутаторлар және бірге бақыланатындар

Екі  $f$  және  $g$  операторларының көбейтіндісі келесі түрде анықталады <sup>11</sup>

$$fg\psi = f(g\psi).$$

Жалпы жағдайда  $fg$  және  $gf$  операторлары әртүрлі. Ал  $f$  және  $g$  операторларының коммутаторы төмендегідей анықталады:

$$[f, g] = fg - gf.$$

Егер  $[f, g] = 0$  болса, онда екі оператор коммутациялайды. Коммутаторлар Якоби тепе-теңдігін қанағаттандырады:

$$[f, [g, h]] + [g, [h, f]] + [h, [f, g]] = 0.$$

Кванттық механиканың интерпретациясы және дербес жағдайда бірге бақыланатындардың максималды жиынтығының тұжырымдамасы үшін келесі теорема маңызды рөл атқарады.

<sup>11</sup> Қарапайымдылық мақсатында операторлардың үстіндегі  $\hat{\phantom{a}}$  белгісін жиі жазбайтын боламыз.

**2.2-теорема** Егер екі  $f$  және  $g$  операторлары коммутациялайтын болса, онда  $\{\psi_n^i\}$  күйлерінің ортонормаланған жиынтығы табылады және ол келесі шарттарды қанағаттандырады:

$$f\{\psi_n^i\} = f^i\psi_n^i; \quad g\psi_n^i = g_n\psi_n^i. \quad (2.23)$$

Яғни, біруақытта  $f$  және  $g$  өзіндік күйлерін базалық күйлер ретінде таңдап алуға болады. Басқаша айтатын болсақ, онда  $f$  және  $g$  бір уақытта нақты мәндерді қабылдай алатын екі бақыланатын, яғни бірмезгілде еркін дәлдікпен өлшеуге болатын шамалардың жиынтығын аламыз.

**Дәлелдеме.** Алдымен  $g$  операторының өзіндік  $g_n$  мәндеріне сәйкес келетін өзіндік  $\psi_n$  функцияларын қарастырайық. Яғни  $g\psi_n = g_n\psi_n$ , мұндағы  $\psi_n$  – нормаланған толқындық функциялар. Оған қоса,  $f$  және  $g$  коммутациялайтын болғандықтан, келесі теңдікті дәлелдеу жеңіл

$$g(f\psi_n) = fg\psi_n = g_n f\psi_n.$$

Яғни, егер  $f\psi_n$  күйі нормаланған болса, онда өзіндік мәндері  $g_n$  болатын  $g$ -дің өзіндік күйлері де болады. Егер  $f\psi_n \propto \psi_n$  орындалса, онда дәлелдеуді аяқтаймыз және  $f\psi_n \neq \text{const} \cdot \psi_n$  ретінде жорамалдай аламыз. Ал егер  $f\psi_n = 0$  немесе  $f\psi_n \notin \mathcal{H}$  ( $f\psi_n$  функциясы нормаланбаған) болса, онда  $g$ -дің ешқандай да жаңа өзіндік мәндерін таба алмаймыз. Алайда, жалпы берілген  $g_n$  өзіндік мәндеріне сәйкес келетін  $g$ -дің өзіндік күйлерінің субкеңістігіндегі саны шектеулі болады:<sup>12</sup>

$$g\psi_n^i = g_n\psi_n^i, \quad i = 1, 2, \dots, s.$$

Осы субкеңістікте  $g$  тривиалдық бірлік оператор ретінде, ал  $f$  келесі түрде өсер етеді

$$f\psi_n^i = F_{ij}\psi_n^j.$$

$f$  операторы эрмиттік болғандықтан, келесі теңдікті ( $n$  индексін жазбаймыз) аламыз

$$F_{ij} = \int dq \psi^{j*} f \psi^i = \int dq (f^* \psi^{j*}) \psi^i = \left( \int dq \psi^{i*} f \psi^j \right)^* = F_{ji}^*,$$

яғни  $F_{ij}$  – эрмиттік матрица. Кез келген эрмиттік матрица унитарлық

<sup>12</sup> Шексіз сәтінген деңгейлері бар жүйелер кездеседі (мысалы Ландау деңгейлері – сыртқы магнит өрісінде қозғалатын электронның деңгейлері, мұнда электрон қозғалысының бағыты мен магнит өрісі бір-біріне перпендикуляр (14.3-бөлімін қараңыз)). Қарапайымдылық мақсатында сәтінудің шекті дәрежелі жағдайларын ғана қарастырамыз.

түрлендірудің көмегімен диагональдық түрге келтіріледі

$$\psi^i = U_{ij}\phi^j, \quad \phi^i = (U^{-1})_{ij}\psi^j = U_{ij}^+\psi^j, \quad U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1},$$

$$U^\dagger F U = \tilde{F} = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & \dots \\ 0 & f_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}.$$

Жаңа базада  $f$  операторы келесі түрде әсер етеді

$$f\phi^i = f(U^\dagger\psi)_i = U^\dagger F U \phi = f_i \phi_i, \quad (2.24)$$

мұндағы  $\phi^i - f_i$  -дің өзіндік мәндеріне сәйкес келетін  $f$  өзіндік күйлері. Осы жағдайда  $G_{ij}$  бірлік матрицаға пропорционал болса, онда ол кез келген унитарлық түрлендіруге инвариантты:  $\phi_n^i$  функциялары біруақытта  $f$  және  $g$  операторларының өзіндік күйлері болып табылады. Қысқасын айтқанда, біз  $g$  операторының сегінеген өзіндік күйлерінің субкеңістігінде  $f$  операторының өзіндік матрицасын *диагональдық* түріне келтірдік, немесе керісінше.  $\square$

Осы пайымдауларымызды өзара коммутациялайтын операторлардың кез келген санына жалпылауға болады. Алдымен айнымалыдан бастап, артынша бірге бақыланатындардың (яғни өзара коммутациялайтын  $\hat{f}^I$  операторлардың максималдық жиынтығымен сипатталғандықтан) максималдық жиынтығы анықталады. Осы операторлардың өзіндік мәндері біруақытта еркін дәлдікпен өлшенетін шамалары болып табылады. Яғни, барлық  $f^I$  динамикалық айнымалылар белгіленген мәндерді қабылдайтын кванттық күйі бар. Ерекше атап өтетін мәселе, осы жүйеде бақыланатындардың максималдық жиынтығының таңдауы жалғыз емес. Біруақытта бақыланатын өзіндік мәндердің жиыны  $\hat{f}_i^T$  (көп жағдайларда жай ғана «кванттық сандар» деп аталады) кванттық күүді толығымен анықтайды.

Және керісінше, Гейзенбергтің анықталмағандық қатынастары коммутацияламайтын операторлардың жұбына, мысалы, екі канондық түйіндес айнымалылар үшін қатысты. Екі коммутацияламайтын айнымалылардың біруақыттағы мәндерін анықтау мүмкін емес, сондықтан ондай кванттық күйлер болмайды. Техникалық немесе эксперименттік мүмкіндіктерге тәуелсіз ондай күйлерді «дайындау» мүмкіндігі жоқ.

### 2.3.4 Координата және импульс операторлары, іргелі коммутатор және Гейзенберг қатынасы

Координата операторының толқындық функцияға әсері төмендегідей болады

$$\hat{q}\psi(q,t) = q\psi(q,t),$$

яғни жай ғана көбейтуге тең. Ал импульс операторы дифференциалдық болып табылады

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}}. \quad (2.25)$$

Үшөлшемді кеңістікте қозғалатын бөлшек үшін оның түрі:

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$$

болады және ол толқындық функцияға әсер етеді.

Бұл кванттық механиканың іргелі ережелері декарттық координаталар жүйесіндегі айнымалылары үшін орынды. Мұның терең мағынасы болуы мүмкін, бірақ бұл – эмпирикалық факт.<sup>13</sup>

Канондық түйіндес айнымалылар коммутациялық қатынастарды қанағаттандырады:

$$\boxed{[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}}, \quad (2.26)$$

әдетте, мұны *канондық коммутациялық қатынастар* деп атайды. Үшөлшемді кеңістіктегі бөлшек үшін коммутациялық қатынастардың түрі төмендегідей болады:

$$[x_i, p_i] = i\hbar \delta_{ij}.$$

Координата және импульс операторларының құраушылары өзара коммутациялайды:  $[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0$ .

(2.25) анықтамасын де Бройль гипотезасының жүзеге асуы ретінде интерпретациялауға болады. Осы гипотезаға сай импульсі  $p$  әрбір бөлшекке ұзындығы  $h/p$  болатын толқын сәйкес келеді, мұндағы  $h$  – Планк тұрақтысы. Ұзындығы бекітілген толқын – жазық толқын болады:

$$\psi_p(x) = e^{i2\pi x/\lambda} = e^{ipx/\hbar},$$

<sup>13</sup> Қисықсыздықты координаталар жүйелеріндегі кванттаудың ережесін 7.8-бөлімінде талқылаймыз.

ал (2.25) операторы оған анықталған (сандық)  $p$  мәнін береді. Жалпыланған функцияны Фурье түрлендіруі арқылы

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{2\pi} c(p) e^{ipx/\hbar}$$

немесе жазық толқындардың сызықтық комбинациясы түрінде жазылады. Ендеше (2.25) әсерін, оның сызықтық екендігін пайдаланып, өрине, импульс операторы ретінде интерпретациялауға болады.

Импульс операторын (2.25) түрінде таңдауымыздың абстрактылық уәждемесі кванттық күйлер үшін трансляция эффектілерін зерттегенде көрсетіледі. Ал импульс операторының (2.25) түрі көптеген мағыналарда кем дегенде қанағаттандыратынын көрдік және әлі талай көз жеткіземіз.

Импульс операторы  $\hat{p}$  – эрмиттік. Расында, келесі өрнекті

$$\int d^3x \varphi^*(\mathbf{x}) \left[ \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{x}) \right] = \int d^3x \left[ \frac{\hbar}{i} \nabla \varphi(\mathbf{x}) \right]^* \psi(\mathbf{x})$$

бөлектеп интегралдау арқылы жеңіл тексеруге болады.<sup>14</sup>

### 2.3.5 Гейзенбергтің қатынастары

Координата және импульс операторлары анықталмағандық қатынастарымен байланысқанын (2.2-бөлімді қараңыз) көрдік. Енді кванттық механика ережелерінің көмегімен олардың қатал дәлелдемесін көрсетейік. Кез келген эрмиттік коммутацияламайтын  $Q$  және  $P$  операторлары жұбы үшін

$$[Q, P] = i\hbar$$

шартын қанағаттандыратын болса, онда (2.27) анықталмағандық теңсіздігі орындалатынын дәлелдейік.

Ол үшін  $Q$  немесе  $P$  анықталмағандықтарын дисперсия арқылы өрнектейік:

$$\Delta Q \equiv \sqrt{\langle (Q - Q_0)^2 \rangle}, \quad \Delta P \equiv \sqrt{\langle (P - P_0)^2 \rangle},$$

мұндағы

$$Q_0 = \langle Q \rangle = \langle \psi | Q | \psi \rangle, \quad P_0 = \langle P \rangle = \langle \psi | P | \psi \rangle$$

$\psi$  күйіндегі олардың орташа мәндері. Қосалқы операторды анықтайық:

<sup>14</sup> Нормаланатын функциялар дегеніміз  $\mathbb{R}^3$  кеңістігіндегі интегралданатын функциялар және олар шексіздікте нөлге айналады.

$$A = Q - Q_0 + i\alpha (P - P_0),$$

мұндағы  $\alpha$  – еркін нақты параметр. Енді кез келген оператор мен күй үшін  $\langle \psi | A A | \psi \rangle \geq 0$  орынды екенін ескеріп, келесі теңсіздікті аламыз:

$$\langle (Q - Q_0)^2 \rangle - \alpha \hbar + \alpha^2 \langle (P - P_0)^2 \rangle \geq 0.$$

Бұл кез келге  $\alpha$  үшін орынды. Квадраттық пішіні жартылай оң, ал оның дискриминанты жартылай теріс:

$$\hbar^2 - 4 (\Delta Q)^2 \cdot (\Delta P)^2 \leq 0;$$

Осылайша келесі теңсіздікті табамыз

$$\boxed{\Delta Q \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}}. \quad (2.27)$$

## 2.4 Шредингер теңдеуі

Суперпозиция принципiнiң пайымдауынша кванттық жүйелердiң уақыт бойынша дамуын сызықтық теңдеуiмен өрнектеуге болады. Кванттық механиканың негiзгi теңдеуi – Шредингер теңдеуi болып табылады:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}; t) \psi(q, t)}. \quad (2.28)$$

$H$  операторы гамильтониан деп аталады. (2.28) теңдеуi классикалық механикадағы Ньютон теңдеуiн алмастырады.

$H$  – классикалық гамильтонианға сәйкес келетiн эрмиттік кванттық оператор, ол жүйенiң энергиясын көрсетедi. Осы кiтапта қарастырылған жағдайлардың көпшiлiгiнде қарапайым қатынас орын алған:

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}; t) = H(q, p; t) \Big|_{q \rightarrow \hat{q} = q; p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}}, \quad (2.29)$$

мұндағы  $H(q, p; t)$  – классикалық гамильтониан. Бұл ереже декарт координаттарындағы айнымалылар үшін орынды. Жалпыланған қисықсызықты координаталардағы квантталу *7.8-бөлімінде қарастырылған.*

Импульс операторы кеңістік трансляцияларының генераторы ретінде әсер ететін болса, ал гамильтониан (энергия операторы) уақыт бойынша

ығысуына өкеледі:<sup>15</sup>

$$\boxed{H \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t_i}; \quad p_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}.} \quad (2.30)$$

**Жазық толқындар:** кванттық механиканың осы ережелері үшін эвристикалық уәждемесін келтірейік. Жазық толқынды қарастырайық:

$$\psi_0 = \text{const} \cdot e^{-i(\omega t - kx)},$$

мұны поляризациясы берілген монохроматтық жарық көзі деп қарастыруға болады. Енді  $\psi_0$  функциясына  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$  операторы әсер етсін, онда келесі нәтижені аламыз:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0 = \hbar\omega\psi_0 = h\nu\psi_0 \quad (\omega = 2\pi\nu),$$

яғни тікелей фотонның энергиясы, одан келесі қатынасты табамыз:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0 = E\psi_0.$$

Екінші жағынан, де Бройльдің қатынасына сәйкес  $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$ , ал  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  операторының әсерінен келесі нәтиже шығады:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_0 = p\psi_0,$$

бұдан расында импульске сәйкес келетін операторды көреміз. Оған қоса энергияның өзіндік мәні  $E = h\nu$  және импульстің өзіндік мәні  $p = \frac{\hbar}{\lambda}$  келесі  $E = pc$  қатынасын қанағаттандырады. Өз кезегінде мұның еркін массасы жоқ бөлшектер (фотондар) үшін энергия мен импульстің релятивистік дұрыс қатынасы екенін көреміз. Вакуумдағы Максвелл теңдеуін (өлшемдік түрлендіру ескерілген векторлық потенциал үшін)

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \psi = 0$$

релятивистік Шредингер теңдеуі ретінде интерпретациялауға болады.

---

<sup>15</sup> Осы ережені  $p_\mu \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial x^\mu}$  төрт-вектор түрінде жазуға болады. Шындығында, кванттық механиканың арнайы салыстырмалық теориясы жөнінде «білетіндігі» тіпті жақсы! Осы факт релятивистік кванттық механика мен релятивистік кванттық өріс теориясының табысты құрылуының негізінде жатыр. Әрине, іргелі әсерлесулердің өте табысты стандарттық моделі болып электроөлсіз әсерлесулер үшін Глэшоу-Вайнберг-Салам теориясы және күшті әсерлесулер үшін кванттық хромодинамика саналады.

### 2.4.1 Шредингер теңдеуі жөнінде толығырақ

Енді гамильтонианы уақытқа тәуелсіз жүйені қарастырайық:

$$H = H(\hat{q}, \hat{p}).$$

Энергияның өзіндік мәндерінің теңдеуі келесідей болады:

$$H\psi_n = E_n\psi_n. \quad (2.31)$$

(2.31) теңдеуі *уақытқа тәуелсіз Шредингер теңдеуі* деп аталады және оның уақыт бойынша дамуын сипаттайтын *Шредингер теңдеуінен* (2.28) айырмашылығы бар. Әлбетте, мұндай жүйелерде  $E_n$  энергияның өзіндік мәндері тұрақты. Осы бекімнің дұрыс екендігін дәлелдейік:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle H \rangle_{\psi_n} &= \frac{d}{dt} E_n = \frac{d}{dt} \int dq \psi_n^* E_n \psi_n = \\ &= \frac{d}{dt} \int dq \psi_n^* H \psi_n = \frac{1}{i\hbar} \int dq \psi_n^* [H, H] \psi_n = 0. \end{aligned}$$

Аналогиялық талдаулардың арқасында гамильтонианмен коммутациялайтын кез келген (уақытқа тәуелсіз)  $F$  операторының орташа мәні кез келген күйде тұрақты болатынын дәлелдеуге болады:

$$\frac{d}{dt} \langle f \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [f, H] \rangle = 0.$$

Әдетте стационарлық күйлердің, яғни энергияның өзіндік мәндерінің уақытқа тәуелділігін есептеу өте жеңіл. Шредингер теңдеуін интегралдап

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n = H\psi_n(t) = E_n\psi_n(t),$$

табамыз

$$\psi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(0).$$

Еркін (станционарлық болуы міндетті емес) күй  $|\psi(t)\rangle$  үшін Шредингер теңдеуінің шешімі келесі өрнекпен беріледі:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle.$$

$U(t) = e^{-iHt/\hbar}$  операторы күй векторының уақыт бойынша дамуын өрнектейді. Алайда, бұл Шредингер теңдеуінің формальдық шешімі болатынын атап өтеміз: бұл тек символикалық формула, ал жалпы жағдайда  $e^{-iHt/\hbar}$  даму операторы аса күрделі болуы мүмкін (жай ғана фаза емес!).

Бірақ, бастапқы толқындық функция энергиясының өзіндік күйлері

бойынша жіктеуі белгілі болса:

$$\psi(0) = \sum_n a_n \psi_n, \quad a_n = \langle \psi_n | \psi(0) \rangle,$$

онда шешімін айқын түрінде жазуға болады:

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar} \sum_n a_n \psi_n = \sum_n a_n e^{-iHt/\hbar} \psi_n(0).$$

Жалпы жағдайда жүйенің даму үдерісінің барысында әртүрлі бақыланатындардың орташа мәндерінің уақыт бойынша өзгерістерінің орнектері төмендегідей болады:

$$\langle O \rangle_\psi \equiv \langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \int dq \psi^*(t) O \psi(t).$$

Расында,<sup>16</sup>

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle_\psi = \langle \psi | \left( \frac{\partial}{\partial t} O + \frac{1}{i\hbar} [O, H] \right) | \psi \rangle. \quad (2.32)$$

Келесі шартты қанағаттандыратын бақыланатын шама

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle_\psi = 0 \quad (2.33)$$

кез келген күй үшін сақталады. Уақытқа тәуелсіз  $\left( \frac{\partial O}{\partial t} = 0 \right)$  және сақталатын оператор міндетті түрде гамильтонианмен коммутациялайды.

Уақытқа тәуелсіз бақыланатындар, тіпті олар сақталмайтын болса да әрқашан мына теңдікті қанағаттандыратынын атап өтейік:

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle_{\psi_n} = 0,$$

мұндағы  $\psi_n$  – стационарлық күйлер.

## 2.4.2 Гейзенберг көрінісі

Кванттық механикадағы уақыт бойынша дамудың сипатталуы классикалықпен тығыз байланысы болуы да мүмкін, себебі классикалық физикада күйлердің емес, динамикалық шамалардың эволюциясымен түсіндіріледі. Динамикалық шамалар өзіне түйіндес операторлармен сипатталады (7.3.1-бөлімін қараңыз) және олардың матрицалық

<sup>16</sup> (2.32) теңдеуі мен классикалық механиканың  $\frac{dO}{dt}$  теңдеуі арасындағы Пуассон жақшаларының терминдеріндегі  $\frac{dO}{dt} = \frac{\partial O}{\partial t} + \{O, H\}$  ұқсастығын атап өтеміз.

элементтері арқылы анықталады. Уақыттың кез келген  $t$  моментіндегі  $A$  динамикалық шаманың матрицалық элементтері келесі өрнекпен беріледі:

$$\langle \varphi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \varphi(0) | e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} | \psi(0) \rangle.$$

Бұл жүйе эволюциясын сипаттаудың баламалық варианты: күйлер уақыт бойынша бекітіліп, ал динамикалық шамалар уақыт бойынша өзгереді:

$$A_H(t) = e^{iHt/\hbar} A(0) e^{-iHt/\hbar}. \quad (2.34)$$

Мұндай сипаттауды *Гейзенберг көрінісі* деп атайды және тереңдетіп 7.5-бөлімінде қарастырамыз. Ал қазір (2.34) анықтамасынан келесі теңдеуді алатынымызды ескертейік:

$$i\hbar \frac{dA_H}{dt} = i\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t} + [A_H, H], \quad (2.35)$$

мұнда  $t$  бойынша мүмкін болатын параметрлік тәуелділік ((2.35) теңдеуіндегі дербес туынды) қосылып отыр. Әрбір қосынды мағынасының айырмашылығы болса дағы, (2.32) теңдеуімен ұқсастығы айқын.

Шредингер және Гейзенберг көріністері  $t=0$  моментінде бірдей болады. Уақытқа  $t$  айқын тәуелді бақыланатындарды Шредингер көрінісіндегі  $A_s(t)$  операторы деп түсіну қажет. Мысалы,  $qt^2$ . Осы жағдайда (2.34) қатынасын келесі түрде жазуға болады:

$$A_H(t) = e^{iHt/\hbar} A_s(t) e^{-iHt/\hbar},$$

ал оның туындысының түрі (2.35) болатынын жеңіл тексеруге болады.

## 2.5 Үздіксіз спектр

Осы уақытқа дейін жеңіл болу үшін өзіндік мәндерді дискретті деп қабылдап келдік. Кейбір операторлардың (мысалы, байланыспаған электрон координатасының және энергиясының операторлары және т.б.) өзіндік мәндері үздіксіз спектр болады. Тақырыптың осы бағыты толығырақ 7.3-бөлімінде көрсетілген. Әрі қарай одан жалпы болатын жағдайларды талдайық. Өзіндік функциялар мен өзіндік мәндер үшін теңдеудің түрін жазайық:

$$\hat{f}\psi_f(q) = f\psi_f(q),$$

Мұнда  $f$  – үздіксіз мәндер тізбегін қабылдайды. Кез келген еркін функцияны өзіндік функциялардың базисі бойынша жіктеуге болады:

$$\psi(q) = \int df c(f) \psi_f(q) \quad (2.36)$$

((2.13) қараңыз). Кванттық механиканың (2.14) негізгі постулатын жалпыландырып, келесі бекінімді қабылдайық; осы бекінімде  $f$  және  $f + df$  аралығында нәтиже табылуының ықтималдылығы мынаған тең:

$$dP = |c(f)|^2 df. \quad (2.37)$$

Толық ықтималдылық бірге тең болады, сондықтан келесі шартты талап етейік:

$$\int df |c(f)|^2 = 1,$$

өз кезегінде  $\psi(q)$  нормалау шарты мынадай болады:

$$\int dq \psi(q)^* \psi(q) = 1.$$

Үздіксіз спектрі үшін ортонормалдылық қатынасының өзіндік ерекшелігі болады. Алдындағы (2.22) нормалау тәсіліне сүйеніп, табамыз:

$$(f - f') \langle f' | f \rangle = (f - f') \int dq \psi_{f'}(q)^* \psi_f(q) = 0.$$

Сондықтан

$$\langle f' | f \rangle = 0, \quad f' \neq f \text{ үшін.}$$

Енді  $\langle f' | f \rangle$  интегралының мәнін  $f'$ -тің функциясы ретінде қарастырып, оның ерекше қасиеті болуы керектігі жөнінде қорытындыға келеміз:  $f' = f$  жағдайынан басқа кезде ол нөлге тең болады. Алайда, егер  $\langle f' | f \rangle$  шекті сан болса, онда келесі қорытынды жасауымыз қажет:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int df \int df' c(f)^* c(f') \langle f' | f \rangle = \int df |c(f)|^2 \int df' \langle f' | f \rangle = 0.$$

Бірақ мұның мағынасы жоқ. Сондықтан  $\langle f | f \rangle = \infty$  талабын орнату қажет, сонда

$$\int df' \langle f' | f \rangle = 1.$$

Осылайша ыңғайлы нормалауды таңдап алдық.

### 2.5.1 Дельта-функция

Алғашқы рет Дирак енгізген  $\delta(x)$  функциясы кейбір ерекше қасиеттеріне байланысты «жалпыланған функция» немесе «таралу функциясы» деп аталды. Дельта-функциясының анықтамасына сәйкес

$$\delta(x) = 0; \quad x \neq 0 \quad \text{үшін және} \quad \delta(0) = \infty;$$

оған қоса

$$\int_a^b dx \delta(x) g(x) = \begin{cases} g(0), & \text{егер } a < 0 < b; \\ 0, & \text{кері жағдайда} \end{cases}$$

Мұндағы  $g(x)$  — ( $x=0$  нүктесінде) үздіксіз кез келген функция. Анықтамадан табамыз:

$$\int_a^b dx \delta(x-c) g(x) = \begin{cases} g(c), & \text{егер } a < c < b; \\ 0, & \text{кері жағдайда} \end{cases}$$

Ең жиі кездесетін пайдалы қасиеттерін келтірейік:

$$\delta(-x) = \delta(x); \quad \delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x);$$

$$g(x) \delta(x-y) = g(y) \delta(x-y); \quad x \delta(x) = 0;$$

$$\frac{d}{dx} \theta(x) = \delta(x) \quad \theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{егер } x \geq 0; \\ 0, & \text{егер } x < 0; \end{cases}$$

$$\delta(g(x)) = \sum_{i=1}^r \frac{1}{|g'(x_i)|} \delta(x - x_i) \quad g(x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, r. \quad (2.38)$$

Дельта-функция өз аргументінің жұп функциясы болғандықтан

$$\int_0^{\infty} dx \delta(x) g(x) = \frac{1}{2} g(0).$$

Дельта-функцияны кейбір стандарттық функциялардың шегі ретінде анықтауға болады. Енді бірнеше мысал келтірейік (мұнда шек интегралда шекарасынан артатынын ескеру керек):

$$\delta(x) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\epsilon}} e^{-x^2/\epsilon^2}; \quad \delta(x) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin(Lx)}{\pi x} \quad (2.39)$$

$$\delta(x) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(Lx)}{\pi Lx^2}; \quad \delta(x) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + x^2} \quad (2.40)$$

$$\frac{1}{x - i\epsilon} = \frac{\mathcal{P}}{x} + \pi i \delta(x),$$

мұндағы  $\mathcal{P}$  – Кошидің басты мәні. Соңғы формулада шекті  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+}$  мағынасында түсіну қажет.

(2.39) теңдеуінің екіншісін дәлелдейік. Ол үшін  $a < 0 < b$  деп қабылдайық, онда

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_a^b dx \frac{\sin(Lx)}{\pi x} f(x) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \left[ f(0) \int_a^b dx \frac{\sin(Lx)}{\pi x} + O\left(\frac{1}{L}\right) \right] = \\ &= \frac{f(0)}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\sin z}{z} = f(0). \end{aligned}$$

Соңғы интеграл комплекстік жазықтықта интегралдау әдісімен есептелді. (2.40) теңдеулерінің біріншісі де аналогиялық жолмен дәлелденеді.

Дельта-функция көрінісі үшін келесі формула өте пайдалы

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(k-k')} = 2\pi \delta(k - k'), \quad (2.41)$$

ал оның үшөлшемді түрі:

$$\boxed{\int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \quad (2.42)$$

Оларға (2.39) теңдіктерінің екіншісін қолдана отырып, оңай дәлелденеді. Ал (2.41) теңдеуінің маңызды қолданылуы ретінде Фурье түрлендіруінің кері формуласын дәлелдеу болып табылады. Егер

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \tilde{F}(k)$$

болса, онда  $F(x)$ -тан  $\tilde{F}(k)$ -ке Фурье-түрлендіруін келесі түрінде жазамыз:

$$\tilde{F}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} F(x).$$

Мұны (2.41) теңдеуінің көмегімен дәлелдеуге болады.

### 2.5.2 Ортогональдылық

Үздіксіз өзіндік мөндер жағдайында ортогональдылық шартының түрін жазайық:

$$\int dq \psi_f^*(q) \psi_{f'}(q) = \delta(f - f'). \quad (2.43)$$

((2.15)-пен салыстырыңыз). Ал (2.36) теңдеуіндегі  $c(f)$  жіктелу коэффициенттері дискреттік спектрдегі тәрізді толқындық функцияны өзіндік күйлердің біріне проекциялау арқылы табылады:

$$c(f) = \int df \psi_f(q)^* \psi(q). \quad (2.44)$$

Мұны (2.43) өрнегін пайдаланып, тікелей тексеруге болады.

### 2.5.3 Координата және импульс операторларының өзіндік күйлері; импульс проекциясының операторы ығысу операторы ретінде

Координаталардың өзіндік күйлерінің өрнегін жазайық:

$$\psi_{\mathbf{r}_0}(x) = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0),$$

ол  $\mathbf{r}_0$  нүктесінде орналасқан бөлшекті сипаттайды. Дельта-функцияның қасиетін пайдаланып, оны қайта жазайық  $x \psi_{\mathbf{r}_0}(x) = x_0 \psi_{\mathbf{r}_0}(x)$ . Әрине, осындай күйлердің ансамблі ортонормаланғандық және толықтық шарттарын қанағаттандыратыны анық.

Импульс операторының өзіндік күйлері

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

келесі түрде жазылады:

$$\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}}{\hbar}}, \quad (2.45)$$

мұндағы  $\mathbf{p}_0$  —  $\psi_{\mathbf{p}_0}$  өзіндік функция теңдеуін қанағаттандыратын өзіндік мән (яғни, сандық вектор)

$$\hat{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}_0} = \mathbf{p}_0 \psi_{\mathbf{p}_0}.$$

Жалпы, импульстің өзіндік мөндері үздіксіз; демек ортонормаланғандық шарты келесі түрінде жазылады:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

(оның нормалануы ыңғайлы), ал күйлердің толықтылығы келесі түрде өрнектеледі:

$$\int d\mathbf{p} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.46)$$

Классикалық механикадан белгілі, импульс шамасы кеңістік ығысулары үшін канондық түрлендірулердің генераторы тәрізді әсер етеді. Ал кванттық механикада импульс операторы кеңістік трансляциясының операторы болып табылады. Расында, кез келген  $H$  операторы үшін келесі қатынастың орын алатынын дәлелдеу қиын емес

$$H(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{p}) = e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0 / \hbar} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0 / \hbar}. \quad (2.47)$$

**Дәлелдеме.** (2.47) дәлелдеу үшін келесі бірөлшемді есепті қарастырған жеткілікті. Осы мақсатта  $G(x, \alpha)$  функциясын  $\alpha = 0$  нүктесінің айналасында Тейлор қатарына жіктеуді пайдаланамыз:

$$G(x, \alpha) \equiv e^{\frac{i p \alpha}{\hbar}} F(x) e^{-\frac{i p \alpha}{\hbar}}; \quad p \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}.$$

Әлбетте,  $G(x, 0) = F(x)$ . Ал  $\alpha$  параметрі бойынша бірінші туындысы мынаған тең:

$$\frac{d}{d\alpha} G(x, \alpha) \Big|_{\alpha=0} = e^{\frac{i p \alpha}{\hbar}} \left[ \frac{i p}{\hbar}, F(x) \right] e^{-\frac{i p \alpha}{\hbar}} \Big|_{\alpha=0} = F'(x),$$

мұнда біз келесі коммутациялық қатынасты пайдаландық

$$\left[ \frac{i p}{\hbar}, F(x) \right] = \left[ \frac{d}{dx}, F(x) \right] = \frac{d}{dx} \cdot F(x) - F(x) \frac{d}{dx} = F'(x)$$

Сол сияқты

$$\frac{d^2}{d\alpha^2} G(x, \alpha) \Big|_{\alpha=0} = F''(x),$$

осылайша жалғастырып, табатынымыз:

$$G(x, \alpha) = \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{d\alpha^n} G(x, \alpha) \Big|_{\alpha=0} = \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} \frac{d^n}{dx^n} F(x) = F(x + \alpha).$$

Кеңістік трансляциясына инвариантты болатын (2.47) гамильтонианын пайдаланып, одан келесі өрнектерді аламыз:

$$H(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{p}) = H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0/\hbar} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0/\hbar}.$$

Теңдіктің оң жағын қатарға жіктеп,  $\mathbf{r}_0$  бойынша бірінші ретті өрнегі үшін

$$[p_i, H] = 0$$

болатынын көреміз. Яғни, егер жүйе кеңістік трансляциясы үшін инвариантты болса, онда импульс операторы гамильтонианмен коммутациялайды, және керісінше. Бұл – сақталатын оператор ((2.33) теңдігі). Сонымен, классикалық механикадан белгілі нәтижені жалпылаудың қажеттігіне көзімізді жеткіздік.

Қорытындылайтын болсақ, өзіндік күйлердің орны (немесе координатасы) мен импульсі Гейзенбергтің анықталмағандық қатынастарымен сәйкестендіріліп табылды. Шындығында,  $\psi_{\mathbf{p}_0}$  күйінде ((2.45) өрнегі) импульс нақты анықталған, алайда, бөлшектің координаталары анықталмаған, себебі  $|\psi_{\mathbf{p}_0}|^2 = \text{const}$ . Және керісінше,  $\psi_{\mathbf{r}}(x) = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$  өзіндік күйінде бөлшектің орны нақты белгілі, бірақ көлем ішіндегі импульстің таралуынан

$$\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)/\hbar} a(\mathbf{p}); \quad a(\mathbf{p}) = 1 :$$

импульс жөнінде ешқандай ақпарат жоқ.

## 2.6 Толықтылық

Енді (2.44) өрнегін (2.36) теңдігіне қайта апарып қоятын болсақ, онда

$$\psi(q) = \int dq' \psi(q') \left[ \int df \psi_f^*(q') \psi_f(q) \right].$$

Сонымен қатар логикаға сәйкес өзіндік функциялар нормаланған болуы қажет:

$$\int df \psi_f(q) \psi_f^*(q') = \delta(q - q'). \quad (2.48)$$

Осы қатынастың оң бөлігі шартты түрде жазылғандығына көңіл аударыңыздар: үшөлшемді кеңістіктегі бөлшек үшін ол үшөлшемді дельта-функциямен алмастырылуы қажет:

$$\delta(q - q') \rightarrow \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z').$$

(2.48) теңдеуі *толықтылық шарты* деп аталады және оның келесі салдарын жазуға болады: кез келген  $\psi$  күйі  $\{\psi_f\}$  өзіндік күйлерінің

сызықтық комбинациясымен өрнектеледі. Басқаша айтатын болсақ,  $\{\psi_f\}$  өзіндік функциялары толық жиынтықты құрайды. Егер оператордың дискреттік те, үздіксіз де спектрлері болған жағдайда, онда тек  $\{\psi_n, \psi_f\}$  өзіндік функцияларының қосындысы толық жиынтықты құрайды, ал толықтылық қатынасы келесі түрде жазылады:

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q) + \int df c(f) \psi_f(q)$$

немесе

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle + \int df |f\rangle \langle f|\psi\rangle$$

кез келген  $|\psi\rangle$  үшін. Бұл белгілі *Парсеваль өрнегі*. Оны жиі символдық түрде келесідей жазады:

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \sum_n \mathcal{P}_n = \mathbf{1},$$

мұндағы  $\mathcal{P}_n = |n\rangle \langle n|$  өзіндік күйіне проекциялау операторы.

Толықтылық шарты кванттық механика логикасының ажыратылмайтын бөлігі болып табылады. Ал  $\hat{f}$  эрмиттік операторына сәйкес келетін кез келген  $f$  айнымалысына спектрлік жіктеу жасауға болады:

$$\hat{f} = \sum_n \hat{f} |n\rangle \langle n| = \sum_n f_n \mathcal{P}_n.$$

Кез келген күйдегі (толықтылық)  $f$  үшін жүргізілген өлшеу

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle,$$

оның өзіндік мәндерінің бірін келесі ықтималдылықпен береді

$$P_n = |c_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2 = \langle \mathcal{P}_n \rangle_\psi,$$

ал жүйе проекциялық күйінде қала береді

$$\mathcal{P}_n |\psi\rangle = c_n |n\rangle \sim |n\rangle \dots$$

Өртүрлі нәтижелердің толық ықтималдылығы толықтылық өрнегіне сәйкес төмендегіге тең болады:

$$\sum_n P_n = \sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \|\psi\|^2 = 1.$$

### Тараудың қорытындысы

- Кванттау ережесі:

$$H \rightarrow \hat{H}(\{\hat{q}_i\}, \{\hat{p}_i\}; t) = H(\{q_i\}, \{p_i\}; t) \Big|_{q_i \rightarrow \hat{q}_i = q_i; p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}};$$

$$p_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

- Ауытқымаған кванттық жүйенің уақыт бойынша дамуы Шредингер теңдеуімен өрнектеледі:  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi$ .
- Экспериментте  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$  күйіндегі (мұндағы  $\psi_n$  –  $\hat{f}$  эрмиттік операторының сәйкес келетін  $n$ -ші өзіндік күйі)  $\hat{f}$  бақыланатын шама оператордың өзіндік күйлерінің бірі болады, ал оның ықтималдылығы келесі формуламен анықталады:

$$P_n = |c_n|^2 = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2.$$

Оған қоса жүйе ( $\mathcal{P}_n = |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ ) проекциялық күйде болады:

$$\mathcal{P}_n |\psi\rangle = c_n |\psi_n\rangle \sim |\psi_n\rangle.$$

### Есептер

(2.1) (а) Келесі теңдіктерді дәлелдеңіздер:

$$\begin{aligned} (f^\dagger)^\dagger &= f; & (fg)^\dagger &= g^\dagger f^\dagger; \\ [f, gh] &= g[f, h] + [f, g]h, \\ [fg, h] &= f[g, h] + [f, h]g. \end{aligned}$$

(ә) Егер  $f$  және  $g$  эрмиттік операторлары болса, онда  $fg + gf$  және  $i[f, g]$  операторларын табыңыздар.

(б) Дельта-функцияның (2.38) қасиеттерін тексеріңіздер.

(в) Сфералық координаталар жүйесінде үшөлшемді дельта-функцияның түрі төмендегідей болатынын тексеріңіздер:

$$\delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{1}{r^2} \delta(r - r_0) \delta(\cos\theta - \cos\theta_0) \delta(\phi - \phi_0)$$

(г) Кез келген  $A$  операторы үшін кез келген күйдегі  $AA^\dagger$

операторының орташа мәні оң болатынын көрсетіңіздер:

$$\langle AA^\dagger \rangle \geq 0 .$$

(д) Егер  $[A, B] = c$  болса, мұндағы  $c$  – сан, онда келесі өрнектің орынды болатынын көрсетіңіздер:

$$e^{\zeta A} B e^{-\zeta A} = B + c\zeta .$$

(2.2) Екі күйі болатын жүйенің гамильтонианы:

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -\eta \\ -\eta & E_0 \end{pmatrix} .$$

(а)  $\eta$  комплексті сан бола ала ма?

(ә)  $H$  өзіндік мәндерін табыңыздар;

(б) Уақыттың  $t=0$  моментінде жүйе келесі күйде болады:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{|1\rangle + i|2\rangle}{\sqrt{2}}$$

Ендеше  $|1\rangle$  немесе  $|2\rangle$  күйлерінде табылатын жүйенің  $t$  уақыт моментіндегі  $P_1(t)$  немесе  $P_2(t)$  ықтималдылықтарын анықтаңыздар.  $P_1(t)$  және  $P_2(t)$  графиктерін  $t$ -ның функциясы ретінде салыңыздар.

(2.3) Екі деңгейлі жүйенің (кубит) гамильтонианы берілген

$$H = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Екі  $A$  және  $B$  операторларына сәйкес келетін екі айнымалылардың өлшеулерін қарастырыңыздар:

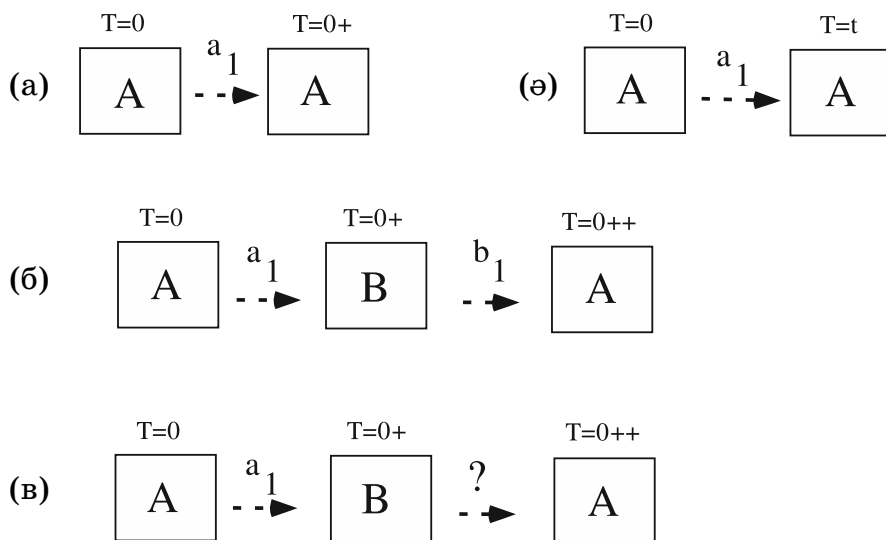
$$A = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2}i \\ \sqrt{2}i & 1 \end{pmatrix}$$

(а)  $A$  операторының өзіндік мәндер  $\pm 1$  болатынына көз жеткізіңіздер және оның өзіндік векторларын табыңыздар.  $B$  векторының өзіндік мәндері мен өзіндік векторларын табыңыздар.

(ә)  $A$  және  $B$  бірге бақыланатын бола ма? Олар сақталады ма?

(б)  $A$  бақыланатын  $A = 1$  мәнін қабылдасын. Ал  $B$ -ның нәтижелері қандай болады? Егер осындай өлшеу  $A$ -ны өлшегеннен соң бірден жүргізілетін болса, онда  $B$  үшін нәтижелері және оның салыстырмалы ықтималдылығы қандай болады?

(в) Жүйе  $A$ -ны екінші рет өлшеуге ұшырайды. Өртүрлі жағдайлар (2.4-суретті қараңыз) үшін  $A=1$  нәтижесі табылуының ықтималдылығы қандай?



2.4-сурет. 2.3 (в) есебі үшін әртүрлі төрт жағдайлар

(i) Бақыланатын  $B$  өлшенген жоқ, ал екінші өлшеу біріншісінен соң бірден жүргізіледі (б).

(ii) Бақыланатын  $B$  өлшенген жоқ, ал екінші өлшеу біріншісінен соң  $t$  интервалынан соң жүргізіледі.

(iii) Бақыланатын  $B$  өлшенді және оның нәтижесі  $b$  белгілі ( $B$ -ның барлық өзіндік мәндерінің максималдысы)

(iv) Бақыланатын  $B$  өлшенді, бірақ  $B$ -дан кейін бірден  $A$ -ны өлшеген адам  $B$ -ның нәтижесін білмейді.

(2.4) Үш күйі болатын жүйенің гамильтонианы

$$H = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

(а)  $H$  өзіндік мәндерін және негізгі, бірінші және екінші қозған күйлерге сәйкес келетін  $|a\rangle$ ,  $|b\rangle$ ,  $|c\rangle$  өзіндік күйлерін есептеңіздер. Нәтижелерін келесі белгілеулерде өрнектеңіздер:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix};$$

(ә)  $H$  гамильтонианының келесі оператормен коммутациялайтынына көз жеткізіңіздер

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \Pi^2 = 1.$$

Нәтижесінің (а) нәтижесімен үйлесімділігін талқылаңыздар.

(б) Энергияның өзіндік көрінісінде  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$  күйлерін жазыңыздар.

(в) Уақыттың  $t=0$  моментінде жүйе  $|1\rangle$  күйінде болады. Енді  $|\psi(t)\rangle$  күйін  $t$  моментіндегі  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$  күйлерінің термдерінде табыңыздар. Уақыттың  $t$  моментінде жүйенің  $|2\rangle$  күйінде табылуының ықтималдылығын есептеңіздер және  $P_2(t)$  графигін  $t$  уақыттың функциясы ретінде салыңыздар.

(2.5) Үш күйі болатын жүйені қарастырайық. Гамильтонианның өзіндік мәндері сегінемеген деп жорамалдайық. Гамильтонианның негізін екі  $A$  және  $B$  эрмиттік операторларының өзіндік күйлері құрайды.  $A$  және  $B$  операторлары төмендегідей анықталған:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -ia \\ 0 & 0 & 0 \\ ia & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ b & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

мұндағы  $a$ ,  $b$  – оң нақты сандар.

(а)  $A$ -ның өзіндік мәндері мен өзіндік векторларын есептеңіздер.

(ә)  $B$ -ның өзіндік мәндері мен өзіндік векторларын есептеңіздер.

(б) Уақыттың  $t=0$  моментінде  $A$ -ны өлшеуі өзінің максималдық өзіндік мәнін көрсетті. Егер  $B$ -ны өлшеуі  $A$ -ны өлшеуінен соң бірден жүргізілетін болса, онда  $B$ -ның мүмкін болатын максималдық нәтижесі табылуының ықтималдылығы қандай болады? Нәтиженің (а) нәтижесімен үйлесімділігін талдаңыздар.

(в) Егер  $B$  өлшеуі уақыттың  $t > 0$  моментінде жүргізілген болса, онда (б) есебіндегі сияқты  $B$ -ның мүмкін болатын максималдық нәтижесі табылуының ықтималдылығы қандай болады?

### Сандық талдау

(2.1) Mathematica бағдарламасын пайдаланып, 2.3-есебін шешіңіздер. Ұсынылған өлшеулердің жиынтығы үшін модельдеу бағдарламасын жазыңыздар. Өлшеулердің шектік сандарында нәтижелер биномдық таралуға ие болады. Модельдеу нәтижелері мен күтілетін таралуларды салыстырыңыздар.

# Шредингер теңдеуі

# 3

- 3.1 Жалпы қасиеттері
  - 3.2 Бірөлшемді күйлер
  - 3.3 Потенциалдық шұңқырлар
  - 3.4 Гармоникалық осциллятор
  - 3.5 Шашырау есептері және туннельдік эффект
  - 3.6 Периодтық потенциалдар
- Қосымшаларға нұсқаулық  
Есептер  
Сандық талдау

Кванттық механикадағы динамика Шредингер теңдеуімен сипатталады. Алдымен Шредингер теңдеуінің жалпы қасиеттерін қарастырамыз. Содан соң алдыңғы тарауда енгізілген кванттық механиканың заңдарын нақты физикалық есептер үшін қолдана бастаймыз. Байланысқан күйлердің де және шашырау үдерістерінің де өртүрлі мысалдары бірөлшемді жағдайлар үшін талданылған.

## 3.1 Жалпы қасиеттері

Төменде Шредингер теңдеуін шешу үшін шекаралық шарттарға қойылатын жалпы талаптарды тұжырымдаймыз, кейбір операторлардың орташа мәндеріне байланысты маңызды теоремалардың бірқатарын талдаймыз. Содан кейін кванттық механиканың маңызды түсініктерін: ықтималдылық тығыздығын, ықтималдылық тогының тығыздығын және сақталу шарттарын енгіземіз.

### 3.1.1 Шекаралық шарттар

Уақытқа тәуелсіз үшөлшемді Шредингер теңдеуін жазайық:

$$H\psi = E\psi,$$

мұндағы

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(r). \quad (3.1)$$

Бұл екінші ретті дифференциалдық теңдеу, оны шешу үшін екі шекаралық шарттарды енгізу қажет. Шекаралық шарттар әрбір шешілетін есептердің физикалық талаптарын қанағаттандыруы керек. Ал  $|\psi|^2$  ықтималдылық тығыздығы ретінде интерпретацияланғандықтан,  $\psi$  функциясы үздіксіз болуын талап етеміз. Осы  $\psi$  функциясының бірінші ретті туындысының үздіксіз болтынын тікелей Шредингер теңдеуінен аламыз. Жеңіл болу үшін бірөлшемді жағдайды қарастырайық:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = (E - V(x)) \psi(x).$$

Екі жағын да  $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$  аралығында интегралдап, табамыз:

$$\psi'(x_0 + \epsilon) - \psi'(x_0 - \epsilon) = 2\epsilon \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x_0)) \psi(x_0) \rightarrow 0,$$

мұнда потенциалдың мәні  $x=x_0$  нүктесінде шекті болатын шарты ескерілген. Бұдан потенциалы шекті болған жағдайда  $\psi'$  және  $\psi$  барлық жерде үздіксіз болатыны шығады.

Шындығында, егер потенциалдың кейбір ерекшеліктері бар болса, онда бұл ереже орындалмайтын жағдайлар да кездеседі. Кітаптың 3.5.2-бөлімінде потенциалдың түрі дельта-функция болған жағдайда толқындық функцияның бірінші ретті туындысы үшін шекаралық шарттар талданған.

Бұдан

$$\langle \mathbf{p}^2 \rangle \geq 0$$

( $A^\dagger A$  эрмиттік операторының орташа мәндері әрқашан оң болатынына көңіл аударыңыздар),  $E_n$ :

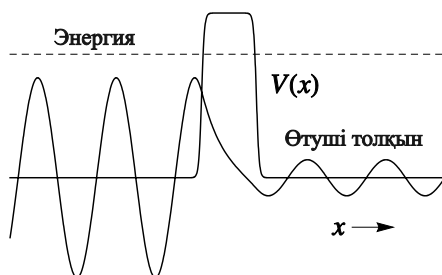
$$E_n > V_{\min} \quad (3.2)$$

шартын қанағаттандырады, мұндағы  $V_{\min}$  – потенциалдың минимумы. Басқа сөзбен айтқанда, *энергияның өзіндік мәндері потенциалдың минимумынан кіші болатын күйлер болмайды.*

Енді  $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$  үшін  $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$  болады деп жорамалдайық, бірақ

потенциал  $\mathbf{r}$ -дің кейбір облыстарында теріс мәндерді қабылдай алсын. Энергияның  $E < 0$  болатын барлық өзіндік мәндері дискреттік күйлерге (байланысқан күйлерге) сәйкес келеді.

Толқындық функция Шредингер теңдеуінің шешімі болғандықтан, классикалық бөлшек бола алмайтын, яғни  $E < V(\mathbf{r})$  облыста нөлге тең болмайды. Бұл бөлшектің ені шекті потенциалдық тосқауылдан өтуінің (туннельдік эффект) нөлдік емес ықтималдылығының салдары. Туннельдік эффектте біз әлі бірнеше рет қайтып ораламыз. 3.1-суретін қараңыз.



**3.1-сурет.** Туннельдік эффект. Тіпті,  $E < \frac{2}{3}V_{\text{макс}}$  жағдайы үшін өткен толқынның амплитудасы өте кіші (бірақ нөлдік емес) болады. Сондықтан суретте көрінуінің өзі қиын

### 3.1.2 Эренфест теоремасы

Толқындық пакеттің қозғалысын қарастырайық. Гамильтониан (3.1) формуласымен анықталады. Эренфест теоремасы координата және импульс операторларының орташа мәндерінің байланысын көрсетеді.

**3.1-теорема** Келесі  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{p}$  және  $V(\mathbf{r})$  потенциал туындысының орташа мәндері «Ньютон» теңдеулерін қанағаттандырады:

$$\frac{d}{dt}\langle m\mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{p} \rangle; \quad \frac{d}{dt}\langle \mathbf{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle.$$

**Дәлелдеу.** Уақытқа тәуелсіз кез келген оператордың орташа мәні:

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

теңдігін қанағаттандырады.

Ал  $\hat{O} = m\mathbf{r}$  үшін коммутатор тең болады<sup>1</sup>

$$[m\mathbf{r}, H] = \left[ m\mathbf{r}, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right] = i\hbar \mathbf{p},$$

мұнда біз  $[x, p_x^2] = 2p_x[x, p_x] = 2i\hbar p_x$  және т.с.с., оған қоса  $[\mathbf{r}, V(\mathbf{r})] = 0$  болатынын пайдаландық. Егер  $\hat{O} = \mathbf{p}$  болған жағдайда сәйкес келетін коммутатор тең болады:  $[\mathbf{p}, V(\mathbf{r})] = -i\hbar \nabla V$ .

Демек, басқаша айтатын болсақ, онда толқындық пакеттің қозғалысы классикалық теңдеулеріне бағынатынын көреміз.

Сонымен қатар, бұл өте зерделі және ыңғайлы нәтиже: классикалық физиканың қайта қалпына келетін шектік жағдайлары қалай да көрсетілуі қажет болатын. Эренфест теоремасын кейбір шектерде Ньютондық физиканы бейнелейтін кванттық физика нәтижелерінің бірі ретінде қарастыруға болады.

Толқындық пакетті классикалық бөлшек ретінде координаталары мен импульсі біршама «шайылған» атомдық деңгейдегі кванттық флуктуациялары тәрізді қарастыру бір жағынан қызықты да. Немесе одан да батылырақ қадам жасап,  $|\psi|^2$  материяның таралуын көрсетеді деген болжам жасауға болар еді.

Алайда, толқындық пакеттердің «материя» жөніндегі кез келген интерпретациясы *орынсыз*. Толқындық функцияның квадраты ықтималдылық амплитудасын береді. Ал толқындық пакет таралады және ол жылдам жайылып кетеді, мысалы, потенциалдық тосқауылдан өткенде. Екінші жағынан, электрон «екі тесіктен» өту кезінде ешқашан фрагменттерге ыдырамайтыны эксперимент жүзінде дәлелденген. Сондай-ақ поляризация бағыты еркін болатын бірде-бір фотон ыдыраған емес: ол поляризатордан өтуін *немесе* өтпеуін *таңдайды*. Толқындық пакеттің жайылып кетуінің ықтималдылық интерпретациясын бізге бақыланатын фактілер діттейді.

---

<sup>1</sup> Кез келген  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  және  $\hat{C}$  операторлары үшін  $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$ ;  $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$  орындалатынын ескертеміз.

### 3.1.3 Ток тығыздығының ықтималдылығы және ықтималдылықтың сақталуы

Келесі шама  $|\psi(\mathbf{r})|^2 \equiv \rho$  ықтималдылық тығыздығын өрнектейді. Ол ағынның өлшемі болатын ток ықтималдылығының тығыздығымен тікелей байланысты. Расында, Шредингер теңдеуінен табамыз

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi + \left( \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \psi \equiv \frac{1}{i\hbar} [\psi^* H \psi - (H^* \psi^*) \psi] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[ \psi^* \left( -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi \right) \right] - \frac{1}{i\hbar} \left[ \left( \nabla \cdot \psi^* \right) \left( -\frac{\hbar^2 \nabla}{2m} \psi \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \frac{\hbar^2 \nabla}{2m} \psi^* \right] \end{aligned} = -\nabla \cdot \mathbf{j},$$

мұндағы

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} \{ (\nabla \psi^*) \psi - \psi^* \nabla \psi \},$$

яғни

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (3.3)$$

Бұл – үзіліссіздік теңдеуі. Осы теңдікті  $V$  шектеулі көлем бойынша интегралдау үшін Гаусс теоремасын пайдаланамыз, одан

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3r |\psi|^2 = -\oint_S dS \mathbf{n} \cdot \mathbf{j} \quad (3.4)$$

өрнегін аламыз, мұндағы  $\mathbf{j}$  – көлемге кіретін немесе одан шығатын ағын ықтималдылығының тығыздығы ретінде интерпретациялауға болады. Осылайша (3.3) және (3.4) теңдеулері толық ықтималдылықтың сақталуын көрсетеді (оны *унитарлық* деп те атайды).

Жазық толқын (импульс операторының өзіндік күйлері) үшін

$$\psi_{\mathbf{p}} = e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}$$

ТОКТЫҢ ТЫҒЫЗДЫҒЫ КЛАССИКАЛЫҚ ЖЫЛДАМДЫҚҚА ТЕҢ:

$$\mathbf{j} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}.$$

### 3.1.4 Вириал және Фейнман-Гелл-Манн теоремалары

#### 3.2-теорема Вириал теоремасы

Стационарлық күйлер жағдайында кинетикалық және потенциалдық энергиялардың орташа мәндері

$$2 \left\langle \psi_n \left| \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right| \psi_n \right\rangle = \left\langle \psi_n \left| \mathbf{r} \cdot \nabla V \right| \psi_n \right\rangle \quad (3.5)$$

қатынасын қанағаттандырады. ((20.23) теңдеуімен салыстырыңыз).

**Дәлелдеме.** Классикалық механикадағы (20.23) вириал теоремасы гамильтониандағы кинетикалық және потенциалдық мүшелерінің уақыт бойынша көптеген периодтарындағы орташа мәндері жөнінде. Ал мұндағы (3.5) формуласына сәйкес келетін операторлардың кванттық орташа мәні туралы сөз болуда. Осыны дәлелдеу үшін  $\psi_n$  стационарлық күй үшін коммутатордың орташа мәнін (жеңіл болу үшін бірөлшемді жағдайды) қарастырайық:

$$[xp, H] = \left[ xp, \frac{p^2}{2m} + V(x) \right] = i\hbar \left( 2 \frac{p^2}{2m} - xV' \right).$$

Бірінші коммутатор нөлге тең, себебі

$$\langle \psi_n | [xp, H] | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | xp | \psi_n \rangle E_n - E_n \langle \psi_n | xp | \psi_n \rangle = 0.$$

Демек,

$$2 \left\langle \psi_n \left| \frac{p^2}{2m} \right| \psi_n \right\rangle = \langle \psi_n | xV' | \psi_n \rangle. \quad \square$$

Теорема дәлелденді.

#### 3.3-теорема. Фейнман-Гелл-Манн теоремасы

Энергияның өзіндік мәндеріндегі  $V(g)$  потенциалында пайда болатын  $g$  параметрінен тәуелділігі

$$\frac{\partial E_n}{\partial g} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial g} \right\rangle_n \quad (3.6)$$

түрінде болады, мұндағы  $\frac{\partial V}{\partial g}$  – сәйкес келетін өзіндік күйдің орташа мәні.

**Дәлелдеме.** Дәлелдемесі жеңіл болғанымен, тым қарапайым да емес:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial g} \int \psi_n^* H \psi_n &= \int \psi_n^* \frac{\partial V}{\partial g} \psi_n + \int \psi_n^* H \frac{\partial}{\partial g} \psi_n + \int \left[ \frac{\partial}{\partial g} \psi_n^* \right] H \psi_n = \\ &= \left\langle \frac{\partial V}{\partial g} \right\rangle_n + E_n \frac{\partial \|\psi_n\|^2}{\partial g} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial g} \right\rangle_n. \end{aligned}$$

Мұнда кез келген  $g$  үшін  $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$  орындалатыны ескерілді. Теорема расында орындалады, егер сыртқы параметр уақыт бойынша баяу өзгертін болса, және дәл осы жағдайда энергиялық деңгейдің адиабаталық өзгерісін сипаттайды.  $\square$

### 3.2 Бірөлшемді күйлер

Бірөлшемді потенциалда қозғалатын бөлшек үшін Шредингер теңдеуі:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (3.7)$$

болады.

Алайда, бірөлшемді есептерге деген қызығушылық тек қана академиялық сипатқа ие боламайды. Шындығында кейбір үшөлшемді есептердің еркіндік дәрежесін бірге дейін тиімді кемітуге, яғни есепті бірөлшемдіге әкелуге болады. Осындай мысалдың бірі болып тек бір айнымалыға тәуелді потенциалды айта аламыз:

$$V = V(x, y, z).$$

Келесі алмастыруды  $\psi(x, y, z) = \psi(x)\phi(y)\eta(z)$  жасайтын болсақ, онда есебіміз үш теңдеуден тұратын жүйені шешуге келіп тіреледі

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E_1 \psi(x);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(y) = E_2 \phi(y);$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \eta(z) = E_3 \eta(z),$$

мұндағы  $E = E_1 + E_2 + E_3$ .

Үш теңдеудің біріншісі тікелей бірөлшемді Шредингер теңдеуі болып табылады (қалғандары еркін бөлшектер үшін Шредингер теңдеуі).

Тағы да бір теңдеудің тиімді бірөлшемді есепке айналатын мысалы, ол үшөлшемді  $V=V(r)$  сфералық симметриялық потенциалындағы бөлшектің қозғалысы (6.1-бөлімін қараңыз). Сфералық координаталар жүйесінде айнымалыларды ажырату:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{\chi(r)}{r} \Phi(\theta, \phi)$$

әдісімен жүргізіледі.

Мұнан  $\chi(r)$  радиалдық функциясы бірөлшемді Шредингер теңдеуі болып табылатыны көрініп тұр:

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_{\text{эфф}}(r)) \right] \chi = 0,$$

мұндағы эффективті потенциал:

$$V_{\text{эфф}}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}, \quad r \geq 0 \quad (3.8)$$

түрінде анықталған.

$V_{\text{эфф}}(r)$  потенциалының екінші мүшесі орталықтан тебу потенциалы екені айқын. Толқындық функцияның  $r=0$  нүктесінде регулярлық болуының шарты  $\chi(0)=0$  талап еткендіктен, енді келесі эквивалентті есепті шешу керек болады: бөлшек координата басының оң жағында, яғни  $r \geq 0$  облысында қозғалады (сонымен қатар  $r < 0$  облысына қол жетімсіз, себебі  $V_{\text{эфф}}(r) = \infty$  деп жорамалдадық).

### 3.2.1 Еркін бөлшек

Еркін бөлшек үшін ( $V=0$ ) Шредингер теңдеуінің түрі:

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

болады, немесе

$$\psi'' = -k^2\psi, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (3.9)$$

Ал  $E \geq 0$  үшін (3.9) теңдеуінің нормаланбайтын, бірақ шектелген екі шешімі бар:

$$e^{\pm ikx}, \quad E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}.$$

Әрбір оң энергиялы деңгей екі рет сетінеген. Бұл бөлшектердің солдан оңға және оңнан солға қарай қозғала алуымен байланысты. Суперпозиция принципіне сәйкес жалпы шешімді:

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

түрінде жазуға болады, сонымен қатар, уақытқа тәуелді шешімінің түрін келтірейік:

$$\psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar} (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}).$$

Егер  $E < 0$  болса, онда шешімі  $\psi \propto \exp\pm|k|x$ , яғни байланыспаған күй экспоненциалды түрде артады. Бұл шешімнің физикалық мағынасы жоқ болғандықтан,  $E < 0$  күйлерін қарастырмаймыз.

Шешіміміздің дұрыстығына көз жеткізетін тағы да бір жеңіл жолы бар. Импульс операторы эрмиттік, ал оның өзіндік мәндері  $-\infty < p < \infty$  қабылдайды. Келесі  $E = p^2/2m$  қатынасынан  $E \geq 0$  болатынын көреміз.

Осы жағдайда энергияның өзіндік күйлерінің толықтылығы кеңінен танымал фактіге әкеледі: кез келген квадратты-интегралданатын функциялардың ( $L^2$ ) Фурье-бейнесі табылады:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dq \tilde{f}(q) e^{iqx} = \int_0^{\infty} dk \tilde{f}(k) e^{ikx} + \int_0^{\infty} dk \tilde{f}(-k) e^{-ikx}.$$

Бізді қызықтыратын жүйе кеңістікте қозғалатын еркін бөлшекті сипаттайды, ал оның топологиясы  $S^1$  шеңбері болады.

Басқа сөзбен айтқанда, мұндай кеңістікте  $x$  және  $x+L$  нүктелері бірдей анықталады.

Қозғалыстағы бөлшектің толқындық функциясы үшін шекаралық шарт кеңістіктің құрылымымен келісімде болуы қажет. Мысалы, *табиғи* шекаралық шарт толқындық функциялар үшін:

$$\psi(x+L) = \psi(x) \quad (3.10)$$

периодтылық шарты болып шығады.

Осы жағдайда толқындық сан  $k = 2\pi n/L$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  мәндерін қабылдайды, ал спектр дискретті болады:

$$E_n = \frac{(2\pi n)^2 \hbar^2}{2mL^2}. \quad (3.11)$$

Әрбір оң энергиялы деңгей екі рет сетінеген, ал негізгі күйі – сетінемеген. Біз оқырманға энергияның өзіндік күйлерінің толықтылығын өз бетімен көрсетуді қалдырамыз. Осы жағдайда ол Фурье теоремасына әкеледі: кез келген периодтық функцияны Фурье қатарына жіктеуге болады.

### 3.2.2 Топологиялық тривиалдық емес кеңістік

Жаңа ғана қарастырған жүйе – түзудің бойымен қозғалатын еркін бөлшектің шеңбер болатын топологиясы:

$$x \equiv x + L$$

қызықты жалпыламаға ие. Кванттық механикада осы жүйелер классикалық механикадағы тікелей аналогы жоқ физикалық параметрге ие болуы мүмкін. Расында, толқындық функциялардың фазасын таңдаудағы белгілі еркіндік (3.10) шекаралық шартын жалпылауға мүмкіндік береді

$$\psi(x+L) = e^{i\theta} \psi(x), \quad (3.12)$$

мұндағы  $\theta$  – кванттық жүйені сипаттайтын тұрақты.  $\psi = e^{ikx}$  – өзіндік функциясы,  $E = k^2 \hbar^2 / 2m$  – өзіндік мәні Шредингер теңдеуінің шешімі болып табылғанымен, жалпы шекаралық шарттың талабына сәйкес

$$kL = 2\pi n + \theta, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

келмейді. Бұдан:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2} (2\pi n + \theta)^2$$

шығады. Сәйкес келетін өзіндік функциялардың түрі:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(i \frac{2\pi n + \theta}{L} x\right) \quad (3.13)$$

болады. (3.13) функциялары импульс операторының өзіндік күйлері болып табылады:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_n(x) = \hbar \frac{2\pi n + \theta}{L} \psi_n(x).$$

$E_n \neq E_{-n}$  шарты барлық  $\theta$  үшін орындалады, алайда  $\theta = 0$  энергия деңгейлерінің екі еселенген сетінеулері болмайды. Дербес жағдайда  $\theta = \pi$  үшін энергия деңгейлерінің өрнегі:

$$E_n = \frac{\hbar^2 (2\pi)^2}{2mL^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2$$

болады. Осы жағдайда негізгі күйді қоса барлық деңгейлердің сетінеуі екі еселенген болады. Олар (0, -1), (1, -2), (2, -3) күйлердің жұптарына сәйкес келеді және т.с.с.

Келесі  $\theta = 2\pi$  дербес жағдайы үшін де қызықты. Осы жағдайдың спектрі  $\theta = 0$  жүйесімен сәйкес келеді, бірақ енді негізгі күйі  $n = -1$  сетінемеген. Ал басқа күйлерінің жұптары ((0, -2), (1, -3) және т.б.) сетінеген. Басында  $\theta = 0$  және  $\theta = 2\pi$  үшін спектрлері тектес болатыны күтілген, себебі  $\theta$  – бұрыштық параметр, ал оның өзі модулі бойынша  $2\pi$  дәлдігімен анықталады! Біз осы екі жүйенің тектес болатынына көзімізді жеткізуіміз үшін күйлерді  $n \rightarrow n-1$  қайта белгілеу керек.

Алайда бәрі де осыншама қарапайым болмайтын мәселелер де бар. Мысалы, сыртқы параметрлер 0-ден  $2\pi$ -ге дейін уақыт бойынша баяу өзгереді (адиабаталық) делік. Егер бастапқыда жүйе  $|n\rangle$  стационарлық күйлердің бірінде табылатын болса, онда жүйенің адиабаталық өзгерісінде ол  $|n, t\rangle$  «бір сәтте энергияның өзіндік мәні» болып қалады. Сонымен қатар жаңа деңгей жоғары да, төмен де орналасуы мүмкін болатынын 12.3-бөлімінде көрсетеміз. Жүйе  $\theta = 0 \rightarrow 2\pi$  толық циклді өткеннен соң, спектр де бастапқыға қайтып оралады. Бірақ кванттық жүйе енді  $|n+1\rangle$  күйіне ығысады, демек күй өзгереді! Бұл құбылыс «спектрлік ағыны» деп аталады; оның

Абельдік емес (коммутацияламайтын) өлшемдік теориялардағы<sup>2</sup> қызықты қосымшалары бар.

Осы құбылыстардың орын алуының негізгі себебі болып  $S^1$  көрінісіндегі кеңістіктің көпретті баланысты, яғни тривиалдық емес топологиялық құрылымы табылады. Бөлшектің  $\mathbb{R}^3$  кеңістігінде қарапайым қозғалысы кезінде оны бақылау мүмкін емес, өйткені бірмәнді толқынық функциямен сипатталады. Кері жағдайда кеңістік эффективті және көпретті байланыста болады, ал толқындық функция тривиалдық емес периодтық шарттарға бағынуы қажет. Бұдан соң біз осы текті қызықты физикалық құбылыстарды (Ааронов-Бом эффектісі, кейбір жартылай классикалық жүйелерді) қарастырамыз.

### 3.2.3 Бірөлшемді Шредингер теңдеулерінің арнайы қасиеттері

**3.4-теорема.** *Бірөлшемді потенциалдық шұңқырда энергияның дискреттік деңгейлері сәтінемеген.*

**Дәлелдеме.** Кері жорамалдап көрелік:  $\psi_1$  және  $\psi_2$  екі өзіндік функциялары энергияның бір ғана  $E$  өзіндік мәніне сәйкес келсін, яғни:

$$\psi_1'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi_1, \quad \psi_2'' = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi_2.$$

Сонымен, гамильтониан – эрмиттік оператор, ал  $V(x)$  және  $E$  – нақты шамалар. Шредингер теңдеуіндегі (3.7) коэффициенттері нақты. Демек, байланысқан күйлердегі шешімдер де нақты болады. Бірінші теңдеуді  $\psi_2$ -ге және екіншісін  $\psi_1$ -ге көбейтіп, содан соң екіншісінен біріншісін азайтатын болсақ, онда:

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = 0$$

аламыз. Интегралдап:

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = \text{const}. \quad (3.14)$$

табамыз.

Сонымен қатар  $x = \pm\infty$  үшін  $\psi_1 = \psi_2 = 0$  (шектілік шарты). Онда (3.14)

<sup>2</sup> Бұл өрістің теориясы кванттық электродинамикаға (КЭД) ұқсайды, бірақ өлшемдік түрлендірулер  $SU(2)$ ,  $SU(3)$  сияқты коммутацияланбайтын группалардың қатысуымен жүргізіледі. Көріп тұрғанымыздай, КЭД тек фазалық түрлендірулері ( $U(1)$  группасы) пайдаланылады. Гравитациядан басқа барлық іргелі әсерлесулер осы теориямен сипатталатыны кеңінен белгілі.

теңдеуіндегі  $\text{const} = 0$

$$\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x) = 0.$$

Тағы да интегралдап:

$$\log \psi_1 = \log \psi_2 + \text{const}, \quad \psi_1 = \text{const} \cdot \psi_2$$

аламыз. Яғни  $\psi_1$  және  $\psi_2$  функциялары расында бір-ақ деңгейді сипаттайды, ал ол біздің жорамалымызға қайшы.  $\square$

Толқындық функцияның жалпы тәртібін Шредингер теңдеуінен тікелей анықтауымызға болады:

$$\psi'' = \frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2} \psi. \quad (3.15)$$

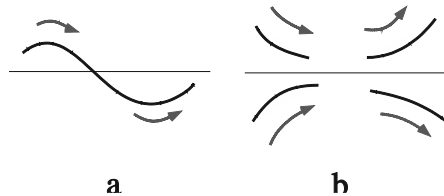
Егер  $\psi'' > 0$  болса, онда функция *ойыс* болады, ал егер  $\psi'' < 0$  болса, онда ол – *дөңес*. Ендеше  $E > V(x)$  болатын аралықта (классикалық рұқсат етілген облыс)

$$\begin{cases} \psi'' > 0, & \text{егер } \psi < 0, \\ \psi'' < 0, & \text{егер } \psi > 0, \end{cases}$$

яғни  $\psi(x)$  тербеледі ( $x$  осін қияды). Және керісінше,  $E < V(x)$  болатын  $x$  облысы үшін (классикалық рұқсат етілмеген облыс)

$$\begin{cases} \psi'' > 0, & \text{егер } \psi > 0, \\ \psi'' < 0, & \text{егер } \psi < 0, \end{cases}$$

орнықсыз тәртіпке ие болады. Екі жағдайда да  $|E - V(x)|$  артқан сайын  $|\psi''|$ -тің абсолюттік қисықтығының мәні де артатын болады. *3.2-суретін қараңыз.*



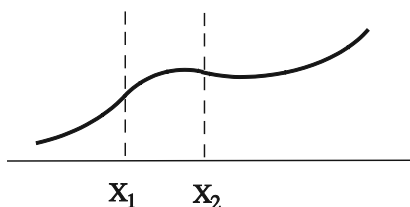
**3.2-сурет.** Толқындық функцияның жалпы тәртібі: (а)  $E > V(x)$  үшін; (б)  $E < V(x)$  үшін

Егер толқындық функция тәртібінің осы жалпы ерекшеліктерін ескеретін болсақ, онда келесі теореманы дәлелдеу қиын емес.

**3.5-теорема. (Осцилляторлық теорема)** Энергияның  $n$ -ші дискретті деңгейіне сәйкес келетін толқындық функцияның  $n - 1$  түйіні (нөлдері) болады.

**Дәлелдеу.** Алдымен  $x \rightarrow \pm\infty$  үшін деп жорамалдайық. Сондықтан спектр тек дискретті болады. Ал (3.15) теңдеуінің екі тәуелсіз шешіміне ие: толқындық функцияның нормалануы шартынан  $x \rightarrow -\infty$  үшін  $\psi$  -дің нөлге ұмтылатын шешімін таңдауымыз қажет. Өзірге ешқандай шектеу қоймай,  $x < 0$  үшін және  $|x|$ -тің жеткілікті мәндерінде  $\psi$  -ді оң мән ретінде қабылдайық. Нормалау келесі жолмен жүргізіледі:  $\psi(x_1) = 1$ , мұндағы  $x_1$  - санақтың кез келген таңдалған нүктесі. Ең алдымен,  $E < V_{\min}$  қабылдап, егер  $E$ -ні біртіндеп арттыратын болсақ, онда қалайша өзгеретінін зерттейік.

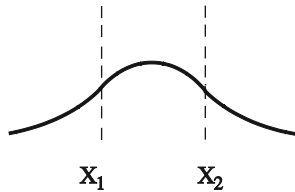
- (I)  $E < V(x)$  болғанда, онда  $\forall x$  үшін  $\psi$  ойыс; ол барлық  $x$  үшін монотонды артады және міндетті түрде  $x \rightarrow \infty$  шегінде шашыраңқы болады.  $V_{\min}$  кіші өзіндік мәні болмайды.
- (II) Ал  $E$ -нің мәні  $V_{\min}$  шамалы жоғары делік, ал  $x_1$  және  $x_2$  нүктелері  $E - V(x) = 0$  теңдеуінің шешімдері болсын. Осылайша,  $x_1 < x < x_2$  үшін  $E > V(x)$  немесе кері жағдайда  $E < V(x)$ . Онда  $x = -\infty$ -тен  $x = x_1$ -ке дейінгі аралықта  $\psi$  артады;  $(x_1, x_2)$  аралығында толқындық функция дөңес болады, ал  $x > x_2$  аралығында – ойыс. Егер  $E$ -нің мәні  $E_1 > V_{\min}$  мәнінен артатын қандай да шекті болса, онда  $x \rightarrow \infty$  үшін ол шашыраңқы болады, себебі функция үздіксіз (3.3-сурет).



3.3-сурет.  $V_{\min} < E < E_1$  үшін толқындық функция

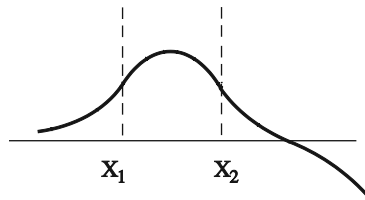
- (III)  $E = E_1$ .  $[x_1, x_2]$  интервалында  $E$  артады, ал  $\psi$  функциясы дөңес және артады. Сонымен қатар  $x$ -тің бекітілген мәнінде қисықтығы шексізге дейін артады. Демек, бірінші мәні  $E_1$

болады да, ал  $\psi$  функциясы  $x = \infty$ -те нөлге ұмтылады. Сонымен,  $E$ -нің осы мәнінде  $\psi$  функциясы нормаланады. Жүйе өзінің негізгі күйінде табылады. Оның  $\psi$  толқындық функциясының ешқандай түйіні болмайды (3.4-сурет).



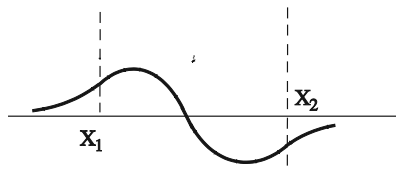
3.4-сурет.  $E = E_1$  (негізгі күй) болғандағы толқындық функция

(IV) Энергияны қосымша арттырғанда,  $\psi$  функциясы абсцисса осін қияды да, бірден орнықсыз болады, яғни шашырап кетеді. Функция нормаланбайтын болады (3.5-сурет).



3.5-сурет. Энергиясы негізгі күйдің энергиясынан шамалы артық болғандағы  $E_1 < E < E_2$  үшін толқындық функция

(V)  $E$ -ні үздіксіз арттырғанда  $E = E_2$  нүктесіне жетеміз. Осы жағдайда  $\psi$  функциясы  $x = \infty$  үшін нөлге ұмтылады. Бұл жолы ол  $x$  осіне теріс мәндер облысынан ұмтылады. Жүйе бірінші қозған күйде, ал толқындық функцияның бір түйіні болады (3.6-сурет).



3.6-сурет.  $E = E_2$  (бірінші қозған күй) үшін  $\psi(x)$

(VI) Осылайша  $E$ -нің мәнін бірте-бірте арттыра отырып, теореманың

дәлелдемесіне тікелей келеміз. Яғни  $n$ -ші өзіндік функцияның  $n-1$  нөлі болады. Егер потенциалдың пішіні күрделі болып: бірден артық минимумы және максимумы болып жатса, онда дәлелдемені өте мұқият жүргізу қажет.

### 3.3 Потенциалдық шұңқырлар

#### 3.3.1 Шексіз терең шұңқыр (қабырға)

Алдымен шексіз терең шұңқырдағы байланысқан бөлшекті қарастырамыз:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a, \text{ II,} \\ \infty & x \leq 0, \text{ I, } x \geq a \text{ III.} \end{cases} \quad (3.16)$$

Шұңқырдың сыртындағы шешім  $\psi = 0$ . Шұңқырдың ішіндегі бөлшектің тәртібі еркін және осы жағдай үшін Шредингер теңдеуінің түрі:

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

болады. Жалпы шешімін жазайық:

$$\psi = A \sin(kx + \delta).$$

Шекаралық шарттардың арқасында функцияның мәні  $x=0$  нүктесінде болады:

$$A \sin \delta = 0 \Rightarrow \sin \delta = 0;$$

$x = a$  нүктесінде:

$$\psi = A \sin(ka + \delta) = 0 \Rightarrow \sin(ka + \delta) = 0.$$

Импульстің (энергияның) өзіндік мәндерінің өрнектерін жазайық:

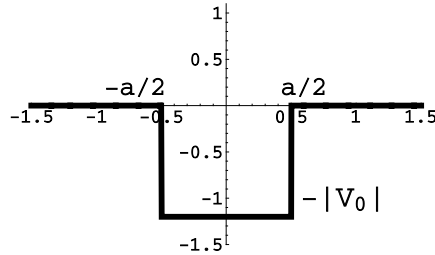
$$ka = n\pi, \quad E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.17)$$

Өзіндік күйлері  $a$  интервалында (толқын ұзындықтары  $2a/n$  болатын, мұндағы  $n = 1, 2, \dots$ ) тербелістің нормальдік модаларына сәйкес келетінін ескертеміз. Төменде  $n$ -ші өзіндік функцияның түрі келтірілген:

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

### 3.3.2 Шекті тікбұрышты шұңқыр

Енді шұңқырдың пішіні тікбұрышты болатын жағдайды қарастырайық:



3.7-сурет. Потенциалдық шұңқыр

$$\begin{cases} V(x) = 0, & x \leq -\frac{a}{2}, \quad \text{I,} \\ V(x) = V_0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, \quad \text{II,} \\ V(x) = 0, & x \geq \frac{a}{2}, \quad \text{III.} \end{cases}$$

Әр облыстар үшін Шредингер теңдеуі әртүрлі болады:

$$\psi'' = \begin{cases} -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi, & x < -\frac{a}{2}; \quad x > \frac{a}{2}, \\ -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (3.18)$$

$E > 0$  үшін (3.18) теңдеулері шешімдерінің түрі  $e^{ikx}$  болады, яғни нормаланбайтын, бірақ шектелген функциялар. Сондықтан осы  $E$  облысы үздіксіз спектрге сәйкес келеді.

Жоғарыда  $E < -V_0$  үшін физикалық күйлердің болмайтынын көрсеткенбіз ((3.2) теңдеуі). Гамильтонианның спектрі  $[-V_0, \infty]$  диапазонында болады. Байланысқан күйлер, егер олар бар болса,  $[-V_0, 0]$  диапазонында жатады. Келесі белгілеулерді енгізейік:

$$q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - |E|)}}{\hbar} > 0, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} > 0,$$

онда:

$$\psi'' = \begin{cases} \kappa\psi, & x \in \text{I, III}, \\ -q^2\psi, & x \in \text{II}. \end{cases}$$

Мұндағы  $q$  және  $\kappa$

$$q^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (3.19)$$

шартын қанағаттандырады. II облыс үшін шешімді жазамыз

$$\psi_{II} = A \sin(qx + \delta).$$

Ал I және III облыстары үшін шешімнің түрі  $e^{\pm \kappa x}$  болады. Нормалаушы көбейткішті ескеріп жазатын болсақ:

$$\psi_I = B e^{\kappa x}; \quad \psi_{III} = C e^{-\kappa x}.$$

Гамильтониан координатаның инверсиясына, яғни  $x \rightarrow -x$  алмастыруына инвариантты. Жоғарыда көрсеткеніміздей, бірөлшемді жағдай үшін дискреттік деңгейлер сәтінемейді. Энергияның функциялары анықталған жұптылыққа ие:  $x \leftrightarrow -x$  алмастыруына жұп немесе тақ болады. Өзірге:

$$\psi_{II} = A \cos qx \quad \text{немесе} \quad \psi_{II} = A \sin qx$$

деп жазайық. I немесе III облыстарында шешімнің пішіні  $e^{\pm \kappa x}$  болғандықтан

$$\psi_I = B e^{\kappa x}; \quad \psi_{III} = C e^{-\kappa x}.$$

Функцияның үздіксіз болуы  $x = \frac{a}{2}$  нүктесінде:  $\psi_{II} = \psi_{III}$ ;  $\psi'_{II} = \psi'_{III}$  шарттарының орындалуын талап етеді. Функция не жұп, не тақ болғанына тәуелсіз  $x = -\frac{a}{2}$  нүктесінде автоматты түрде үздіксіздік шарты орындалуы қажет. Жұп функция ( $B = C$ ) үшін:

$$q \operatorname{tg} \frac{qa}{2} = \kappa. \quad (3.20)$$

Аналогиялы тақ функциясы үшін:

$$-q \operatorname{ctg} \frac{qa}{2} = \kappa. \quad (3.21)$$

(3.19) және (3.20) теңдеулері энергияның жұп деңгейлерін береді, ал (3.19) және (3.21) теңдеулері – тақ. Теңдеулер жүйесінің шешімдерін графикалық түрде іздейміз. Ол үшін жаңа айнымалылар енгіземіз:

$$qa/2 \equiv \xi; \quad ka/2 \equiv \eta, \quad (\xi, \eta > 0).$$

Ал  $\xi, \eta$ :

$$\xi \operatorname{tg} \xi = \eta, \quad (\text{жұп}) \quad (3.22)$$

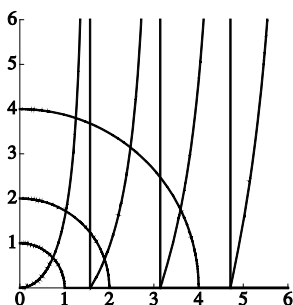
шарттарын қанағаттандырады, немесе

$$\xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta, \quad (\text{тақ}). \quad (3.23)$$

Олар бірге келесі теңдеумен байланысқан

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}. \quad (3.24)$$

(3.22) формуласы мен (3.24) теңдеуіне немесе (3.23) формуласы мен (3.24) теңдеуіне сәйкес келетін қисықтар  $\xi > 0, \eta > 0$  квадрантта (ширегінде) қиылысады және олар энергияның өзіндік мәндерін береді (3.8-суретті қараңыз).



3.8-сурет. (3.22) және (3.24) немесе (3.23) және (3.24) теңдеулерінің графикалық шешімдері

Егер  $\frac{(n-1)\pi}{2} < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \frac{n\pi}{2}$  болса, онда байланысқан күйлердің саны  $n$ -ге тең болатынын байқау қиын емес. Расында,

1.  $0 < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \frac{\pi}{2}$  болғанда жұп функция үшін бір ғана шешімі: терең емес бірөлшемді шұңқырда бір және тек қана бір

байланысқан күй болады;

2. Егер  $\frac{\pi}{2} < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \pi$  болса, онда  $0 < qa/2 < \pi/2$  үшін бір (жұп) шешімі және  $\pi/2 \leq qa/2 < \pi$  үшін өзге (тақ) шешімі болады;

3.  $\pi < \sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} \leq \frac{3\pi}{2}$  үшін үш байланысқан күйлері бар және т.с.с. Мұны осцилляторлық теоремасынан жеңіл аламыз.

### Ескертулер

- Бірөлшемді тікбұрышты потенциалда әрқашан, кем дегенде, бір байланысқан күй болады. Үш өлшемді тікбұрышты потенциалда жағдай басқаша: ең болмағанда бір байланысқан күй болуы үшін потенциалдың минималды ені мен тереңдігі болуы қажет (6.2-бөлімді қараңыз).
- Жалпы бірөлшемді ( $x \rightarrow \infty$  және/немесе  $x \rightarrow -\infty$  үшін  $V(x) \rightarrow 0$  болатын) потенциал үшін энергиясы теріс болатын байланысқан күйдің бар болуына әрқашан кепілдік бола бермейді. Теріс энергиялы кем дегенде бір байланысқан күйдің бар болуының жеткілікті шарты, ол  $x \rightarrow \pm\infty$  үшін, яғни асимптотикалық облыстарда потенциал нөлге тең болуы қажет:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) < 0.$$

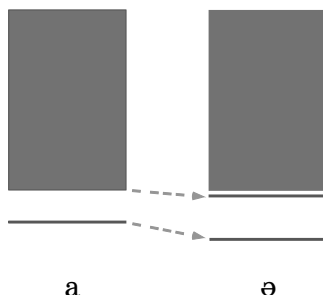
Қосымша ақпаратты алу үшін қараңыз [Schechter (1981)].

- **Шектік жағдайлар.** Кейбір ерекше жағдайлар үшін түсініктеме жасайық:

$$\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}} = \frac{\pi n}{2}, \quad q_c = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \frac{\pi n}{a}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$V_0$ ,  $a$ ,  $m$  параметрлерінің баяу өзгерісін қарастырайық. Осы өзгерістер байланысқан күйлерінің санына әсерін тигізе ала ма, зерттейік: егер  $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}}$  осы критикалық мәндердің  $\frac{\pi n}{2}$  бірінен асатын болса, онда байланысқан күйлердің саны бірге артады. Дәлірек айтқанда, континуум күйі нормаланған

болады және дискреттік спектр облысына кіреді. 3.9-суретті қараңыз.



**3.9-сурет.** Тікбұрышты потенциалдық шұңқырдағы  $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}}$  спектр: (а)  $\frac{\pi}{2}$ -ден шамалы кіші, (ә)  $\frac{\pi}{2}$ -ден шамалы артық

Энергияның нақты критикалық мәнінде  $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}}$  нөлдік күй ( $k=0$ ) мен «жаңа байланысқан күй» нормаланбаған: осы мінеміне байланысқан күйге айналатын күүді континуумдық деп атайды.

- Енді  $g = aV_0$  мәнін бекітіп, шектік  $a \rightarrow 0$ ,  $V_0 \rightarrow \infty$  жағдайын қарастырайық. Бұл потенциалға шектеу қойып, оны дельта-функцияға  $V(x) = -g \cdot \delta(x)$  айналдырады. Ал  $\sqrt{\frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}}$  нөлге ұмтылғандықтан, жүйенің жалғыз байланысқан күйі болады. Оған қоса  $\eta$  нөлге ұмтылса да, энергия (немесе  $\kappa$ ) шектік мөнге жақындайды

$$\kappa = \frac{mg}{\hbar^2}, \quad E_0 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2},$$

сонымен қатар шектік жағдайда толқындық функция да:

$$\psi = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}$$

түріне жақындайды.

### 3.3.3 Қосымшалар

Енді (3.16) жүйенің шешімен пайдаланып, шектік көлемде орналасқан газдың қарапайым моделін қарастырайық. Көлемнің ішіндегі бөлшектің энергиясы  $n$ -ші деңгейге сәйкес болсын деп жорамалдайық. Бөлшектің энергиясы

$$E_n = \left( \frac{\pi n}{a} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2m}.$$

Енді жәшіктің қабырғасы сығылатын болсын, онда жасалған жұмыс тең болады:

$$E_n(a - \delta a) - E_n(a) = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{(a - \delta a)^2} - \frac{1}{a^2} \right) = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{ma^3} \delta a \equiv p \cdot \delta a,$$

демек, бөлшектердің қабырғаға түсіретін қысымы:

$$p = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{ma^3} = \frac{2}{a} E_n \quad (3.25)$$

формуласымен анықталады.

Газ  $N$  бөлшектерден тұрады және температурасы  $T$  болатын қабырғамен жылулық тепе-теңдікте табылсын деп жорамалдайық. Энергия бойынша таралуы:

$$P_n = \mathcal{N} e^{-E_n/kT}$$

Больцманның формуласымен анықталады, мұндағы  $\mathcal{N}$  – нормалаушы тұрақты. Енді  $n$ -ші деңгейдегі  $E_n = An^2$ ,  $A = \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 \frac{\hbar^2}{2m}$  бөлшекті қарастырайық. Оның орташа энергиясы:

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n P_n$$

тең. Есепті жеңілдету үшін бөлшектердің әсерлесуін қарастырмаймыз. Онда  $N$  бөлшектен құралған газ үшін:

$$E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} \simeq E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N},$$

энергияның орташа мәні:

$$\begin{aligned}\langle E \rangle^{(N)} &= \frac{\sum_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} e^{-E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)}/kT}}{\sum_{(n_1, n_2, \dots, n_N)} e^{-E_{(n_1, n_2, \dots, n_N)}/kT}} = \\ &= N \frac{\sum_{n_1} E_{n_1} e^{-E_{n_1}/kT}}{\sum_{n_1} e^{-E_{n_1}/kT}} = N \langle E \rangle.\end{aligned}$$

Жоғары температуралар  $\frac{A}{kT} \ll 1$  үшін  $n$  бойынша қосындылауды интегралмен алмастырамыз. Айнымалыларды  $\sqrt{An} \equiv x$  алмастырып:

$$\langle E \rangle \sim \frac{\int dx x^2 e^{-x^2/kT}}{\int dx e^{-x^2/kT}} = \frac{1}{2} kT$$

болатынын табамыз. Жүйенің энергиясы:

$$U = \langle E \rangle^{(N)} = \frac{1}{2} NkT$$

классикалық формуламен анықталады. Бұдан бірөлшемді идеалды газ үшін жылу сыйымдылығының:  $C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{2} Nk$  қарапайым формуласын аламыз.

Төменгі температуралар үшін  $\langle E \rangle$  қосындылауында негізгі күйіндегі бөлшектердің үлесі үстем болады:

$$\langle E \rangle \approx E_1,$$

демек,  $T \rightarrow 0$  үшін меншік жылу сыйымдылық нөлге ұмтылады.

(3.25) теңдігінен бөлмелік температурадағы қысым үшін:

$$P = \frac{2}{a} N \langle E \rangle = \frac{2}{a} N \langle E \rangle \approx \frac{2}{a} N \frac{kT}{2} = \frac{1}{a} NkT$$

өрнегін табамыз. Бұл кәдімгі идеалды газ үшін бірөлшемді теңдеуі  $PV = NkT$ .

### 3.4 Гармоникалық осциллятор

#### 3.4.1 Толқындық функция және Эрмит полиномдары

Бірөлшемді осциллятор:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

гамильтонианымен сипатталады, мұндағы  $m$  – масса және  $\omega$  – бұрыштық жылдамдық, олар – тұрақтылар. Шредингер теңдеуін

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi = 0$$

айнымалыларды алмастыру жолымен жеңілдетуге болады. Ол үшін

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \rightarrow x$$

және жаңа параметр енгізу арқылы:

$$\epsilon \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} > 0,$$

осыдан соң енді энергия  $\hbar\omega/2$  бірліктерінде өлшенетін болады. Өлшемдік тұрақтылары ( $x$  және  $E$ ) есептің соңында өлшемдік тұрғысынан жеңіл қалпына келтіріледі. Ал  $x$ -тің үлкен мәндері үшін  $\psi'' \sim x^2\psi$  болғандықтан,  $\psi$  толқындық функцияның асимптотикадағы тәртібі:

$$\psi \sim \text{көпмүше} \cdot e^{-x^2/2}$$

болады. Шешімін

$$\psi(x) = \chi(x)e^{-x^2/2}$$

түрінде іздейміз, онда  $\chi$  үшін теңдеудің түрі

$$\chi'' - 2x\chi' + (\epsilon - 1)\chi = 0 \quad (3.26)$$

болады. Толқындық функция нөл нүктесінде регулярлық болуы қажет, сондықтан  $\chi$ -ті дәрежелік қатарға жіктелік:

$$\chi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots$$

Осыны (3.26) формуласына қойып,

$$\begin{aligned} 2a_2 - (1 - \epsilon)a_0 &= 0; \\ 6a_3 - (3 - \epsilon)a_1 &= 0; \\ &\dots \quad \dots \\ (n+2)(n+1)a_{n+2} - (2n+1 - \epsilon)a_n &= 0; \\ &\dots \quad \dots \end{aligned}$$

теңдеулер жүйесін аламыз. Бірінші мүшені  $a_0 \neq 0$  деп қабылдайық. Осы жағдайда  $a_2, a_4, \dots$ , коэффициенттері үшін:

$$\omega^{(\text{жүйн})}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} x^{2m}.$$

рекурренттік қатынасын табамыз. Қатар шекті де, шекті емес те болуы мүмкін. Екінші жағдай үшін  $\omega^{(\text{жүйн})}(x)$  асимптотикалық тәртібін  $n$ -нің үлкен мәндеріндегі  $a_{2m}$  тәртібінен жеңіл анықтауға болады

$$\begin{aligned} \frac{a_{n+2}}{a_n} &\sim \frac{2}{n}, & a_{2m+2} &\sim \frac{1}{m!}; \\ \psi(x) &= e^{-x^2/2} \omega(x) \sim e^{+x^2/2}. \end{aligned}$$

Бұдан толқындық функцияны нормалау мүмкін еместігін көреміз. Сондықтан, нормаланған өзіндік функцияларды алу үшін қатарымыз шекті, яғни  $\omega$  полином болуы қажет. Осы мүмкін болуы үшін  $n$ -нің кейбір бүтін мәндері үшін келесі шарт  $2n+1-\epsilon=0$  орындалуы керек. Осылайша,  $\epsilon$  шамасы бүтін болу шартын жазамыз:

$$\epsilon = 4m + 1, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

Көңіл аударыңыз: энергияның мәндерінде ( $E = \epsilon \hbar \omega / 2$ ) тақ мүшелері қатарды үзе алмайды, ал бұл толқындық функцияның нормаланбауына әкелуі мүмкін. Алайда нормаланатын шешімді алудың жолы жеңіл, ол үшін барлық тақ коэффициенттерді нөлге теңестірсе болғаны. Бұл рекурренттік коэффициенттерімен де үйлесімде. Осылайша,

$$\psi^{2n}(x) = e^{-x^2/2} \sum_{m=0}^n a_{2m} x^{2m}, \quad \epsilon = 2n+1, \quad n = 0, 2, 4, \dots \quad (3.27)$$

жұп нормаланатын толқындық функцияны аламыз.

Егер  $a_0 = 0$  деп жорамалдасақ, онда рекурренттік қатынастардағы барлық жұп коэффициенттері нөлге айналады. Осы жағдайда  $a_1$  жоғалып кете алмайды, себебі кері жағдайда барлық функциялар  $\omega(x)$  нөлге тең болады. Осылайша, таза тақ шешімдерге келеміз:

$$\omega^{(\text{так})}(x) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m+1} x^{2m+1}, \quad a_1 \neq 0.$$

Нормалану шарты болып осы жағдайда да қатарымыздың  $n$ -нің шекті мәнінде әрі  $2n+1-\epsilon=0$  тақ болғанда үзіледі. Энергия үшін:

$$\epsilon = 4m + 3, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

теңдігін аламыз. Энергияның тақ деңгейлері:

$$\psi^{2n+1}(x) = e^{-x^2/2} \sum_{m=0}^n a_{2m+1} x^{2m+1}, \quad \epsilon = 2n+1, \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (3.28)$$

толқындық функцияларымен өрнектеледі, мұндағы барлық коэффициенттер рекурренттік қатынастардан анықталады. Ортақ нормалаушы көбейткіш ең соңғы кезекте есептеп табылады.

(3.27) және (3.28) шешімдерінің комбинациясынан біз сызықтық осциллятор үшін энергия деңгейлерін кванттаудың әйгілі өрнегін және сәйкес келетін өзіндік функцияларын аламыз:

$$E_n = \omega \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.29)$$

Гармоникалық осциллятор энергиясының деңгейлері бірдей қашықта (эквидистанттық) болу фактісі физика үшін іргелі мағынаға ие. Бұл бізге келесі формализмді (төменде қараңыз) интерпретациялауға және оны құруға мүмкіндік береді:  $n$ -ші қозған күйді  $n$  әсерлеспейтін фонндардың күйі сияқты сипаттай аламыз. Сонымен қатар әрбір фонның энергиясы  $\hbar\omega$ -ға тең. Электромагнитік өріс тербелісінің дербес жағдайы – осы жағдайда фоннды *фотон* деп атайды (1-тарауда талдағанбыз). Мұндай жеңілдету қатты денелер физикасындағы, элементарлық бөлшектердегі және т.б. еркіндік дәрежелері көп болатын бөлшектер үшін негіз қалаушы болады.

Энергияның өзіндік күйлерін тізбектей табу үшін күйінің номері  $n$  болатын  $\omega$  полиномы үшін теңдеудің түрі:

$$H_n'' - 2xH_n' + 2nH_n = 0 \quad (3.30)$$

болатынын көрсету пайдалы, бұл – Эрмит теңдеуі деп аталады. Оның шешімдері Эрмит полиномдары болады.

Эрмит полиномдарын оны генерациялайтын функциялар арқылы анықтауға болады

$$S(x, s) = e^{-s^2 + 2sx} = e^{x^2 - (s-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(x), \quad (3.31)$$

мұндағы  $s$  – параметр.  $\partial S / \partial x$  туындысын жазудың екі тәсілін салыстырып, келесі рекурренттік формуланы аламыз:

$$H'_n = 2nH_{n-1},$$

сол сияқты  $\partial S / \partial s$  туындысын аналогиялық қарастыру тағы да бір рекурренттік қатынасты береді:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}.$$

(3.30) теңдеуін осы екі қатынастың комбинациясынан алуға болады. Айқын формуласы (3.31)-ден жеңіл табылады:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Туындыларды есептеп

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, & H_1(x) &= 2x, & H_2(x) &= 4x^2 - 2, & H_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, & \dots & & \dots & & \dots & \end{aligned}$$

олар рекурренттік қатынастардың нәтижелерімен сәйкес келетінін көреміз. Эрмит полиномдары ортогональды және:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \delta_{n,m} \sqrt{\pi} 2^n n!$$

шарттарын қанағаттандырады. Мұны

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} S(x, s) S(x, t) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x)$$

өрнегін зерделеудің арқасында көрсетуге болады. Нормалаушы тұрақтыны ескеріп,  $n$ -ші күйдің өзіндік функциясын жазамыз:

$$\psi_n(x) = C_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} = C_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (3.32)$$

мұндағы

$$C_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!}\right)^{1/2} = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2}; \quad \alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

Негізгі күйдің толқындық функциясының түрі Гаусс таралуымен сәйкес келеді:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad (3.33)$$

ал оның энергиясы мынаған тең:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Оны *нөлдік тербеліс энергиясы* деп атайды. Осылайша, нөлдік тербеліс энергиясы (оны жиі *вакуум энергиясы* деп те атайды) Гейзенбергің анықталмағандық принципі рұқсат беретін кванттық тербелістің минимумын білдіреді. Шектік облыста (демек,  $\Delta x$  шектелген) табылатын бөлшектің импульсі нөлдік болмайды, себебі оның кинетикалық энергиясы нөлге тең бола алмайды.<sup>3</sup> Нөлдік тербеліс энергиясы да, сол сияқты негізгі күйдің толқындық функциясы да  $\sqrt{\hbar/m\omega}$  Гейзенбергің анықталмағандық қатынасының көмегімен түсіндіруге болады. Ол үшін негізгі күйде  $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar/2$  көбейтіндісі минималды деп жорамалдайық. Алдымен  $\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2$ ,  $\langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2$  теңдіктері орынды деп, содан соң  $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$  гамильтонианының орташа мәнін минималдау арқылы  $E_0 \approx (1/2)\hbar\omega$  болатынына көз жеткіземіз.

Іс жүзінде  $x$ ,  $p$ ,  $x^2$  және басқа да операторлардың матрицалық элементтерін есептеп табу пайдалы. Мысалы,

$$x_{nm} = \langle n|x|m \rangle \equiv \int dx \psi_n^*(x) x \psi_m(x),$$

$$(x^2)_{nm} = \langle n|x^2|m \rangle \equiv \int dx \psi_n^*(x) x^2 \psi_m(x).$$

<sup>3</sup> Нөлдік тербеліс энергиясы бақыланатын қызықты эффекттерге әкеледі (мысалы, Казимир эффектсіне): кеңістіктің қандай да шектелген облысына еркіндік дәрежесі шексіз болатын жүйені (мысалы, кванттық электромагниттік өрісін) орналастырған кезде.

Егер генерациялайтын функцияларды пайдаланатын болсақ, оларды жеңіл анықтауға болады:

$$x_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{n+1}{2}}, & \text{егер } m = n+1, \\ \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{n}{2}}, & \text{егер } m = n-1, \end{cases} \quad (x^2)_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}, & \text{егер } m = n+2, \\ \frac{1}{\alpha^2} \sqrt{\frac{n(n-1)}{4}}, & \text{егер } m = n-2, \\ \frac{1}{\alpha^2} \frac{2n+1}{2}, & \text{егер } m = n, \end{cases}$$

мұндағы

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

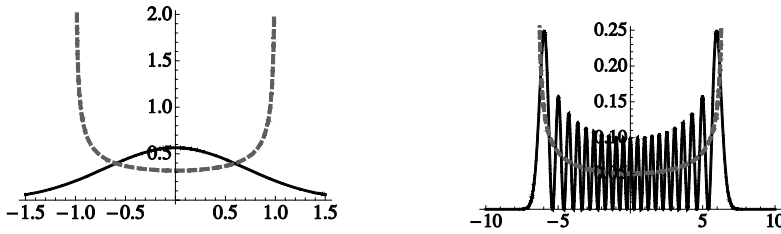
Аналогиялық түрде

$$p_{mn} = \langle m|p|n \rangle = -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\delta_{m,n-1} \sqrt{n} - \delta_{m,n+1} \sqrt{n+1}).$$

Кванттық механикалық және классикалық осцилляторлардағы бөлшектің  $(x, x+dx)$  анықталған облысындағы табылуының ықтималдылығын салыстыру – өнегелі мысал. Кванттық механикада ондай ықтималдылық  $|\psi_n(x)|^2 dx$ -пен анықталады. Ал классикалық осциллятор үшін тербелістің көптеген саны бойынша орташаландырып, бөлшектің сол облыстағы табылатын уақыт интервалы қарастырылады. Осылайша, ықтималдылық  $x$ -тің маңайындағы бөлшектің жылдамдығына кері пропорционал

$$p_c(x) dx = 2 \frac{dt}{T} = \frac{2}{T} \frac{dt}{dx} dx = \frac{2}{T} \frac{dx}{v},$$

мұндағы  $T$  – толық тербелістің периоды. 3.20-суретте осындай салыстыру көрсетілген. Суреттен көріп отырғанымыздай, егер қатты қозған күйлердің шыңдары мен ойпаттарын тегістейтін болсақ, онда кванттық пен классикалық механикалардың нәтижелері жақсы үйлесімде болады. Алайда, негізгі күй үшін нәтижелерінің айырмашылығы түбегейлі.



**3.20-сурет.** Классикалық (пунктирлік қисық) және кванттық механикадағы  $x$  нүктесінің маңайындағы  $n=0$  және  $n=20$  жағдайлары үшін бөлшек табылуының ықтималдылығы

### 3.4.2 Жарату және жою операторлары

Гармоникалық осцилляторды сипаттаудың әсем әдісін қарастырайық. Осы орайда жою (аннигиляция) операторын

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p \quad (3.34)$$

және оның эрмиттік түйіндес операторы – жарату операторын

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p \quad (3.35)$$

енгізейік. Кері түрлендіруді келтірейік:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger); \quad p = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a - a^\dagger).$$

Ал  $a$  және  $a^\dagger$  операторларының коммутаторын табу үшін  $x$  және  $p$  операторларының коммутациялық қатынасын пайдаланамыз, нәтижесінде:

$$[a, a^\dagger] = 1. \quad (3.36)$$

$a$  және  $a^\dagger$  операторларының терминдерінде гамильтонианның түрі өте қарапайым болады:

$$H = \frac{\omega\hbar}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a) = \omega\hbar\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right). \quad (3.37)$$

Мұнда біз (3.36) коммутаторын қолдандық. Енді  $x$  және  $p$  операторларының белгілі матрицалық элементтерін пайдаланып,  $a$

және  $a^\dagger$  операторларының нөлдік емес болып тек

$$\langle n-1|a|n\rangle = \sqrt{n}; \quad \langle n+1|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}$$

матрицалық элементтері ғана табылады ( $n=0,1,2,\dots$ ). Немесе олардың эквивалент

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (3.38)$$

түрлерін жазайық. Бұдан

$$a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \quad (3.39)$$

шығады.

*Бөлшектер санының* (толтыру сандары) операторын  $\mathcal{N} \equiv a^\dagger a$  енгізейік. Онда гамильтонианның және оның өзіндік мәндері қарапайым түрде жазылады:

$$H|n\rangle = \omega\hbar\left(\mathcal{N} + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle,$$

әлбетте, алдындағы табылған нәтижелермен бірдей болады. Әрине,  $n$ -ші  $|n\rangle$  өзіндік күйді енді  $n$  фонндық күй ретінде интерпретациялауға болады.  $|0\rangle$  негізгі күйде фонон болмайды.  $a^\dagger$  жарату операторы әсер еткен соң фонон пайда болады, ал  $a$  операторының әсерінен соң бір фонон жойылады. Бөлшектер санының операторы  $\mathcal{N} \equiv a^\dagger a$  фонндар санын көрсетеді. Қарапайым гармоникалық осцилляторда энергиясы  $\hbar\omega$  болатын фононның жалғыз түрі бар.

Жаңа формализмде гармоникалық осциллятор үшін негізгі нәтижелерді гамильтонианның (3.37) өрнегін пайдаланып, қайта жаңғыртуға болады. Алдымен энергияның спектрі

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

облысында жататынын атап өтеміз, себебі  $a^\dagger a$  операторының орташа мәндері теріс емес. Егер энергияның өзіндік мәні  $E$ -ге ( $E > \hbar\omega/2$ ) сәйкес келетін  $|E\rangle$  нормаланған өзіндік күйі болса

$$Ha|E\rangle = aH|E\rangle + [H, a]|E\rangle = Ea|E\rangle - \hbar\omega a|E\rangle = (E - \hbar\omega)a|E\rangle,$$

онда нормасы оң болатын, энергиясы  $(E - \omega\hbar)$ -қа тең өзге өзіндік күйі  $a|E\rangle$  табылады. Демек, біз негізгі күйдің бар болуын және оның

$$a|0\rangle = 0, \quad \langle 0|0\rangle = 1, \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

шарттарын қанағаттандыратынын жорамалдауымыз қажет. Кері жағдайда энергиялары  $E, E - \hbar\omega, E - 2\hbar\omega, \dots$  қатары мәндері теріс болатын энергияларға әкелуі мүмкін.

Негізгі күйге жарату операторымен әсер етіп, энергияның (нормаланған) өзіндік күйлерін табуға болады

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad n=1,2,\dots, \quad H|n\rangle = \omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle.$$

(3.38) формуласын пайдаланып,  $x$  және  $p$  операторларының және олардың дәрежелерінің барлық матрицалық элементтері жеңіл есептеп табылады.

### Когеренттік күйлер

Жарату және жою операторлар формализмінің маңызды қосымшасы *когеренттік күйлер* болып табылады. Олар  $x$  және  $p$  анықталмағандықтары көбейтіндісінің ең минималдық мәнін қабылдайтын ең ықшам толқындық пакеттерді береді. Когеренттік күй дегеніміз – классикалық бөлшекті еске салатын ең жақын толқындық пакет.

Когеренттік күйді жою операторының өзіндік күйі ретінде анықтауға болады:

$$a|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle, \quad (3.40)$$

мұндағы  $\beta$  – комплекстік сан. Енді  $|\beta\rangle$  күйін құрастыру үшін унитарлық операторын қарастырамыз:

$$U(\beta) = e^{\beta a^\dagger - \beta^* a}.$$

Онда:

$$|\beta\rangle = U(\beta)|0\rangle,$$

мұндағы  $|0\rangle$  – негізгі күй, ал  $a|0\rangle = 0$ .

$$aU(\beta) = U(\beta)(a + \beta) \quad (3.41)$$

теңдеуін пайдаланып (3.40) теңдеуін<sup>4</sup> жеңіл тексере аламыз. Бәйкер-Кэмпбэлл-Хауздорф-Вейль формуласын пайдаланайық:

$$e^X e^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]}. \quad (3.42)$$

Расында, егер  $[X, Y]$  коммутаторы  $c$  санына тең болса (яғни, егер ол барлық басқа операторлармен коммутациялайтын болса), онда  $U$  унитарлық операторын

$$U(\beta) = e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta a^\dagger} e^{-\beta^* a}$$

түрінде жазуға болады. Осылайша

$$|\beta\rangle = e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta a^\dagger} |0\rangle.$$

Экспонентаны қатарға жіктеп

$$|\beta\rangle = \sum_n A_n |n\rangle, \quad A_n = e^{-|\beta|^2/2} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} \quad (3.43)$$

түрінде жазуға болады. Ал  $n$  фононның когеренттік күйде болуының ықтималдылығы тең:

$$P_n = |\langle n|\beta\rangle|^2 = e^{-|\beta|^2} \frac{|\beta|^{2n}}{n!}. \quad (3.44)$$

Бұл – Пуассон таралуы, ал толтыруының орташа мәні:

$$\langle \beta | a^\dagger a | \beta \rangle = |\beta|^2.$$

Бұдан келесілерді көрсету қиын емес:

(i) Анықталмағандардың  $\langle (\Delta x)^2 \rangle \cdot \langle (\Delta p)^2 \rangle$  көбейтіндісі  $\hbar^2/4$ -ға тең болатын ең минимум мәнін қабылдайды;

(ii) Толқындық функцияның  $x$ -көрінісіндегі түрі

$$\psi(x) = \langle x|\beta\rangle = \mathcal{N} \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2}{4D} + i \frac{p_0 x}{\hbar} \right] \quad (3.45)$$

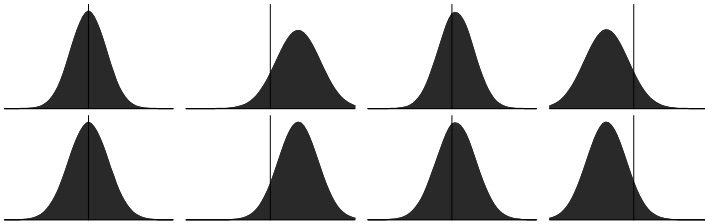
болады, мұндағы

<sup>4</sup> Жаттығу. (3.41) теңдігін тексеріңіздер.

$$\begin{aligned}
 x_0 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\beta + \beta^*) \equiv A \cos \varphi, \\
 p_0 &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\beta^* - \beta) = m\omega A \sin \varphi, \\
 \beta &= |\beta| e^{-i\varphi}, \quad A = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\beta|, \\
 D &= \langle (\Delta x)^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}.
 \end{aligned}
 \tag{3.46}$$

(3.40) теңдеуін интегралдап, (3.45)  $x$ -көрінісінде жеңіл аламыз (қараңыз [Davydov (1965)]). Ал  $x$ -көрінісіндегі когеренттік күй жалпыланған толқындық пакеттерден айырмашылығы, мысалы, енінің мәнінде  $D = \frac{1}{2}$  ( $m = \omega = \hbar = 1$  бірліктерінде).

Когеренттік күйлерде «сығылған күйлері» деп аталатын қызықты жалпылаулар бар. Жұырдағы зерттеулер кванттық оптикамен байланысын көрсетті. Жалпы сығылған күйлердегі  $\langle (\Delta x)^2 \rangle$  және  $\langle (\Delta p)^2 \rangle$  анықталмағандықтары өзгереді, ал олардың көбейтіндісі минималды болып қала береді.



**3.11-сурет.** Гармоникалық осциллятордағы гаустік толқындық пакет үшін уақыт бойынша дамуының суреттері. Бірінші қатар – жалпы пакет, екінші қатар – когеренттік күй. NB-3.4 қараңыз

Когеренттік күйдің уақыт бойынша дамуын талдау жеңіл. Себебі  $|n(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n(0)\rangle$  болғандықтан, оның салдары

$$|\beta(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{-|\beta|^2/2} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} |e^{-i\omega t} \beta\rangle
 \tag{3.47}$$

болады. Басқа сөзбен айтатын болсақ, когеренттік күй уақыт

бойынша өзгермейді:  $\beta$  параметрінің тек фазасы  $e^{-i\omega t}$  ғана өзгереді. (3.46) формуладан көретініміз, жүйенің дамуын массалық орталық пен оның импульсінің өзгерісі ретінде:

$$x_0(t) = A \cos(\varphi + \omega t) \quad p_0(t) = m\omega A \sin(\varphi + \omega t) \quad (3.48)$$

өрнектеуге де болады. Бұл жерде таңғаларлық ештеңе де жоқ, себебі классикалық осциллятордың қозғалыс теңдеуі ғой! Пакеттің ені  $D = \langle (\Delta x)^2 \rangle$  тұрақты болғандықтан, когеренттік күй классикалық осциллятор сияқты, яғни пішінін өзгертпей тербеледі, ал толқындық пакет пульстеп  $\left( D \neq \frac{1}{2} \right)$  соғып тұрады. Осы тараудың соңындағы 3.4-сандық талдауды қараңыз.

### 3.5 Шашырау есептері және туннельдік эффект

Бірөлшемді жағдайларды қарастыруымызды жалғастыра отырып, үздіксіз күйлердің физикасын зерттеуге көшейік. Бұның маңыздылығы энергияның спектрінде емес (көпшілігінде олар қарапайым  $\infty > E \geq 0$ ), сонымен байланысқан физикалық құбылыстарын, мысалы, шашырау, туннельдік эффект және т.б. зерттеулері. Келесі жағдайды қарастырайық:  $x$  шектік облыста потенциал нөлдік емес, алайда, асимптотикада ( $\infty$  және  $x \rightarrow \infty$  үшін) бөлшек еркін болады. Онда  $\hat{\mathbf{k}}$  бірлік векторының бағытымен қозғалатын еркін бөлшек жазық толқынмен сипатталады:

$$\psi_{\mathbf{k}} = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}.$$

$A$  коэффициенті нормалауға тәуелді. Токтың тығыздығы:

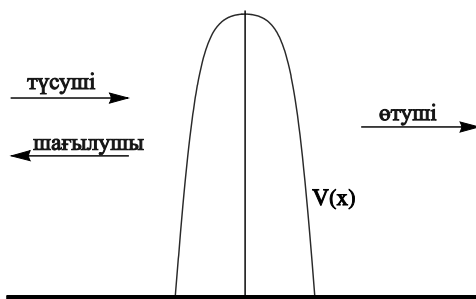
$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

қозғалыс бағытына перпендикуляр бірлік ауданнан өтетін бөлшектердің (орташа) санын көрсетеді, сондықтан нормалау ағын бірлігімен байланысты болады:

$$\psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{v} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad v = \frac{|\mathbf{p}|}{m} \equiv \frac{\hbar |\mathbf{k}|}{m}.$$

Бірөлшемді жағдай үшін  $|\psi|^2$  – бірлік ұзындыққа келетін ықтималдылық, сондықтан  $j$  ағыны – бірлік уақыттағы бөлшектер санының мөлшері болып табылады. Бірөлшемді жағдайда тек екі жазық толқын болады: оңға қозғалатын  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$  және солға қозғалатын  $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ .

Айтылған жағдай 3.12-суретінде көрсетілген.



3.12-сурет. Туннельдік эффект: түсуші толқын тосқауылдан өтуші және шағылушы толқындарға бөлінеді

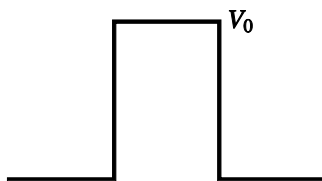
Ерекше жағдайға көңіл бөлейік. Бөлшектерді физикалық дәлірек сипаттау үшін толқындық пакетті пайдаланған дұрысырақ болады. Стационарлық күйлерді сипаттауға пайдаланатын осы әдіспен толқындық пакет формализмінің байланысын 20.4.1-бөлімшесінде қарастырамыз.

Алдымен бірнеше қарапайым есептерді талдайық.

### 3.5.1 Потенциалдық тосқауыл және туннельдік эффект

Бірінші мысал ретінде потенциалдық тосқауылды қарастырайық (3.13-суретті қараңыз)

$$V = \begin{cases} 0, & \text{егер } x > 0, \quad (\text{I}), \\ V_0 > 0, & \text{егер } 0 \leq x \leq a, \quad (\text{II}), \\ 0, & \text{егер } x < 0, \quad (\text{III}). \end{cases}$$



3.13-сурет. Потенциалдық тосқауыл

Түсуші бөлшек  $x = -\infty$ -тен қозғалады деп пайымдайық. Онда ақтық күй  $x = +\infty$  облысында таралатын өтуші толқыннан, кері (сол жақ) бағытта таралатын шағылушы толқыннан тұрады. Біз негізге алған стационарлық әдісімізде уақытқа тәуелсіз Шредингер теңдеуінің

$H\psi = E\psi$  және оған сәйкес шекаралық шарттарды ескеріп, шешімін табуымыз қажет. Өртүрлі  $E > V_0$  және  $E < V_0$  жағдайларды жеке қарастырайық.

**1-жағдай:**  $E > V_0$

Тосқауылға сол жақтан түсуші классикалық бөлшектің энергиясы тосқауыл биіктігінен артық болса, онда ол тежелсе де, бірақ өзінің жолын жалғастыра береді. Кванттық механикада Шредингердің жалпы шешімінің түрі:

$$\begin{aligned}\psi_I &= e^{ikx} + Ae^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}; \\ \psi_{II} &= Be^{ik'x} + B'e^{-ik'x}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}; \\ \psi_{III} &= Ce^{ikx}\end{aligned}\tag{3.49}$$

болады. (3.49) формуласында келесі шекаралық шарттарды орнаттық: тосқауылдың оң жағында шешім тек өтуші толқынды, ал тосқауылдың сол жағында – түсуші және шағылушы толқындарды ескереді. Түсуші толқынның алдындағы коэффициентті бірге теңестірдік. Әлбетте, егер  $A = 0$  қабылдасақ, онда бос (тривиалды) шешімін аламыз. Бұдан энергия тіпті, тосқауыл биіктігінен артық болған жағдайда да шағылуының ықтималдылығы нөлге тең емес деген қорытынды жасауға болады.

Шындығында, үзіліссіздік шартынан I және II облыстары үшін:

$$1 + A = B + B', \quad ik(1 - A) = ik'(B - B')$$

өрнектерін аламыз, ал II және III облыстары үшін:

$$\begin{aligned}Be^{ik'a} + B'e^{-ik'a} &= Ce^{ika} \equiv C'; \\ ik'(Be^{ik'a} - B'e^{-ik'a}) &= ikCe^{ika} = ikC'.\end{aligned}$$

Осы теңдеулер жүйесін шешу жеңіл, ол үшін  $B$  және  $B'$  шығарып тастау қажет. Нәтижесінде алатынымыз:

$$\begin{aligned}A &= -\frac{i(k^2 - k'^2)\sin k'a}{2kk'\cos k'a - i(k^2 + k'^2)\sin k'a}; \\ C' = e^{ika}C &= \frac{2kk'}{2kk'\cos k'a - i(k^2 + k'^2)\sin k'a}.\end{aligned}$$

Енді өту коэффициентін

$$D \equiv \frac{|\mathbf{j}_{\text{өту}}|}{|\mathbf{j}_{\text{түс}}|} \quad (3.50)$$

және шағылу коэффициентін есептейік

$$R \equiv \frac{|\mathbf{j}_{\text{шағ}}|}{|\mathbf{j}_{\text{түс}}|} \quad (3.51)$$

мұндағы  $j_{\text{түс}} = k\hbar/m$ ,  $j_{\text{өту}} = k\hbar|C|^2/m$  және  $j_{\text{шағ}} = k\hbar|A|^2/m$  сәйкесінше түсуші, өтуші және шағылушы токтардың тығыздығы. Сонымен,

$$D = |C|^2 = |C'|^2, \quad R = |A|^2$$

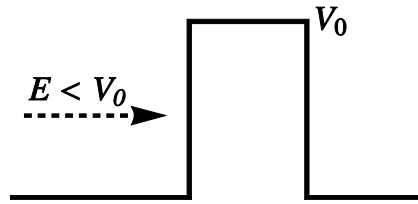
табамыз, мұндағы

$$D = \frac{4k^2k'^2}{4k^2k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a},$$

$$R = \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a}{4k^2k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a}.$$

### Ескертулер

- $D+R=1$ , толық ықтималдылықтың талабына сәйкес.
- Жалпы, күтілгендей  $R \neq 0$ , ал классикалық бөлшек үшін  $D=1$ ,  $R=0$ .
- Түсуші бөлшек энергиясының кейбір мәндері үшін  $(\sqrt{2m(E-V_0)}a/\hbar = n\pi, n=1,2,\dots)$  толық өтудің ықтималдылығы бар ( $D=1$ ). Бұл үшөлшемді кеңістіктегі *Рамзауэр-Таунсенд эффектісінің* аналогы.
- Жоғары энергиялар жағдайында  $E \gg V_0$ , келесі шектер жүзеге асырылады:  $D \rightarrow 1, R \rightarrow 0$ .



3.14-сурет.

**2-жағдай:**  $E < V_0$ 

Осы жағдайда классикалық бөлшектің шағылуы жүз пайыз ( $D=0; R=1$ ); ал кванттық бөлшектің тәртібі мүлдем өзгеше болады. Өр облыстар үшін шешімдердің түрлері:

$$\psi_I = e^{ikx} + A'e^{-ikx}; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar};$$

$$\psi_{II} = B'e^{-\kappa x} + B'e^{\kappa x}; \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar};$$

$$\psi_{III} = Ce^{ikx}.$$

Көңіл аударыңыздар: екінші облыстағы бөлшектің тәртібі нақты экспоненталық типті. Ал  $x = 0$  және  $x = a$  нүктелеріндегі үзіліссіздік шарты жоғарыдай  $D$  және  $R$  анықтау үшін қажет  $A'$  және  $C$  коэффициенттері арқылы шешіледі.

Шындығында, осындай теңдеулер жүйесі шешімінің процедурасы таза алгебралық болады және осы есептеулерді қайталаудың ешқандай қажеттілігі жоқ. Осы  $E < V_0$  жағдайында коэффициенттерді табу үшін тек:

$$k' \rightarrow ik$$

алмастыруды енгізе болғаны. Бірақ тригонометриялық коэффициенттердің орнына гиперболалық функцияларды  $\sin k'a \rightarrow \operatorname{sh} ka$  және  $\cos k'a \rightarrow \operatorname{ch} ka$  пайдалану қажет. Сонда

Өтудің және шағылудың ықтималдылықтары сәйкесінше,

$$D = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a};$$

$$R = \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \operatorname{sh}^2 \kappa a}$$

өрнектерімен анықталады.

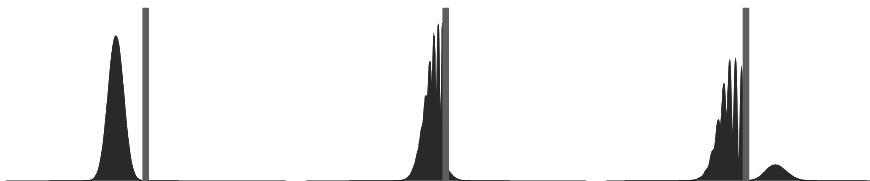
### Ескертулер

- Осылайша, классикалық физика тұрғысынан потенциалдық тосқауылдан өтуі үшін түсуші бөлшектің энергиясы жеткіліксіз болса да, біз  $D \neq 0$  болатынын, оған қоса  $D > 0$  екендігін көрсеттік. Бұл – тек кванттық механикалық бөлшектер үшін тән атақты «туннельдік эффектiсi».
- Шектік жағдайда  $V_0 \rightarrow \infty$  және/немесе  $a \rightarrow \infty$  болғанда өту ықтималдылығының тәртібі экспоненциалды кемитін болады:

$$D \sim e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}a/\hbar}.$$

Егер классикалық «әсермен»  $\int dx |p|$  салыстыратын болсақ, онда формуладан көрегініміздей кванттық механикалық «аналогы» екі есе артық.<sup>5</sup>

Мұқият оқырман  $j_{\text{түс}}$  және  $j_{\text{шағ}}$  есептеулерінде (3.49) теңдеуіндегі интерференциялық мүшелерін ескермегенімізді байқаған болар, әрине. Есепті дәлірек шешу үшін бөлшекті толқындық пакет (жазық толқындардың сызықтық комбинациясы) ретінде қарастыру және уақыт бойынша дамуын зерттеу қажет; *20.4-бөлімді қараңыз.*



3.15-сурет. Тосқауылға түсуші толқындық пакеттің үш суреті (NB-3.3 анимациясынан)

<sup>5</sup> Дәлірек айтсақ, туннельдік эффекттің аналитикалық жалғасы Евклидтік уақытта  $t = -it_E$  өтетін қозғалыстың классикалық әсермен сипатталады.

### 3.5.2 Дельта-функция потенциалы

Потенциалдық шұңқырдың немесе потенциалдық тосқауылдың түрі  $\delta$ -функция типтес болған екі жағдайдың да қызықты болуының себебі, олар үшін есеп дәл шешіледі. Ендеше жалпы теория мен идеяны, сонымен қатар сингулярлық физикалық әсерлесудің ерекше түрін де сынақтан өткізу үшін ыңғайлы.

#### Жалпы ережелер: үзілістік шарты

Енді  $\delta$ -потенциалындағы бөлшектің қозғалысын қарастырайық:

$$H = \frac{p^2}{2m} - g\delta(x). \quad (3.52)$$

Ал  $x = 0$  нүктесіндегі ерекшелігіне байланысты толқындық функция үшін сингулярлықтың екі жағынан да қанағаттандыратын шарты айрықша сақтықты талап етеді. Ықтималдылық тығыздығы үздіксіздігінің талабына сәйкес:

$$\psi(x)|_{x \rightarrow 0^+} = \psi(x)|_{x \rightarrow 0^-}, \quad \psi_-(0) = \psi_+(0).$$

Толқындық функцияның бірінші туындысы үшін шарты  $\delta(x)$ -тың сингулярлығын ескеруі қажет. Расында, Шредингер теңдеуін

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - g\delta(x)\psi = E\psi$$

$[-\epsilon, \epsilon]$  интервалында интегралдап келесі теңдікті аламыз

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)) - g\psi(0) = O(\epsilon).$$

Егер енді  $\epsilon \rightarrow 0$  шегін қарастыратын болсақ, онда толқындық функция туындылары үшін сәйкестік шарты болып келесі

$$\boxed{\psi'_+(0) - \psi'_-(0) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0)} \quad (3.53)$$

өрнегі табылады. Егер Шредингер теңдеуіне тікелей толқындық функцияның:

$$\psi(x) = \psi_-(x)\theta(-x) + \psi_+(x)\theta(x) \quad (3.54)$$

түрін әкеліп қоятын болсақ, онда тап сондай шартқа келеміз, мұнда  $\theta'(x) = \delta(x)$  екендігін пайдаландық. Яғни қосымша талап қою

арқылы, енді (3.54) функциясы барлық жерде сәйкестік шартын қанағаттандырады, оған  $x = 0$  нүктесі де кіреді.

### Дискреттік спектр (байланысқан күй)

Нормаланған шешімнің тәртібі  $x > 0$  және  $x < 0$  үшін сәйкесінше  $e^{\mp \kappa x}$  болуы керек, мұндағы  $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$ . Квантталу шарты

$$\kappa = \frac{mg}{\hbar^2}, \quad E_0 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2} \quad (3.55)$$

(3.53) теңдеуінен шығады. Осы жағдай үшін тек бір ғана байланысқан күй болады, оның нормаланған күйі

$$\psi(x) = \sqrt{\kappa} [\theta(-x)e^{\kappa x} + \theta(x)e^{-\kappa x}]. \quad (3.56)$$

Өлбетте, байланысқан күйі (3.52) өрнегіндегі тек  $g > 0$  тартылыс дельта-потенциалында ғана болады.

### Континуум

Ал  $E \geq 0, k = \sqrt{2mE}/\hbar^2$  үшін:

$$\psi(x) = \theta(-x)[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}] + \theta(x)[Ce^{ikx} + De^{-ikx}]. \quad (3.57)$$

Енді I және II облыстарының шекарасындағы үзіліссіздік шартын жазайық:

$$A + B = C + D. \quad (3.58)$$

Толқындық функциясының бірінші туындысы үшін (3.53) шартынан табамыз

$$C - D = A - B + \frac{2img}{k\hbar^2}(A + B) = (1 + 2i\alpha)A - (1 - 2i\alpha)B, \quad (3.59)$$

мұндағы

$$\alpha = \frac{mg}{k\hbar^2} > 0. \quad (3.60)$$

Ал (3.58) және (3.59) теңдеулерін  $C$  және  $D$  қатысты шешіп,

$$C = (1 + i\alpha)A + i\alpha B,$$

$$D = -i\alpha + (1 - i\alpha)B$$

аламыз немесе

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1-i\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \equiv \Omega \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Мұндағы  $\Omega$  матрицасын

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1+i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1-i\alpha \end{pmatrix}, \quad \Omega^{-1} = \begin{pmatrix} 1-i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1+i\alpha \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

өту матрицасы деп атайды:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \Omega^{-1} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1+i\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \quad (3.63)$$

$k$ -ның кез келген нақты мәні үшін (3.63) формуласымен анықталатын коэффициенттерді ескере отырып, (3.57) теңдеуінен  $H$ -тың өзіндік күйлерін табамыз. Тартылыс ( $g > 0$ ) және тебу ( $g < 0$ ) потенциалдары үшін үздіксіз спектр бірдей болады, айырмашылығы  $\alpha$ -ның қарама-қайшы таңбасында ғана.

### Өту мен шағылу

Егер бөлшек потенциалдық тосқауылға сол жақтан  $x = -\infty$  түсетін болса, онда сәйкес келетін шекаралық шарт

$$D = 0$$

болады, яғни бөлшек тосқауылдың оң жағынан табылады және ол оң бағытта қозғалады. Өту матрицасынан

$$A = (1-i\alpha)C, \quad B = i\alpha C$$

табамыз және осы жерден шағылу және өту ықтималдылықтары үшін:

$$D = \frac{1}{1+\alpha^2}, \quad R = \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} \quad (3.64)$$

өрнектерін аламыз. Көңіл аударыңыздар: бірөлшемді дельта-потенциал үшін ықтималдылықтың мәні потенциалдың таңбасынан тәуелсіз.

### Қос дельта-потенциал

Осы нәтижелерді бір  $\delta$ -функциядан артық жағдайлар үшін жеңіл жалпыландыруға болады, мысалы, қос дельта-потенциал үшін

$$V = g[\delta(x) + \delta(x-a)]. \quad (3.65)$$

Толқындық функцияның түрі болады:

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \theta(-x) [Ae^{ikx} + Be^{-ikx}] + \theta(x)\theta(a-x) [Ce^{ikx} + De^{-ikx}] + \\ & + \theta(x-a) [Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}] \end{aligned} \quad (3.66)$$

Ендеше келесі белгілеулерді енгізіп:

$$F' = Fe^{ika}, \quad G' = Ge^{-ika}, \quad C' = Ce^{ika}, \quad D' = De^{-ika}$$

$C$  және  $D$  коэффициенттерінің  $A$  және  $B$  арқылы өрнектелгенін көреміз, сонымен қатар

$$\begin{pmatrix} F' \\ G' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-i\beta & -i\beta \\ i\beta & 1+i\beta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C' \\ D' \end{pmatrix} \equiv \Omega \cdot \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot \Omega \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix},$$

немесе

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{ika} \end{pmatrix} \cdot \Omega \cdot \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot \Omega \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (3.67)$$

мұндағы

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1-i\beta & -i\beta \\ i\beta & 1+i\beta \end{pmatrix}; \quad \beta = \frac{mg}{k\hbar^2}. \quad (3.68)$$

Ал (3.68) және (3.62) формулаларындағы екі  $\Omega$ -ның арасындағы айырмашылық потенциалдың таңбасында ((3.65) және (3.52) теңдеулерін қараңыз).

Сөзсіз, бірөлшемді дельта-потенциал жағдайынан гөрі қарастырып отырғанымыз физика тұрғысынан қызықтырақ. Шағылу және өту коэффициенттері үшін:

$$D = \frac{1}{1 + 4\beta^2 (\cos ka + \beta \sin ka)^2}, \quad R = \frac{4\beta^2 (\cos ka + \beta \sin ka)^2}{1 + 4\beta^2 (\cos ka + \beta \sin ka)^2}$$

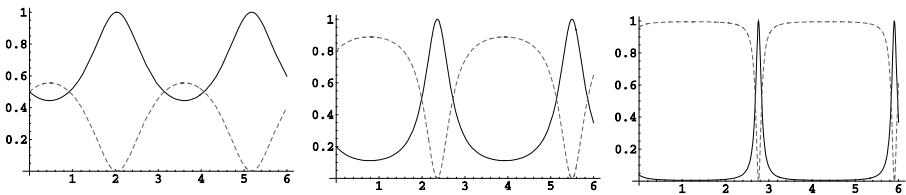
өрнектерін жазайық. Тексеру мақсатында  $a \rightarrow 0$  шегін қарастырайық. Онда нәтижесі бірөлшемді дельта-потенциалмен бірдей болуы қажет, тек алмастыруын жасау қажет. Түсуші энергияның мәні үшін нәтижесі бірөлшемді дельта-потенциалмен сапалы түрі ұқсас болады. Дербес жағдайда, күшті тебіліс (тартылыс)  $\beta \rightarrow \infty (g \rightarrow \infty)$  шегінде өту коэффициенті нөлге ұмтылады. Алайда, энергияның кейбір нақтыланған мәндерінде

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{1}{\beta}$$

толық өтуді аламыз ( $R = 0, D = 1$ )! Ал  $g \rightarrow \infty$  шегінде:

$$\lambda \approx 2a/n \quad ka \approx \pi n, \quad n=1,2,\dots$$

өрнегін аламыз және олар ені  $a$  шексіз терең потенциалдық шұңқырдағы энергияның стационар күйлеріне дәл сәйкес келеді ((3.17) теңдеуін қараңыз). Жалпы  $k$ -ның резонанстық емес мәндері үшін  $g \rightarrow \infty$  шегінде толық шағылуды аламыз ( $R \rightarrow 1, D \rightarrow 0$ ). Басқа сөзбен айтар болсақ, онда жүйе фильтр тәрізді жұмыс жасайды, мысалы, ұзындығы<sup>6</sup>  $\lambda \approx 2a/n$  болатын толқынды өткізеді, мұндағы  $n=1,2,\dots$  Жағдай 3.16-суретте көрсетілген.



**3.16-сурет.** Қос дельта-потенциал үшін өту  $D$  (тұтас сызық) және шағылу  $R$  (пунктирлі сызық) коэффициенттері:  $ka$ -ның функциясы ретінде потенциалдық күштің үш түрлі мәндері ( $\beta = 0.5, 1.0, 2.5$ ) үшін көрсетілген

$N$ -өлшемді, байланыс тұрақтысы  $g$  болатын дельта-потенциал жағдайы үшін (3.67) формуласын жеңіл жалпыландыруға болады

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-iNka} & 0 \\ 0 & e^{iNka} \end{pmatrix} \cdot \left[ \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot \Omega \right]^N \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (3.69)$$

<sup>6</sup> Осы жауап оңай түсіндіріледі. Екі барьердің арасындағы толқындар тұзақтағыдай әрлі-берлі «қыдырады». Егер сол толқындардың фазасы бірдей болса, онда оң интерференцияның арқасында олар күшейеді. Ал егер фазалары қарама-қарсы болса, онда интерференция деструктивті, яғни олар бірін-бірі сөндіреді. Жарықтың толқын ұзындығын өлшеу үшін, әдетте осы принципке негізделген Фабри-Перо интерферометрі пайдаланылады.

### 3.5.3 Шашырау есептерінің жалпы аспектілері

Енді жоғарыда келтірілген нәтижелерді жүйенің симметриясы  $\Omega$ -ға қоятын шектеулерін зерттеп, қарапайым мысалдар үшін жалпы түрін келтірейік. Артынан жалпы потенциал үшін жазамыз (3.12-суретті қараңыз).

Есепті жеңілдету мақсатында потенциалдың әсерлесу радиусы шекті  $V(+\infty) = V(-\infty) = 0$  деп қарастырайық. Шредингер теңдеуінің жалпы шешімін жазайық, оның *асимптотикасы*

$$\psi(x) = \begin{cases} ae^{ikx} + be^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ a'e^{ikx} + b'e^{-ikx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (3.70)$$

болсын, мұндағы  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Осындай шешімдер үшін асимптотикадағы токтың тығыздығы

$$\lim_{x \rightarrow \infty} j(x) = \frac{\hbar k}{m} (|a'|^2 - |b'|^2), \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} j(x) = \frac{\hbar k}{m} (|a|^2 - |b|^2)$$

өрнегімен анықталады. Токтың тығыздығы сақталады, сондықтан

$$|a'|^2 - |b'|^2 = |a|^2 - |b|^2 \quad (3.71)$$

теңдігі орын алады.

Нақтылық үшін алдымен сол жақтан (оңға қозғалатын) түсетін бөлшектің шешімін қарастырайық:

$$\psi_R(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} e^{ikx} + A_R e^{-ikx}; \quad \psi_R(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} A_T e^{ikx}. \quad (3.72)$$

Біз осындай шешім үшін жеткілікті болатын  $b' = 0$  шекаралық шартты таңдайық, оған қоса түсуші жазық толқынның коэффициентін бірге теңестірдік.  $A_T$  және  $A_R$  амплитудалары сәйкесінше тосқауылдан өтуші және шағылушы толқындардың амплитудалары екені анық. Шағылу және өту коэффициенттері

$$D = |A_T|^2, \quad R = |A_R|^2. \quad (3.73)$$

Токтың сақталу теңдеуінен (3.71) келесі

$$|A_T|^2 = 1 - |A_R|^2 \Rightarrow 1 = D + R \quad (3.74)$$

теңдіктерін аламыз. Түсуші бөлшектің тосқауылды өтуінің ықтималдылығы  $D$ -ға, ал шағылу ықтималдылығы  $R = (1 - D)$ -ға тең.

Екі естелік: біріншіден,  $V(x)$  – нақты; екіншіден, сызықтық тәуелсіз шешімінің комплексті түйіндесі  $\psi_A(x) = \psi_R^*(x)$  арқылы табуға болады, ал оның асимптотикадағы тәртібі төмендегідей:

$$\psi_A(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} e^{-ikx} + A_R^* e^{ikx}; \quad \psi_A(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} A_T^* e^{-ikx}. \quad (3.75)$$

Шредингер теңдеуінің сызықтық болуының арқасында  $x = +\infty$  бағытынан түсуші бөлшектер есебінің шешімін  $\psi_A - A_R^* \psi_R$  функциясының сызықтық комбинациясын қарастырудан табуға болады. (3.74) теңдеуін қолдана отырып, енді сол жақ бағыттағы қозғалатын бөлшектердің толқындық функциясын  $A_T^*$ -ға бөліп, одан  $\psi_L = (1/A_T^*)(\psi_A - A_R^* \psi_R)$  функциясын аламыз. Сонымен қатар осы функцияның асимптотикадағы тәртібі төмендегідей болады:

$$\psi_L(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} A_T e^{-ikx}; \quad \psi_L(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} e^{-ikx} - \frac{A_R^* A_T}{A_T^*} e^{ikx}. \quad (3.76)$$

Енді (3.76) теңдеуінен көріп тұрғанымыздай, потенциалдың сол жағында едәуір қашықтықта тек өтуші толқын ғана бар. *Осылайша, шағылу және өту коэффициенттерінің өрнектері сол жақтан түсетін бөлшек есебінің нәтижелерімен бірдей болатынын табамыз.*

Сондай-ақ потенциалдың сол жағындағы толық толқындық функциясын бір немесе бірнеше таза жазық толқындардан құрылатындай етіп

$$\begin{aligned} (1 - |A_R|^2) e^{ikx} &\xleftarrow{x \rightarrow -\infty} \psi_R - A_R \psi_A \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} A_T e^{ikx} - A_R A_T^* e^{-ikx} \\ (1 - |A_R|^2) e^{-ikx} &\xleftarrow{x \rightarrow -\infty} \psi_A - A_R^* \psi_R \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} A_T^* e^{-ikx} - A_R^* A_T e^{ikx} \end{aligned} \quad (3.77)$$

сызықтық комбинациясын құрастыруға болады. Енді жазық толқындардың екі түрі асимптотикалық облыста толық жиынтық құрайтыны айқын болған соң, осы шешімдерді екіөлшемдік векторлық кеңістігіндегі базис ретінде қарастыруға және оларды (1,0) немесе (0,1) түрінде өрнектеуге болады. Осылайша, (3.77) теңдеуімен берілген  $-\infty$  облысынан  $+\infty$  облысына өтуін біз «екіге екі матрицасы» операторының терминінде жазамыз:

$$\Omega \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/A_T^* \\ -A_R/A_T \end{pmatrix}, \quad \Omega \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -A_R^*/A_T^* \\ 1/A_T \end{pmatrix}.$$

Осыдан

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1/A_T^* & -A_R^*/A_T^* \\ -A_R/A_T & 1/A_T \end{pmatrix}, \quad (3.78)$$

мұнда біз (3.74) теңдеуін пайдаландық. Ал  $\Omega$  операторы *өту матрицасы* деп аталады. Оның қасиетін көрсетейік:

$$\det(\Omega) = \frac{1}{|A_T|^2} - \frac{|A_R|^2}{|A_T|^2} = 1. \quad (3.79)$$

Басқа сөзбен айтатын болсақ, онда токтың сақталуы  $\Omega$  матрицасының  $SL(2, \mathbb{R})$ <sup>7</sup> группасына тиісті болу талабына түрленеді. Жалпы шешім нақты болады:

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \quad (3.80)$$

(3.78) теңдеуі нақты потенциалмен үйлесімде болатын ең жалпы пішіні, дәлірек айтқанда,  $\psi$  және  $\psi^*$  бірдей энергияның шешімдері болып табылады (бұл *уақыттың кері бұрылуына* инварианттылығының салдары болатынын төменде көрсетеміз). Ал  $A_R$ ,  $A_T$  комплексті сандары (3.74) шартымен шектелген, сондықтан тек үш нақты тәуелсіз параметрлер бар. Алайда, жүйе әлдеқандай симметрияға ие болса, онда тәуелсіз параметрлердің саны келесі мысалдағыдай кемуі мүмкін.

### Жұптылық

Енді гамильтонианның жұптылыққа қатысты инвариантты  $V(x) = V(-x)$  болатын жағдайын қарастырайық. Жұптылықты түрлендіру кезіндегі инварианттылық дегеніміз: егер  $\varphi(x)$  функциясы Шредингер теңдеуінің шешімі болса, онда  $\varphi_p(x) \equiv \varphi(-x)$  тепе-теңдігі орындалуы қажет. Яғни,  $x \rightarrow -x$  алмастырғанда солға қозғалыс (3.76) шешімдері мен оңға қозғалыс (3.72) шешімдері біріне-бірі түрленуі қажет. Бұдан:

$$A_R = -A_R^* \frac{A_T}{A_T^*} \quad (3.81)$$

теңдігін аламыз. Басқаша айтатын болсақ, онда осы жағдайларда  $A_R/A_T$  қатынасы таза жорамал болады. Амплитудалары айқын түрде есептелген тікбұрышты және дельта – потенциалдары жағдайлары үшін тексеру жеңіл.  $A_T$  және  $A_R$  үшін өрнектерін

$$A_T = \cos \theta e^{i\alpha}, \quad A_R = i \sin \theta e^{i\alpha} \quad (3.82)$$

түрінде жазуға болады.

<sup>7</sup>  $SL(N, \mathbb{R})$  группасы анықтаушысы бірге тең болатын  $N \times N$  нақты матрицамен құрылатын группасын білдіреді (20.6-бөлімін қараңыз).

### 3.6 Периодтық потенциалдар

#### 3.6.1 Энергия спектрінің зоналық құрылымы

Кванттық механикалық бөлшектің периодтық потенциалындағы тәртібінің

$$V(x) = V(x+a) \quad (3.83)$$

классикалық бөлшектің қозғалысынан едәуір айырмашылығы бар (1.4-суретті қараңыз). Бұл есепті физикалық қызықты жүйенің прототипі: қатты денедегі электронның қозғалысы ретінде қарастыруға болады. Бөлшектердің энергиясы

$$0 < E \ll V_0$$

деп жорамалдайық. Мұндағы 0 және  $V_0$  потенциалдың сәйкесінше минимумы мен максимумы. Одан әрі тосқауылды өте биік ( $V_0 \gg E$ ) деп пайымдайық, ал  $n$ -ші потенциалдық шұңқырдағы энергияның деңгейлері мен өзіндік функциялары берілген:

$$E_1^{(0)}, E_2^{(0)}, \dots, E_i^{(0)}, \dots; \psi_1(x;n), \psi_2(x;n), \dots, \psi_i(x;n), \dots \quad (3.84)$$

Энергияның деңгейлері барлық потенциалдарда тектес болсын. Өзгеше айтар болсақ, онда туннельдік эффектілерді (әртүрлі потенциалдық шұңқырлардың арасындағы өтулерді) ескермейміз. Онда әрбір күй шексіз сетінеген болып шығады, ал сәйкес келетін толқындық функциялар  $\{\psi_i(x;n)\}$ ,  $n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$  әртүрлі потенциалдық шұңқырларда локальданған. Осы деңгейлердің біріне көңілімізді аударайық.

Туннельдік эффектіге байланысты  $\{\psi(x;n)\}$  локальданған толқындық функциялар гамильтонианның өзіндік күйлері болып табылмайды:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V.$$

Яғни осы базисте  $H$  диагональдық емес. Егер туннельдік эффектілер кіші (төменгі деңгейлері үшін орынды) деп пайымдасақ, онда оларды кіші ұйтқу ретінде қарастыруға болады:

$$H \{\psi(x;n)\} \approx E^{(0)} \{\psi(x;n)\} - \epsilon [\psi(x;n+1) + \psi(x;n-1)], \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (3.85)$$

мұндағы  $\epsilon$  –  $n$ -ші потенциалдан келесі потенциалдық шұңқырға

туннельденуінің амплитудасы.

(3.85) теңдеуі шексіз теңдеулер санынан құралатын жүйенің бірі болғандықтан, гамильтонианды диагональдық түріне келтіру қиын есеп болып көрінуі мүмкін. Шындығында ерекше еңбектің қажеті де жоқ:  $n$  дискреттік күйлері үшін

$$\tilde{\psi}_k(x) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikan} \psi(x; n) \quad (3.86)$$

Фурье түрлендіруін жүргізейік. Мұндағы  $k$  – нақты сандық параметр ( $k\hbar = p$  –  $n$ -ге түйіндес «тордың импульсі»). Ал  $n$  бүтін сан болғандықтан,  $ka$  тордың импульсі  $-k \in [-\pi/a, \pi/a]$  аралығындағы бұрыштық параметр. Расында (3.85) теңдеудің екі жағында  $e^{ikan}$  көбейтіп және  $n$  бойынша қосындылап, (3.86) теңдеуіндегі сызықтық комбинациялар энергияның өзіндік күйлері екенін табамыз:

$$H\tilde{\psi}_k(x) = [E^{(0)} - 2\epsilon \cos(ka)] \tilde{\psi}_k(x). \quad (3.87)$$

Яғни туннельдік эффектінің арқасында шексіз сегінейтін әрбір жеке энергияның деңгейі  $[E^{(0)} - 2\epsilon, E^{(0)} + 2\epsilon]$  үздіксіз спектр жолағына (энергиялық зона) кеңейеді, ол  $p = k\hbar$  қатынасы ескеріліп, параметрленеді. Жолақтың ішіндегі энергияның әрбір мәні тек екі ретті  $k = \pm|k|$  сетінеген. Олар оңға және солға қозғалатын толқындарға сәйкес келеді және барлық кеңістік бойынша  $-\infty < x < \infty$  анықталатын толқындық функциялармен сипатталады.<sup>8</sup>

(3.86) өзіндік функциялары  $-i\hbar(d/dx)$  импульс операторының өзіндік күйлері бола алмайды; ал трансляциялық инварианттылықты  $x \rightarrow x + \Delta x$  потенциалдың өзі бұзады. Екінші жағынан, гамильтониан  $x \rightarrow x \pm a$  дискретті ығысуларына инвариантты, ал өзіндік күйлер:

$$\tilde{\psi}_k(x \pm a) = e^{\pm ika} \tilde{\psi}_k(x)$$

<sup>8</sup> Тіпті туннельдік эффектінің үлесі тым кіші болған күннің өзінде, гамильтонианның өзіндік функцияларының локальданған толқындық функцияларынан айырмашылығы едәуір болады. Үлкен емес «ұйтқулардың» соншама үлкен жауап беруінің себебі «ұйтқымаған» жүйенің сетінеуінде. Бұл құбылыс ешқандай да парадокс емес, ол кванттық механикада кеңінен танымал, өйткені сетінеудің салдарынан «ұйтқымаған күйдің» базисін еркін таңдауымызға болады. Мұндай жағдайларда тіпті, шексіз кіші «ұйтқу» жүйенің табылу орнына әсерін тигізеді.

теңдігін қанағаттандырады. (мұнда біз  $\psi(x+a;n) = \psi(x;n-1)$  және т.с.с. болатынын пайдаландық). Осы функциялар стандарттық жазық толқындарды еске салады. Енді дербес: кіші импульстердің  $ka \ll 1$  шектік жағдайын қарастырайық. Энергия-импульс (кейде дисперсия қатынасы) қатынасы осы жағдай үшін:

$$E = E^{(0)} - 2\epsilon \cos(ka) \approx E^{(0)} - 2\epsilon + \epsilon k^2 a^2. \quad (3.88)$$

Бұл бар-жоғы тұрақты көбейткіштік дәлдікпен «эффективті массалы» еркін бөлшек үшін энергия-импульстің стандарттық қатынасы ғана

$$m_{\text{эфф}} = \frac{\hbar^2}{2\epsilon a^2}.$$

Әрине, бұл ақиқат масса емес, бірақ бөлшектің эффективті массаға «айналуы» оның тормен әсерлесуінің нәтижесі. Массаға тәуелсіз түрде бөлшек потенциалдарға қарамай, еркін қозғала алады! Бөлшектің бола алатын және оның еркін қозғалатын энергиясы интервалының диапазонын *энергиялық зона* немесе *өткізгіштік зонасы* деп атайды. Әдетте, кристалдық торлардағы электрондар деңгейлердің зоналық құрылымын «көреді». Және керісінше, электрондық күйлердің болмайтын энергиялық облысын *энергиялық саңылау* деп атайды. Электрондар барлық атом торларымен әсерлескеніне қарамастан, металл кристалдарының өткізгіштік зонасында еркін қозғалады.

Осы айтылғанның ішінде маңыздысы: тосқауылдар арқылы өтудің туннельдік эффектісі тікелей *ықтималдылықтармен* емес, *амплитудалар* (немесе толқындық функциялар) деңгейінде сипатталуы болып табылады. Осы мағынада электр өткізгіштікті табиғаттағы кванттық механикаға тән эффектілердің бірі ретінде қарастыруға болады.

### 3.6.2 Талдау

Периодтық потенциалдарды зерттеуге дайындық ретінде, алдымен келесі есепті қарастырайық. Бөлшек  $V(x)$  потенциалында финиттік қозғалыста болсын. Осындай жүйеге сәйкес келетін  $\Omega$  өту матрицасын есептеп табайық. Осындай жүйенің энергиясы мен толқындық функциясы  $V(x-d)$  потенциалында қандай болар екен? Әрине, қарапайым  $z = x-d$  айнымалыны алмастыратын болсақ, онда жаңа есептің Шредингер теңдеуі бастапқыға қайтып келеді:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \psi + V(z) = E\psi.$$

Осылайша,  $\Omega$  матрицасы

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (3.89)$$

сол жақтағы  $ae^{ikz} + be^{-ikz}$  асимптотикалық күйінің потенциалынан оң жақтағы  $a'e^{ikx} + b'e^{-ikx}$  асимптотикалық шешіміне өтуін сипаттайды. Туннельдеу амплитудасы ( $A_T$ ) мен шағылу амплитудасының байланысы ( $A_R$ )  $\delta$ -потенциалы мен  $\Omega$  матрицасы үшін (3.78) теңдеуімен анықталады.

Егер бізге  $ae^{ikx} + be^{-ikx}$  күйінен  $a'e^{ikx} + b'e^{-ikx}$  күйіне өту матрицасын табу қажет болса (мұндағы  $x = z + d$  бастапқы айнымалы), онда қайта белгілеу жасайық:

$$U_d^{-1} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

(аналогиялы ( $a', b'$ ) үшін), мұндағы

$$U_d = \begin{pmatrix} e^{ikd} & 0 \\ 0 & e^{-ikd} \end{pmatrix}, \quad (3.90)$$

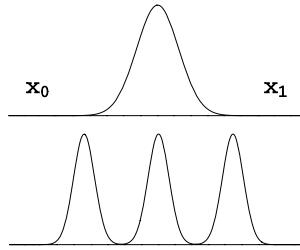
ал  $V(x-d)$  потенциалы үшін өту матрицасы мынадай болады:<sup>9</sup>

$$\Omega_d = U_d^{-1} \Omega U_d. \quad (3.91)$$

Енді түрі төмендегідей болатын потенциал үшін итерация процедурасын жүргізу жеңіл (3.17-суретті қараңыз).

$$W(x) = \sum_{j=1}^N V(x - jd).$$

<sup>9</sup> Бұл кванттық механикада берілген күйлер жиыны мен операторларды сипаттаудың және олардың бірімен-бірінің өзара «унитарлық түрлендірулері»  $\psi \rightarrow U\psi$ ,  $O \rightarrow UOU^\dagger$  байланысының мысалы, мұндағы  $U^\dagger = U^{-1}$ . 7.4-бөлімін қараңыз.



**3.17-сурет.** Финиттік қозғалысқа сәйкес келетін потенциал. Екінші суретте бастапқы потенциалдың бірнеше рет қайталануынан құралған потенциал көрсетілген

Әрбір өту  $\Omega$  матрицасымен анықталады, әрине бір облыстан өзгесіне өту кезінде фазаның ығысуын ескеру қажет. Толқындық функциялардың асимптотикасын: бірінші потенциалдың сол жағындағыны  $ae^{ikx} + be^{-ikx}$  және оның оң жағындағыны  $a_N e^{ikx} + b_N e^{-ikx}$  таңдай отырып, толық өту матрицасы үшін соңғы өрнекті аламыз:

$$\begin{pmatrix} e^{ikNd} & 0 \\ 0 & e^{-ikNd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_N \\ b_N \end{pmatrix} = (U_d \Omega)^N \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

немесе

$$\Omega_N = U_{Nd}^{-1} (U_d \Omega)^N. \quad (3.92)$$

(3.92) өрнегі (3.69) теңдеуімен үйлесімді, дәлірек айтсақ, дельта-потенциалдардың қатарынан тұратын дербес жағдайдың шешіміне сәйкес келеді.

Есеп  $N \gg 1$  жағдайы үшін өте қызықты бола бастайды; әсіресе, дербес  $N \rightarrow \infty$  шектік жағдайында, онда потенциал периодтық болады. Ал  $U_d \Omega$  матрицасының анықтаушы бірге тең болғандықтан, ұқсастықты түрлендірудің диагональдылығынан табамыз:

$$S^{-1} U_d \Omega S = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1. \quad (3.93)$$

Осы  $S$  матрицасының көмегімен  $(U_d \Omega)^N$  матрицасын диагональдық түріне әкелуге болады:

$$\Omega_N = S^{-1} U_{Nd}^{-1} S \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix}. \quad (3.94)$$

Өту матрицасы мен туннельдеудің немесе шағылу амплитудаларымен байланысы (3.78) теңдеуіндегі тәрізді:

$$\Omega_N = \begin{pmatrix} 1/A_T^{(N)*} & -A_R^{(N)*}/A_T^{(N)*} \\ -A_R^{(N)}/A_T^{(N)} & 1/A_T^{(N)} \end{pmatrix}. \quad (3.95)$$

Енді келесі екі жағдайды қарастырайық:

(1)  $U_d \Omega$  операторының екі  $\lambda_1, \lambda_2$  өзіндік мәндері абсолюттік шамалары бойынша әртүрлі болсын, мысалы,  $1/|\lambda_2| = |\lambda_1| > 1$ . Бұл жағдайда  $N \rightarrow \infty$  шегінде  $\lambda_1$  үстем болады және  $S$  матрицасы шектік, оған қоса  $N$ -ге тәуелді екендігін ескеріп, жауабын жеңіл табамыз:

$$\left| 1/A_T^{(N)} \right| \sim \lambda_1^N \rightarrow \infty,$$

яғни  $A_T \rightarrow 0$ . Бөлшектер тосқауылдан өте алмайды.

(2) Екі өзіндік мәндер бірдей абсолюттік шамаға тең болады, яғни:  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$ .

Тек осы жағдайда ғана бөлшектер периодтық потенциалдық тордан өте алады. Модульдері бірге тең болғандықтан,  $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$  шарты  $U_d \Omega$  матрицасына тривиалдық емес шектеулер орнатады. Расында,  $e^{i\varphi}$  фазасы  $U_d \Omega$  өзіндік мәндерінің бірі болсын. Осылайша, табамыз

$$0 = \det \{ U_d \Omega - e^{i\varphi} \} = \det \{ \Omega - e^{i\varphi} U_d^{-1} \} = \det \begin{pmatrix} 1/A_T^* - e^{i(\varphi - kd)} & -A_R^*/A_T^* \\ -A_R/A_T & 1/A_T - e^{i(\varphi + kd)} \end{pmatrix}, \quad (3.96)$$

яғни  $A_T = |A_T| e^{i\delta}$  деп жазуға болады. Осыдан:

$$0 = \frac{1}{|A_T|^2} - \frac{e^{i\varphi}}{|A_T|} \left[ e^{i(kd + \delta)} + e^{-i(kd + \delta)} \right] + e^{2i\varphi} - \frac{|A_R|^2}{|A_T|^2} = e^{i\varphi} \left[ e^{-i\varphi} + 2 \frac{1}{|A_T|} \cos(kd + \delta) + e^{i\varphi} \right].$$

Нәтижесінде аламыз:

$$\left| \frac{\cos(kd + \delta)}{|A_T|} \right| = |\cos(\varphi)| \leq 1. \quad (3.97)$$

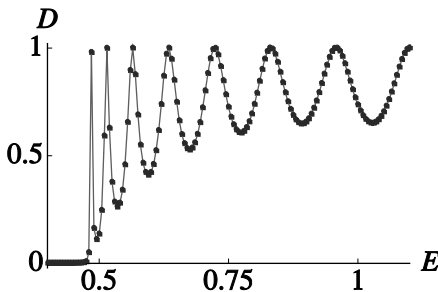
Ал  $A_T$  коэффициенті  $k$ -ның функциясы болғандықтан, демек, (3.97) теңсіздігін орындамайтын  $k$ -ның мәндері *өткізілмейді*. Бұл өткен пунктте (3.6.1-бөлімі) қарастырылған тыйым салынған зонаға сәйкес келеді. Көңіл аударыңыз,  $N \rightarrow \infty$  шегіне көшкенде біз физикалық жүйені  $W$  таза периодтық потенциалын енгізу арқылы сапалы түрде өзгерттік:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + W(x), \quad W = \sum_s V(x - sd). \quad (3.98)$$

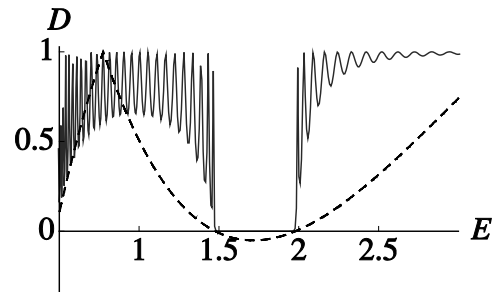
Мысал ретінде  $W(x) = \sum_{j=1}^N V(x - jd)$  потенциалының сандық есептеулерін келтірейік (3.18-сурет ( $N=11$ ) және 3.19-сурет ( $N=30$ )), мұндағы

$$V(x) = \frac{V_0}{2} \left[ 1 + \cos\left(2\pi \frac{x}{d}\right) \right]. \quad (3.99)$$

9.1-сандық талдауын қараңыз. Екінші суретте энергиялық саңылаудың пайда болуы анық көрініп тұр. Атап көресетейік: тыйым салынған зонаны энергия осін қиятын  $1 - |\cos(kd + \delta)| / |A_T|$  қисығымен шектеп тұр. Бірінші суретте тұтас сызық – Шредингер теңдеуінің сандық шешімі, ал көп нүктелер –  $\Omega_N$ -мен есептеулері.



3.18-сурет. 11 шыңдары бар квазипериодтық потенциал үшін  $D$  өту коэффициентінің  $E$ -ден тәуелділігі (NB-3.6 қараңыз)



3.19-сурет. 30 шыңдары бар квазипериодтық потенциал үшін  $D$  өту коэффициентінің  $E$ -ден тәуелділігі. (3.97) теңсіздігі ескерілген (NB-3.6 қараңыз)

### Қосымшаларға нұсқаулық

20.3-қосымшасында дельта-функция түріндегі потенциал үшін жүйенің ортонормаланғандығының және толықтығының қатынастары келтірілген. Бұл қатынастар дискретті (тартылыс потенциалы үшін) және үздіксіз спектрлер жағдайларында көрсетілген. 20.4-қосымшада шашырау есептері үшін S-матрицалық әдіс қысқаша талданған; шашырау үдерістері үшін толқындық пакет түсінігі енгізілген және негізгі мәтінде пайдаланылған әдіспен (стационарлық толқындардың көмегімен) байланысы түсіндірілген.

### Есептер

(3.1) (3.53) шарты ток тығыздығының үздіксіздігімен үйлесімді екендігін көрсетіңіздер

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left[ (\psi^*)' \psi - \psi^* \psi' \right].$$

(3.2) Бөлшек үшөлшемді тікбұрышты потенциалда қозғалады:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c, \\ \infty, & \text{өзге жағдайларда.} \end{cases}$$

Өзіндік мәндері мен өзіндік күйлерін табыңыздар. Төменгі деңгейлер, жеке жағдай  $a=b=c$  кубтық потенциал үшін сетінеуді талдаңыздар.

(3.3) Бірөлшемді тікбұрышты потенциалда жалғыз байланысқан күй бар. Оның параметрлері  $\sqrt{\frac{m_a^2 V_a}{2\hbar^2}} = \delta \ll 1$  шартын қанағаттандырсын. Осы күйдің байланыс энергиясын бірінші жуықтауда ( $\delta$ -ның реті тривиалдық емес) есептеңіздер,  $V_0$  және  $\delta$  тәуелділігін көрсетіңіздер.

(3.4) Шектелген тікбұрышты потенциал есебінің (3.3.2-бөлімін қараңыз) шектік жағдайын ( $a \rightarrow 0$ ,  $V_0 \rightarrow \infty$ , параметрлері  $aV_0 \equiv f$  тепе-теңдігімен бекітілген) қарастырыңыздар.

Нәтижесін дельта-функция потенциалындағы байланыс күйімен салыстырыңыздар ((3.55) және (3.56) теңдеулері).

(3.5)  $E < V_0$  және  $E > V_0$  жағдайларындағы сатылы потенциал үшін өту коэффициентін табыңыздар:

$$V = 0, \quad x < 0; \quad V = V_0 > 0, \quad x \geq 0.$$

(3.6) Симметрия (жұптылық) және сетінемегендік теоремасын пайдаланып, терең қос потенциалдағы төменгі жатқан деңгейлердің сапалы ерекшеліктерін талдаңыздар.

(3.7) Массасы  $m$  бөлшек  $V(x)$  потенциалында орналасқан:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a, \\ \infty, & x < 0 \text{ және } x > a. \end{cases}$$

(а) Бөлшектің қабырғаға түсіретін күшін есептеңіздер.

(ә)  $t=0$  уақыт моментінде оң қабырға ( $x=a$  нүктесіндегі)  $x=2a$ -ға қарай қозғалады. Жаңа шұңқырдағы әртүрлі стационарлық күйлердегі бөлшектің табылу ықтималдылығын есептеңіздер.

(б) Егер қабырға  $x = a$ -дан  $x = 2a$ -ға *адиабаталық* қозғалатын болса, онда ақтық күйді табыңыздар. Осы үдеріс кезіндегі кванттық бөлшектің жасаған жұмысын есептеңіздер.

(3.8) Массасы  $m$  бөлшек бірөлшемді потенциалда орналасқан:

$$V(x) = \begin{cases} -g\delta(x), & x \leq a, \\ \infty, & x > a. \end{cases}$$

(а) Байланысқан күйдің энергиясы  $E < 0$  болуының шартын қанағаттандыратын  $(m, g)$  параметрлеріне қойылатын талаптарды табыңыздар.

(ә) Шектік  $a \rightarrow \infty$  жағдайын талдаңыздар.

(б) Үздіксіз спектрде сетінеу бар ма?

(3.9) Массасы  $m$  бөлшек бірөлшемді потенциалында орналасқан:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < -a, \\ -g\delta(x), & -a \leq x \leq 2a, \\ \infty, & x > 2a. \end{cases}$$

Біз энергияның алғашқы екі деңгейін зерттегіміз келеді.

Оларды сәйкесінше жұптылығы теріс және оң толқындық функциялар деп атайық. Көңіл аударыңыздар: толқындық функциялар  $a$  және  $2a$  шекараларында нөлге айналады, демек  $\psi_-(x) = A \sin k(x+a)$  және  $\psi_+(x) = A \sin k(x-2a)$  деп жазуға мүмкіндік береді.

(а)  $x = 0$  нүктесінде  $\psi_+(x)$  және  $\psi_-(x)$  функцияларының тең болуы шартынан ( $A, B, k$ ) үшін қатынастарды табыңыздар. Осы қатынастардың  $\psi(0) = 0$  болғанда энергияның дәл өзіндік мәндері үшін стационарлық күйлердің жиынтығын беретінін көрсетіңіздер.

(ә)  $\psi(0) \neq 0$  үшін басқа да күйлердің тобы болатынын көрсетіңіздер. График түрінде жүйенің негізгі күйі осы деңгейлер тобына жататынын көрсетіңіздер. Энергияны  $g \rightarrow 0$  және  $g \rightarrow \infty$  шектерінде есептеңіздер.

(3.10) Массасы  $m$  және энергиясы  $E < 0$  бөлшек бірөлшемді потенциалында қозғалады:

$$V(x) = f\delta(x) - g\delta(x-a), \quad ..$$

(а) Бірлік дельта-функция ( $f=0$ ) үшін негізгі күйдің энергиясын есептеңіздер және оның нормаланған өзіндік функциясын табыңыздар.

(ә) Енді  $f \neq 0$  және  $g > 0$  болсын. Байланысқан күйдің табылуы шартын жазыңыздар.

(б) (3.3)-есепінде табылған күйді пайдаланып, қажетті кіші  $|f|$  үшін байланысқан күйдің бар болуын дәлелдеңіздер. Қажетті үлкен  $|f|$  үшін  $(2gma)/\hbar^2 < 1$  және  $f > 0$  жағдайларында байланысқан күйдің болмайтынын көрсетіңіздер.

(3.11) Массасы  $m$  бөлшек бірөлшемді потенциалында ( $V_0 > 0$ ) қозғалады:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 0, & 0 \leq x \leq a \\ V_0, & x > a. \end{cases}$$

(а) Жалғыз байланысқан күй болуының шартын табыңыздар.

(ә)  $V_0$  үлкен шамаларында негізгі күйдің жуықталған толқындық функциясын табыңыздар.

(б)  $t=0$  уақыт моментінде бөлшек негізгі күйінде табылсын. Потенциалдың  $x > 2a$  оң жағы  $x=0$  нүктесіне қозғалады. Ыдырау жылдамдығын, яғни бөлшектің бірлік уақытындағы потенциалдық шұңқырдың сыртында ( $x > 2a$ ) табылуының ықтималдылығын табыңыздар.

(3.12) Жазықтықпен екі облысқа бөлінген үшөлшемді кеңістікті қарастырайық. Екі жартылай кеңістіктердегі потенциалдық энергия 0 және  $-U_0$ . Жазық толқын  $\alpha$  бұрышымен жазықтыққа түседі. Шағылушы және өтуші (сынушы) толқындарды сипаттаңыздар. Бөлшектердің сақталу шартын жазыңыздар және оны тексеріңіздер.

(3.13) Массасы  $m$  бөлшек  $-kx$  серпімді күштің әсерінен бір бағытта қозғалады.  $t = 0$  уақыт моментінде күштің орталығы кенеттен  $x_0$ -ге ығысады. Бастапқы моментте ( $t < 0$ ) бөлшек негізгі күйде табылсын.

(а)  $t > 0$  үшін энергияның орташа мәнін есептеңіздер.

(ә) Жаңа жүйе үшін  $t > 0$  бөлшектің негізгі және бірінші қозған күйлерінің табылуы ықтималдылықтарын есептеп табыңыздар.

(б)  $x, p, \dot{x}, \dot{p}$  Гейзенберг операторларының  $t \rightarrow 0^\pm$  үшін орташа мәндерінің тәртібін зерттеңіздер.

(3.14) 3.20-суретте нейтрондық интерферометрдің сызбасы көрсетілген. Нейтронның қозғалысын сипаттайтын гамильтонианның түрін жазайық:

$$H = \frac{p_x^2 + p_z^2}{2m} + mgz,$$

мұндағы  $M = 1.7 \times 10^{-24} \text{ г}$  – нейтронның массасы,  $g = 980 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-2}$ ,  $z$  – вертикаль осі, түсуші шоғырдың бағытымен сәйкес келетін  $x$  – горизонталь осі.  $t = 0$  моментінде ВСЕД жазықтығы вертикальді орналасқан, ал ABD кесіндісі  $x$  осінің бойымен бағытталған деп пайымдайық.

(а) Нейтрон үшін де Бройль толқын ұзындығын  $p$  импульстің функциясы ретінде жазыңыздар.

(ә)  $p^2 / 2M \gg Mgz$  деп жорамалдайық. Толқындық функцияның екі АВСЕҒ және ABDEF жолдарының фазалар айырмашылығын

жазыңыздар. Интерференцияның максимум шартын жазыңыздар.

(б) Қондырғы орнатылған ВСЕД жазықтығын  $x$  осінің бойымен  $\varphi$  бұрышына бұрайық. Енді  $F$  есептегішінде тіркелетін  $I$  нейтрондардың интенсивтілігі  $\varphi$  бұрышына тәуелді болады. Сонда да әртүрлі максимумдар мен минимумдар байқалады. Егер  $\varphi$  бұрышы  $0$  мен  $\pi/2$  арасында өзгертін болса, онда неше максимумды табуға болады.

Бұл эффект эксперимент жүзінде бақыланған [Colella және басқалар (1975)].

(3.15) Қозған ядродан (қозу энергиясы  $G$ ) фотон сәулеленеді де, ядро негізгі күйіне өтеді.

(а) Ядроның массасы шексіз жуықтауында сәулеленген фотонның энергиясын есептеңіздер.

(ә) Енді массасы  $M$  шектелген еркін ядро тыныштық күйінде болсын деп пайымдайық. Сәулеленген фотонның энергиясын есептеңіздер, мұнда  $Mc^2 \gg G$  және ақтық ядроның серпуін ескеріңіздер.

(б) Енді ядроны гармоникалық потенциалында (мысалы, кристалдық торда) табылады деп жорамалдайық:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\mathbf{r}^2,$$

мұндағы  $\mathbf{r}$  – ядро массасы орталығының координатасы. Бөлінуге дейін ядро жоғарыда көрсетілген потенциалда негізгі күйде табылады (алдыңғы есеп сияқты, оның ішкі күйі қозған болсын). Сәулеленетін фотон  $E_\gamma$  энергиясының мүмкін болатын мәндерін табыңыздар.

(в) Келесі жуықтауды түсіндіріңіздер: үдерістің амплитудасы  $\exp(ikz)$  матрицалық элементімен анықталады, мұндағы  $k$  –

сәулеленетін фотонның импульсі. Осы жуықтаудың көмегімен (б) бөлімшесінде табылған  $E_\gamma$  энергиялы болатын фотон

сәулеленуінің ықтималдылығын  $P(E_\gamma)$  есептеңіздер. Осы талдаудан келесі қорытынды жасауға болады: қатты дене кристалындағы байланысқан ядродағы гамма-сәулелерінің жұтылуы мен қайта сәулеленуі оның серпуінсіз өтеді. Бұл құбылыс *Мёссбауэр эффектісі* деп аталады.

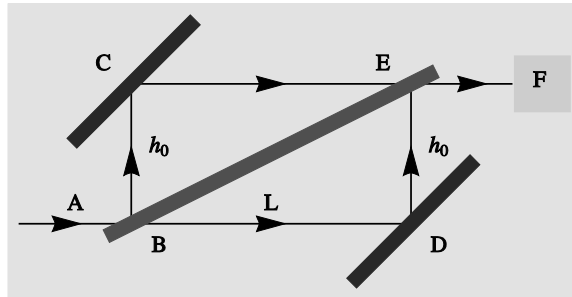
(3.16)  $xy$  жазықтығында қозғалатын электронға (массасы  $m$  және заряды  $-e$ )  $z$  осінің боймен бағытталған магнит өрісі  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  әсер етеді. Егер электронның спинін ескермейтін болсақ, онда әсерлесу гамильтонианы

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$$

түрінде жазылады, мұндағы  $\mathbf{A}$  – векторлық электромагниттік потенциал.

(а) Гамильтонианның спектрін векторлық потенциалдың  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  өлшемдік түрленуінде есептеңіздер.

(ә) Дәл жоғарыдай, бірақ  $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$  жағдайы үшін. (Ландау деңгейлері: одан әрі талдауды 14.3-бөлімінен қараңыз.)



3.20-сурет. Нейтрондық интерферометр

### Сандық талдау

(3.1) Өзіндік мәндер есебін санды түрде

$$H\psi = E\psi; \quad H = \frac{p^2}{2} + V[x], \quad (3.100)$$

$x$  координатасын дискреттеп шығарыңыздар. Гармоникалық осциллятор жөніндегі есеп үшін әдісті тексеріңіздер.

(3.2) Атыс әдісімен өзіндік мәндер ((3.100) теңдеуін) есебін шешіңіздер.

(3.3) Матрицалық механиканы пайдаланып,  $\hat{H}\psi = E\psi$  өзіндік мәндер есебін санды түрінде шешіңіздер. Гармоникалық

осциллятордың базистік функцияларының көмегімен  $p$ ,  $q$  айнамаляларында шектеулі өлшемдік жуықтауды жазыңыздар. Келесі жуықтауларды зерттеңіздер: полиномдық (гармоникалық және ангармоникалық осцилляторлар) потенциалдар және Морзе потенциалы:

$$V[x] = A(e^{-2ax} - 2e^{-ax}).$$

(3.4) Сыртқы потенциалдағы толқындық пакеттің уақыт бойынша дамуын үш әдіспен:

- кеңістік пен уақытты дискреттеу арқылы;
- Mathematica бағдарламасының NDSolve функциясының көмегімен;
- $H$  операторының өзіндік мәндерін ұлғайту арқылы зерттеңіздер.

Дербес жағдайда бөлшектің қос потенциалдан өту үдерісін зерттеңіздер.

(3.5) Толқындық пакеттің тікбұрышты тосқауылдан өтуін санды түрде зерттеңіздер. Шредингер теңдеуін шешудің екі әдісін: дискреттеу және NDSolve командасын қолданыңыздар. Өтуші толқынның импульстік таралуы үшін Фурье-талдауды қолданыңыздар және нәтижелерін теориялық есептеулерімен салыстырыңыздар.

(3.6) Толқындық пакеттің квазипериодтық потенциалдан өтуін санды түрде зерттеңіздер.

(3.7) 3.11-есепте берілген жүйенің дамуын санды түрде зерттеңіздер. Бөліну ықтималдылығын  $\exp(-\Gamma t)$  заңдылығымен сипаттауға болатынына көз жеткізіңіздер.

# Бұрыштық момент

- 4.1 Коммутациялық қатынастар
  - 4.2 Кеңістік бұрылыстары
  - 4.3 Кванттау
  - 4.4 Штерн-Герлах тәжірибесі
  - 4.5 Сфералық функциялар (гармоникалар)
  - 4.6 J операторының матрицалық элементтері
  - 4.7 Қосу ережесі
  - 4.8 Спин
- Қосымшаларға нұсқаулық  
Есептер

Үш өлшемдік есептерде бұрыштық моментінің айнымалылары негізгі рөл атқарады. Кванттық механикада бұрыштық момент әмбебап түрде квантталады, яғни қарастырылып отырған жүйеге тәуелді емес, себебі сәйкес келетін коммутациялық қатынастар мен күй нормасының оң мәнділігінің салдары.

## 4.1 Коммутациялық қатынастар

Үш өлшемді сфералық симметриялық потенциалында қозғалатын бөлшек үшін Шредингер теңдеуін жазайық

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

Сфералық координаталарда оның түрі төмендегідей болады:

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \right\} \psi = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))\psi. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Сфералық координаталарында  $\psi = R(r)\Phi(\theta, \phi)$  айнымалыларды ажырату әдісін ескеріп, қозғалыс теңдеуін қайта жазайық:

$$\frac{1}{R(r)} \left[ \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) \right] R(r) = \frac{1}{\Phi(\theta, \phi)} \hat{L}^2 \Phi(\theta, \phi) = \lambda,$$

мұндағы  $\hat{L}^2$  операторының анықтамасын көрсетелік

$$\hat{L}^2 \Phi(\theta, \phi) = - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Phi(\theta, \phi). \quad (4.3)$$

Демек,  $\hat{L}^2$  – қозғалыс мөлшері орбиталдық моментінің квадраты  $(\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2$  (4.5-бөлімді қараңыз). Сонымен, егер  $\lambda$  оның өзіндік мәні болса, онда радиалдық теңдеудің түрі төмендегідей жазылады:

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} r^2 (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R(r) = 0.$$

Кванттық механикалық бұрыштық моментінің операторы келесі түрде анықталады:

$$\mathbf{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla.$$

Ал компоненттерінің айқын түрлері мынадай болады:

$$L_x \equiv L_1 = yp_z - zp_y = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right);$$

$$L_y \equiv L_2 = zp_x - xp_z = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right);$$

$$L_z \equiv L_3 = xp_y - yp_x = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Координата және импульс операторларының жұптары канондық түйіндес болмайтын компоненттерімен коммутацияланады ( $[y, p_z] = 0, \dots$ ), сондықтан жоғарыда келтірілген анықтаулар бір мәнді болады.

Егер жүйені құрайтын бөлшектердің саны бірден артса, онда толық бұрыштық момент келесі түрде анықталады:

$$\mathbf{L}_{\text{топ}} = \sum_a (\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a),$$

мұнда қосындылау барлық бөлшектер бойынша жүргізіледі.

Ыңғайлылық мақсатында үшінші рангылы тұрақты тензоры (Леви-Чивита псевдотензоры) енгізейік

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1, & \text{егер } (ijk) = (123) & \text{немесе жұп орын ауыстырулар} \\ -1, & \text{егер } (ijk) = (213) & \text{немесе тақ орын ауыстырулар} \\ 0, & & \text{өзге жағдайда} \end{cases}$$

$\varepsilon_{ijk}$  кез келген индекстер жұбының орын алмасуы үшін толықтай антисимметриялы, ал олардың (индекстердің) циклдік орын алмастыруы үшін инвариантты

$$\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{jki} = \varepsilon_{kij}$$

Ендеше бұрыштық моменттің  $i$ -ші компонентін келесі түрде жазуға болады

$$L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$$

мұнда қосындылау қайталанатын индекстері бойынша жүргізіледі.

Стандарттық коммутациялық қатынастарды пайдаланып

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.4)$$

$L_i$  компоненттері үшін келесі коммутациялық қатынастарды жазуға болады

$$\boxed{[L_1, L_2] = i\hbar L_3, \quad [L_2, L_3] = i\hbar L_1, \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2,}$$

немесе

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k.} \quad (4.5)$$

Әрбір бөлшектің бұрыштық моменттері бірімен-бірі коммутацияланатын болғандықтан, осы (коммутациялық) қатынастар толық бұрыштық моменттің компоненттері үшін де орынды.

Бұрыштық моменттің операторлары эрмиттік. Олар  $x$  және  $p$  компоненттерімен келесі коммутациялық қатынастарды қанағаттандырады

$$[L_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k, \quad (4.6)$$

$$[L_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k. \quad (4.7)$$

Енді бұрыштық моментінің квадратын қарастырайық

$$\mathbf{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2.$$

$L^2$  операторы  $L_i$  операторының әрбір компонентімен коммутацияланатынын дәлелдеу жеңіл

$$[L^2, L_i] = 0, \quad i=1,2,3.$$

Мысалы,

$$[L^2, L_1] = [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] = i\hbar(-L_2L_3 - L_3L_2 + L_3L_2 + L_2L_3) = 0.$$

Осының салдарынан  $L^2$  операторы және компоненттерінің біреуімен, мысалы  $L_3$ , бір мезгілде диагональдік түрге келтіруге болады. Ал  $L_3$  компоненті басқаларымен  $L_1$  және  $L_2$  коммутацияланбайтындықтан,  $[L^2, L_3]$  операторының өзіндік мәндерімен  $L^2$  бір мезгілде анықтала алмайды.

## 4.2 Кеңістік бұрылыстар

Ендігі кезекте (4.5), (4.6) және (4.7) формулаларының түрлері бірдей болуы кездейсоқтық еместігін көрсетейік. Демек бұрыштық момент, координаталар және импульс операторлары векторлардың түрлендіру заңына бағынатынын, яғни координат осьтерін бұрғанда олар векторлық шамалар ретінде түрленетінін білдіреді. Импульс операторы  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  кеңістіктік трансляция операторы да екенін еске түсірейік. Жалпы оператор  $O(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  келесідей түрленеді:

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0/\hbar} O(\mathbf{r}, \mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0/\hbar} = O(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{p}).$$

Трансляция операторының толқындық функцияға әсерін жазайық:

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0/\hbar} \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0).$$

Аналогиялық түрде бұрыштық моменттің операторлары да кеңістіктегі бұрылыстарға әкеледі. Түсіндірейік, ол үшін келесі оператордың әсерін қарастырайық

$$U\psi = e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar} \psi(\mathbf{r}),$$

мұндағы  $\boldsymbol{\omega}$  – шексіз кіші бұрылыс.

<sup>1</sup> Сфералық координаталардағы Лаплас операторының бұрыштық бөлігі болатын  $L^2$  операторы ((4.3) теңдеуі) және  $L^2$  операторы тең екенін байқау қиын емес.

<sup>2</sup> Ерекше жағдай ретінде  $L^2 = 0$  күйін қарастырамыз, өйткені бұл жағдайда әрбір компонент нақты мән қабылдайды, яғни  $L_i = 0$  болады.

$$e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}\psi(\mathbf{r}) \approx \left(1 + i\frac{\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}}{\hbar}\right)\psi(\mathbf{r}) = \left(1 + \omega_i \varepsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}\right)\psi \approx \\ \approx \psi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}).$$

Мұнда  $e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_0/\hbar}$  трансляция операторы болғандықтан,  $U = e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}$  операторын *унитарлық түрлендіру* ретінде қарастыруға болады, яғни  $O$  генераторлық операторы келесі ережеге сәйкес түрлендіріледі

$$O \rightarrow UOU^\dagger.$$

Дербес жағдайда, егер  $O = \mathbf{r}$  болса, онда осы оператор келесідей түрленеді:

$$\mathbf{r} \rightarrow \tilde{\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar} \mathbf{r} e^{-i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar} = \mathbf{r} + \frac{i\omega_i}{\hbar} [L_i, \mathbf{r}] + \dots = \mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} + \dots,$$

мұнда (4.6) коммутаторлары пайдаланылды. Сонымен,  $e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}$  операторының әсері  $\boldsymbol{\omega}$  векторының бағытында  $|\boldsymbol{\omega}|$  бұрышына үш өлшемді бұрылысқа тең болатынын көрсеттік.

### Ескертулер

- Бұрылыс моментінің  $[\mathbf{L}] = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$  өлшемі әсермен бірдей және, шындығында  $\frac{1}{2}\hbar$  бірліктерінде квантталады. Бұдан әрі оқулықта  $\mathbf{L}/\hbar$  өлшемсіз операторын  $\mathbf{L}$  түрінде белгілейміз. Осылайша бұрыштық моменттің қатысы бар коммутациялық қатынастардағы «кезбе»  $\hbar$  көбейткішінен құтыламыз.<sup>3</sup>

Бұрыштық моменттің  $L_i$  компоненттерінің коммутаторлары осы жиынтық операторларының сызықтық комбинациясынан құралады. Әдетте « $L_i$  операторлары алгебраны құрайды» дейді. Дербес жағдайда алгебра коммутациялық қатынастардың оң жағында пайда болатын тұрақтылар жиынтығымен беріледі және осы группада шексіз кіші түрлендірулермен сипатталады. Мұндай тұрақтыларды – құрылымдық тұрақтылар деп атайды. Қарастырып отырған бұрыштық момент алгебрасы үшін құрылымдық тұрақтылар болып  $\varepsilon_{ijk}$  тензорының элементтері табылады. Олар  $SO(3)$  үшөлшемді бұрылыстар группасын сипаттайды (осы тараудың 20.6-қосымшасын қараңыз).

Бұдан әрі  $L_+$  «жоғарылату» және  $L_-$  «төмендету» операторларының ұғымын енгізген өте пайдалы

<sup>3</sup> Бұдан әрі  $\mathbf{L}$ ,  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{s}$  және  $\mathbf{J}$  символдарымен бұрыштық моменттің  $\hbar$  бірліктерінде өлшенетін әртүрлі операторларын белгілейміз.

$$L_+ \equiv L_1 + iL_2, \quad L_- \equiv L_1 - iL_2.$$

Онда бұрыштық момент алгебрасын қайта жазу қажет

$$[L_+, L_-] = 2L_3, \quad [L_3, L_+] = L_+, \quad [L_3, L_-] = -L_-. \quad (4.8)$$

Бұрыштық момент квадратының теңдеуі де өзгеріп, төмендегідей болады

$$L^2 = L_+ L_- + L_3^2 - L_3 = L_- L_+ + L_3^2 + L_3. \quad (4.9)$$

### 4.3 Кванттау

Табиғатта элементар бөлшектер (электрон, протон, нейтрон және т.б.) өзіндік ішкі моментке ие, оны *спин* деп атайды. Бөлшек спині мен оның орбиталдық қозғалысының байланысы жоқ. Интуициялық түрде спин ұғымы бөлшектің өз осімен айналуына жақын. Мұны электронның спинін түсіндіру мақсатында Г. Уленбек және С. Гаудсмит ұсынған болатын. Спиндік операторларды сипаттау үшін  $S$  немесе  $s$  белгілеулерін енгізейік. Жалпы бұрыштық момент операторлары қанағаттандыратын коммутациялық қатынастарды спиндік операторларына да орынды деген гипотезаға арқа сүйенейік.

Әдебиетте қабылданған дәстүрге сәйкес  $\mathbf{J}$  немесе  $\mathbf{j}$  символымен толық бұрыштық моментінің операторын белгілейік. Мысалы, бір бөлшектің толық бұрыштық моменті дегеніміз осы бөлшектің орбиталдық бұрыштық моменті  $L, \ell$  мен спинінің  $S, s$  қосындысы.

Толық бұрыштық моментінің компоненттері келесі коммутациялық қатынастарды қанағаттандырады

$$\boxed{[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k},$$

ал күйлерінің нормасы оң таңбалы болып анықталады. Сондықтан толық бұрыштық момент үшін бірінші іргелі нәтиже болып, *оның өзіндік мәндері әрқашан жалпы ережелерге сәйкес квантталуы* болып табылады. Енді қалайша жүзеге асырылатынын көрсетейік.

Бастапқы коммутациялық қатынастарды еске түсірейік

$$\begin{aligned} [J_+, J_-] &= 2J_3, & [J_3, J_+] &= J_+, & [J_3, J_-] &= -J_- \\ [J^2, J_i] &= 0, & i &= 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Бұрыштық моментінің квадраты  $J_{\pm}$  және  $J_3$  арқылы өрнектеледі:

$$J^2 = J_+ J_- + J_3^2 - J_3 = J_- J_+ + J_3^2 + J_3. \quad (4.11)$$

Біз  $\mathbf{J}^2$  және  $J_3$  диагональдық болатын базисті таңдайық, онда олардың өзіндік мәндері келесі мәндерді қабылдайды

$$J_3|j, m\rangle = m|j, m\rangle,$$

мұндағы  $j - \mathbf{J}^2$  операторының өзiрге белгiсiз өзiндiк мәнi. Ал (4.10) коммутациялық қатынастарынан аламыз

$$J_3 J_+ |j, m\rangle = (J_+ J_3 + J_+) |j, m\rangle = (m+1) J_+ |j, m\rangle.$$

Егер  $J_+ |j, m\rangle$  күйi нөлдік векторы болмаса, онда  $J_3$  операторының  $m+1$  өзіндік мәніне сәйкес келетін басқа өзіндік күйi. Сол сияқты,

$$J_3 J_- |j, m\rangle = (m-1) J_- |j, m\rangle,$$

яғни  $J_- |j, m\rangle$  не нөлдік вектор, не  $|j, m-1\rangle$  өзіндік күйi. Ескеретін мәселе,  $\mathbf{J}^2$  және  $J_\pm$  коммутацияланатын болғандықтан,  $|j, m\pm 1\rangle$  күйлері өзіндік мәндеріне сәйкес келетін өзіндік күйлері болып қала береді (*ескертуді қараңыз*). Демек,  $J_+$  және  $J_-$  операторлары жоғарылату және төмендету операторлары сияқты әсер етеді:

$$J_\pm |j, m\rangle = \text{const} \cdot |j, m\pm 1\rangle,$$

$$J_\pm^2 |j, m\rangle = \text{const} \cdot |j, m\pm 2\rangle$$

және т.с.с. Осылайша  $J_\pm^n |j, m\rangle$  (мұндағы  $n = 0, 1, 2, \dots$ ) нөлдік емес күйлерінің жиынтығын құрайды және олардың өзіндік мәндері  $\mathbf{J}^2$  операторының өзіндік мәндерімен сәйкес келгенімен, операторының өзіндік мәндерін бүтін санға өзгертіп отырады.

Енді  $\mathbf{J}^2$  және  $J_3$  операторларының өзіндік мәндерінің арасындағы байланысты анықтайық.  $\mathbf{J}^2$  операторының өзіндік мәнін  $T$  деп белгілейік. Онда келесі қатынастан

$$\langle \mathbf{J}^2 - J_3^2 \rangle = \langle J_1^2 + J_2^2 \rangle \geq 0, \quad (4.12)$$

келесі шекаралайтын теңсіздікті аламыз (оны оқырман оңай тексере алады)

$$\sqrt{T} \geq m \geq -\sqrt{T}.$$

Демек,  $T$ -ның ( $\mathbf{J}^2$ -тың өзіндік мәні) белгіленген мәні үшін  $m$ -нің ( $\sqrt{T}$  мәнімен шектелген) максималдық мәніне сәйкес болатын күйi болуы қажет. Сол күйді  $j$  деп белгілейік. Жоғарыда келтірілген белгілеулерге сай ол  $|j, j\rangle$  күйi болады.

Әдетте мұндай классикалық жағдай үшін бұрыштық момент векторының бағыты  $z$  осінің бойымен, дәлірек айтқанда бұрыштық моменттің  $z$ -құраушысы оның өзіндік шамасымен сәйкес келеді. Алайда кванттық механикалық жағдай бұдан біршама өзгереді.

Шындығында,  $T$  және  $j$  араларындағы байланыс төмендегідей. Анықтамаға сай  $|j, j\rangle$  күйі -  $m$ -нің максималды мәніне сәйкес болатын күй. Ал жоғарылату операторының осы күйге әсері оны нөлге айналдырады

$$J_+ |j, j\rangle = 0,$$

кері жағдайда ол өзіндік мәні  $j+1$  болатын  $J_z$  өзге өзіндік күйін туғызатын (генерациялайтын) еді. Ал бұл қарама-қайшылыққа әкеледі. (4.11) теңдеуінен табамыз

$$J^2 |j, j\rangle = (J_- J_+ + J_3^2 + J_3) |j, j\rangle = j(j+1) |j, j\rangle,$$

яғни

$$T = j(j+1),$$

классикалық ықтималдылықтан айырмашылығы, моменті  $\sqrt{j(j+1)}$  болатын жүйенің  $z$ -құраушысы тек  $j$  мәнін, ал одан соң ғана  $j, j-1, j-2, \dots$  квантталған мәндерін қабылдай алады.

Алайда біз әлі аяқтағанмыз жоқ. Жоғарыда көрсеткеніміздей,  $|j, j\rangle$  «ең жоғары» күйінен басталатын моменттің сол мультиплеттігіне жататын (яғни  $T = j(j+1)$  болатын) күйлердің жиынтығын толықтыра түсуге болады. Ол үшін  $J_-$  төмендетуші операторын пайдалану қажет

$$J_-^n |j, j\rangle \propto |j-n\rangle; \text{ мұндағы } n=0,1,2,\dots$$

Мұны қаншалықты жалғастыра беруге болады? (4.12) теңдеуінен  $m$ -нің ең кіші мәніне сәйкес болатын күйдің бар болатыны шығады. Демек, қандай да  $n$  бүтін саны бар және ол келесі теңдікті қанағаттандырады:

$$J_- |j, j-n\rangle = 0.$$

Енді (4.9) теңдіктерінің біріншісін пайдаланып, табамыз

$$J^2 |j, j-n\rangle = (J_+ J_- + J_3^2 - J_3) |j, j-n\rangle = ((j-n)^2 - (j-n)) |j, j-n\rangle.$$

Бірақ бұл күй де  $|j, j\rangle$  күйі сияқты моменттің бір мультиплеттігіне жатады. Сондықтан

$$(j-n)^2 - (j-n) = j(j+1), \quad \therefore n=2j, \text{ мұндағы } n=0,1,2,\dots$$

Бір қарағанда нәтижесі қарапайым болып көрінеді. Шындығында біз кванттық механиканың негізгі нәтижелерінің бірін дәлелдеп шықтық: *априори*  $j$  тек бүтін немесе жартылай бүтін мәндерге ғана ие бола алады

$$j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (4.13)$$

Бұрыштық момент оның табиғатына: орбиталдық немесе спиндік, қарапайым немесе құрама болуына тәуелсіз, әрқашан квантталады. Бұрыштық моменттің квадратына  $J^2$  сәйкес келетін оператор *априори* тек келесі мәндерді қабылдай алады

$$j(j+1) = 0, \frac{3}{4}, 2, \frac{15}{4}, 6, \dots$$

Төменде, 4.5-бөлімде орбиталдық бұрыштық момент тек бүтін мәндерді қабылдайтыны көрсетілген

$$j = \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Белгіленген  $j$  үшін  $(2j + 1)$  күйлердің жиынтығы бар

$$\begin{cases} |j, j\rangle \\ |j, j-1\rangle \\ \dots \\ |j, -j\rangle \end{cases} \quad (4.14)$$

және олар жоғарылату және төмендету операторларымен  $J_{\pm}$  байланысқан. Әдетте олар бұрыштық момент векторының әртүрлі бағыттарындағы күйлеріне сәйкес келеді. Ал (4.14) теңдігінің ерекшелігі – кванттық механика  $J_z$ -ті (оның өзіндік мәнін  $m$  деп белгілейік), яғни  $z$ -құраушысының квантталуын алдын ала болжайды

$$m = j, j-1, \dots, -j. \quad (4.15)$$

Сондықтан қай бағытты  $z$  осі деп атау бізге тәуелді. Өзгеше айтқанда,  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$  құраушысының (мұндағы  $\mathbf{n}$  – кез келген бірлік вектор) қайсысын таңдасақ та, оның өзіндік мәндері әрқашан (4.15) теңдеуіне сәйкес квантталады.<sup>4</sup> Әрине,  $m$ -нің әртүрлі мәндерінің салыстырмалы ықтималдылығы нақты қарастырып отырған *күйге* тәуелді.

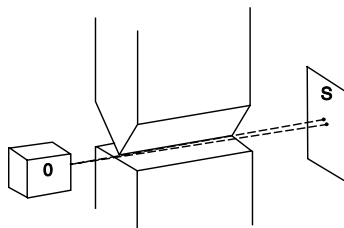
<sup>4</sup> Кванттық механиканың осы маңызды мәселесі ертеректе (кванттық механиканың бастапқы кезеңінде) «бағытталған кванттау» деп аталды.

Аталған теориялық болжаулар Табиғатта әрқашан да орындалады. Қарапайым бөлшектердің спиндері жартылай бүтін немесе бүтін болады: электрондар, протондар мен нейтрондардың спині  $s = \frac{1}{2}$  ( $\hbar$  бірлігінде); пиондар мен каондардың спині нөлге тең, ал  $W$  және  $Z$  бөлшектердің спині 1, т.с.с. Орбиталдық бұрыштық момент тек бүтін мәндерді қабылдайды.

#### 4.4 Штерн-Герлах тәжірибесі

Спиннің бар болуы және кванттық механика болжаған «бағытталған кванттау» дәлелдеу мақсатындағы тәжірибелердің біріншісін Штерн мен Герлах 1922 жылы жасады. Аталған тәжірибеде күміс атомдарының коллимацияланған шоғыры фотопластинкаға түспей тұрып, алдымен біртекті емес магнит өрісінен өтеді (4.1-суретті қараңыз). Магнит өрісі шоғыр бағытына перпендикуляр әрі едәуір градиентке ие

$$\frac{\partial B_z}{\partial z} \neq 0.$$



4.1-сурет. Штерн-Герлах тәжірибесі. Пештен (O) бағытталған атомдар экран бетінде (S) жинақталады

Оның мақсаты магнит моменттеріне ие атомдардан құралған шоғыр не  $z$ , не  $-z$  бағытында ауытқуы қажет. Магнит моменті оның спиніне пропорционал болғандықтан, бұл тәжірибені спинінің  $z$ -құраушысын  $S_z$  өлшеу деп қарастыруға болады.

Егер түсуші шоғыр поляризацияланбаған болса, онда ондағы атомдардың магниттік моменттерінің бағыттары кездейсоқ бағытталған болады. Классикалық теорияға сәйкес шоғыр кеңейіп, экранға жеткенде ол кең белдеулер болып таралуы қажет етеді. Ал тәжірибеге сәйкес шоғыр тек екіге ғана бөлініп,  $z$  бағытында жіктелген екі жеке дақтардан тұратын кескінді құраған. Бұл импульс моментінің, ал осы жағдай үшін спин моменті квантталуының айқын айғағы болатын. Спиннің  $\hbar/2$  тең болатынын көрсеткен тәжірибе сол заманда бәрін таңғалдырды.

Магниттерді кез келген бұрышқа бұру арқылы, тәжірибені қайта жүргізуге болатын. Алайда тәжірибелер әрдайым бірдей нәтиже (шоғырдың екіге ажырауын) берді. Оған қоса толықтай поляризацияланбаған шоғыр үшін екі кескіннің салыстырмалы интенсивтілігі магниттің бағытына байланыстылығын көрсетті (7.7-бөлімді қараңыз).

## 4.5 Сфералық функциялар (гармоникалар)

Жоғарыда жасалған талқылаулар орбиталдық қозғалыстың  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$  салдары болатын бұрыштық моменті үшін әділетті. Алайда толқындық функциялар үшін бірімділіктің талаптары мынадай шартқа әкеледі:  $\ell$  тек бүтін мәндерді қабылдайды. Декарттық  $(x, y, z)$  және сфералық  $(r, \theta, \phi)$  координаталар арасындағы байланысты келтірейік

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}; \quad \theta = \arctg \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}; \quad \phi = \arctg \frac{y}{x}.$$

Ал  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$  құраушылары төмендегідей болады:

$$\begin{aligned} L_3 &= -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \phi}; \\ L_+ &= -(x + iy) \frac{\partial}{\partial z} + z \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) = e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right); \\ L_- &= -L_+ (i \rightarrow -i) = e^{-i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \end{aligned}$$

Осылайша

$$L^2 = L_+ L_- + L_3^2 - L_3 = - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$

нәтижесіне қол жеткіземіз (4.1-бөлім қараңыз).

Енді  $L^2$  операторының өзіндік мәндерін табайық. Ол үшін келесі теңдеуді шешуіміз қажет

$$L^2 \Phi(\theta, \phi) = - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \Phi(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \Phi(\theta, \phi). \quad (4.17)$$

$L_3 = -i \frac{\partial}{\partial \phi}$  операторы  $\hat{L}^2$  операторымен коммутацияланатындықтан, бірінші кезекте мына теңдеуді шешу қажет

$$L_3 \psi(\phi) = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \psi(\phi) = m \psi(\phi).$$

Шешімі төмендегідей болатыны күмәнсіз

$$\psi(\phi) = \Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}.$$

Мұндағы көбейткіш  $1/\sqrt{2\pi}$  нормалау талаптарын қанағаттандырудан табылған

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}(\phi)^* \Phi_m(\phi) = \delta_{m'm}.$$

Оған қоса толқындық функция  $\phi$ -дің бірімәнді функциясы ретінде анықталуы қажет, сондықтан

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ал  $m$  (азимуталдық кванттық сан) мәндері тек дискреттік болуы керек болғандықтан

$$-\ell, -\ell + 1, \dots, +\ell.$$

Демек,  $\ell$  тек бүтін сандар ғана бола алады

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Сонымен, орбиталдық бұрыштық момент квантталады, ал оның өзіндік мәндері бүтін<sup>5</sup> және  $\hbar$ -қа еселі болады.

Енді

$$\Phi(\theta, \phi) = \Phi_m(\phi) \Theta_{\ell, m}(\theta)$$

өрнегін (4.17) теңдеуіне апарып қоятын болсақ, оның түрі келесідей өзгереді

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta_{\ell, m}(\theta) \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta_{\ell, m}(\theta) + \ell(\ell + 1) \Theta_{\ell, m}(\theta) = 0.$$

Одан әрі  $x \equiv \cos(\theta)$  айнымалыны алмастыру нәтижесінде келесі теңдеуді аламыз

<sup>5</sup> Орбиталдық бұрыштық моменттің осы қасиетін  $\mathbb{R}^3$  үш өлшемді кеңістіктің бір байланыстылық құрылымын бейнелейді. Көптеген қызықты физикалық жағдайлар үшін кеңістік көп байланысты болады. Оның мысалдарын 14.2-бөлімінен таба аласыз.

$$\frac{d}{dx}(1-x^2)\frac{d}{dx}\Theta_{\ell,m} - \frac{m^2}{1-x^2}\Theta_{\ell,m} + \ell(\ell+1)\Theta_{\ell,m} = 0. \quad (4.18)$$

Бұл кеңінен танымал теңдеу. Оның шешімдері шектеулі және бірімәнді,  $-1 \leq x \leq 1$  аралығында анықталады және  $\ell \geq |m|$ . Оларды *ассоциацияланған Лежандр полиномдары* деп атайды және әдетте  $P_\ell^m(x)$  ретінде белгілейді. Лежандр полиномдары жөнінде толығырақ ақпаратты осы тараудың Қосымшасынан табуға болады.

Ал (4.18) теңдеуінің шешімдері келесі түрде нормаланады

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta |\Theta_{\ell,m}(\theta)|^2 = \int_{-1}^1 dx |\Theta_{\ell,m}(\theta)|^2 = 1$$

және оның айқын түрі төмендегідей болады ( $x \equiv \cos\theta$ )

$$\begin{aligned} \Theta_{\ell,m} &= (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}} P_\ell^m(x), \quad m \geq 0, \\ \Theta_{\ell,-|m|} &= (-1)^m \Theta_{\ell,|m|}. \end{aligned} \quad (4.19a)$$

Сонымен  $\Phi(\theta, \phi)$  шешімінің түрін жазайық:

$$\Phi(\theta, \phi) = Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} P_\ell^{|m|}(x) e^{im\phi}.$$

Мұндағы  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  – сфералық функциялар деп аталады. Олар бір мезгілде  $L^2$  операторының (өзіндік мәндері  $\ell(\ell+1)$ ) және  $L_3$  операторының (өзіндік мәндері  $m$ ) өзіндік функциялары болып табылады. Сфералық функциялар  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  келесі түрде нормаланады

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{\ell',m'}(\theta, \phi)^* Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm}.$$

Енді нақтыланған  $\ell$ -дің мәні үшін  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  функциясының (барлығының саны  $(2\ell+1)$ -ге тең) координаттық бейнелеудегі  $|\ell, m\rangle$  күйінің түрін жазайық:

$$\langle \theta, \phi | \ell, m \rangle = Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

Кейбір  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  сфералық функциялар ( $\ell=0,1,2$ ) үшін олардың айқын түрлерін келтірелік

$$\begin{aligned}
 Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1), \\
 Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, & Y_{2,\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\phi}, \\
 Y_{1,\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}, & Y_{2,\pm 2} &= \mp\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}
 \end{aligned}
 \tag{4.20}$$

және т.с.с.<sup>6</sup> Сондай-ақ кейбір маңызды қасиеттерін де көрсетейік

$$\begin{aligned}
 Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \phi + \pi) &= (-1)^\ell Y_{\ell,m}(\theta, \phi), \\
 Y_{\ell,m}^* &= (-1)^m Y_{\ell,-m}.
 \end{aligned}$$

## 4.6 J операторының матрицалық элементтері

Жоғарыда  $J_i$  үшін коммутациялық қатынастар келесі нәтижелерге әкелетінін көрсеткенбіз

$$\begin{aligned}
 J_\pm |m\rangle &= \text{const} \cdot |m \pm 1\rangle, \\
 \mathbf{J}^2 |j\rangle &= j(j+1)|j\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{4.21}$$

Осы қатынастардың оң бөлігіндегі тұрақтыларды қарастырайық. Алдымен  $\mathbf{J}^2 = (J_+ J_- + J_- J_+ - J_3^2 - J_3)$  операторының  $|j, m\rangle$  күйіндегі орташа мәнін есептеуден бастайық. Оның мәні

$$\begin{aligned}
 \langle j, m | \mathbf{J}^2 | j, m \rangle &= \langle j, m | J_+ J_- | j, m \rangle + \langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle - \langle j, m | J_3^2 | j, m \rangle, \\
 j(j+1) &= \sum_{m'} \langle j, m | J_+ | j, m' \rangle \langle j, m' | J_- | j, m \rangle + m^2 - m.
 \end{aligned}$$

Мұнда төмендегі толықтықтың шартын пайдаландық

$$\sum_{j', m'} |j', m'\rangle \langle j', m'| = \mathbb{1}.$$

Сонымен қатар  $J_\pm$  операторлары  $j$ -дің мәнін өзгерпейтіндігін де ескердік. Енді (4.21) теңдеулерін ескере отырып, соңғы қатынастан  $m'$  бойынша қосындылауға тек бір ғана мүше үлес қосатынын табамыз:

$$\langle j, m | J_+ | j, m-1 \rangle \langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle = j(j+1) - m^2 + m = (j+m)(j-m+1).$$

<sup>6</sup> Әдебиеттерде  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  функцияларының өзге де анықтамалары кездеседі. [Мысалы, Landau and Lifshitz (1976)]: қосымша  $i^\ell$  фазасымен ерекшеленеді.

$J_+ = J_-^\dagger$  болғандықтан, теңдіктің сол жағындағы екі матрицалық элементтер өзара байланысқан

$$\langle j, m | J_+ | j, m-1 \rangle = \langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle^*.$$

Сондықтан келесі теңдікті аламыз:

$$\left| \langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle \right|^2 = (j+m)(j-m+1)$$

және ыңғайлы фазаны таңдай отырып, табатынымыз:

$$\langle j, m-1 | J_- | j, m \rangle = \langle j, m | J_+ | j, m-1 \rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}. \quad (4.22)$$

Мұнда  $J_+, J_-$  операторларының қалған матрицалық элементтері нөлге тең болатынын ескертеміз.

Ал  $J_1$  және  $J_2$  операторларының матрицалық элементтерін  $J_\pm$  операторларының матрицалық элементтері арқылы жеңіл өрнектеуге болады. Ол үшін келесі теңдіктерді ескеру керек

$$J_1 = \frac{J_+ + J_-}{2}, \quad J_2 = \frac{J_+ - J_-}{2i}.$$

Нәтижесінде нөлден өзгеше матрицалық элементтерін жазамыз

$$\langle j, m-1 | J_1 | j, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \quad (4.23)$$

$$\langle j, m+1 | J_1 | j, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)}$$

және

$$\langle j, m-1 | J_2 | j, m \rangle = +\frac{i}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}, \quad (4.24)$$

$$\langle j, m+1 | J_2 | j, m \rangle = -\frac{i}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)}.$$

Енді  $J_3$  үшін матрицалық элементтерді келтірелік

$$\langle j, m | J_3 | j, m \rangle = m. \quad (4.25)$$

Сонымен  $J_i$  операторларының барлық матрицалық элементтерін анықтадық.

Қайта (4.21) теңдеуіне оралатын болсақ, онда

$$\begin{aligned} J_- | j, m \rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} | j, m-1 \rangle, \\ J_+ | j, m \rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} | j, m+1 \rangle. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Күткеніміздей,  $J_+|j, j\rangle = 0$  және  $J_-|j, -j\rangle = 0$  болатынына көзімізді жеткіздік.

Жоғарыда көрсетілген фазалар ( $J_{\pm}$  операторларының матрицалық элементтері теріс емес және нақты сандар) *Кондон-Шортли конвенциясының* бөлігі болып табылады.

#### 4.6.1 Спин 1/2 және Паули матрицалары

Егер  $j = \frac{1}{2}$  болса, онда  $J_z$  құраушысы тек қана екі мүмкін болатын өзіндік мәндерді  $m = \pm\frac{1}{2}$  қабылдайды. Барлық  $J_i$ ,  $i=1, 2, 3$  операторларының матрицалық элементтерін  $2 \times 2$  матрицалары түрінде көрсетуге болады.

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{2}, m' | J_1 | \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \frac{1}{2} (\sigma_1)_{m', m}; \\ \left\langle \frac{1}{2}, m' | J_2 | \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \frac{1}{2} (\sigma_2)_{m', m}; \\ \left\langle \frac{1}{2}, m' | J_3 | \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \frac{1}{2} (\sigma_3)_{m', m}, \end{aligned}$$

мұндағы

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Осы үш матрица – *Паули матрицалары* деп аталады. Олар *спинорлық күйлерге* әсер етеді

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Базистық спинорлық күйлері

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |\downarrow\rangle,$$

*спин-жоғары* немесе *спин-төмен* бағдарланған күйлерді көрсетеді.

Мұнда  $s_i = \frac{1}{2} \sigma_i$  спин операторлары да (4.5) теңдеулерінде көрсетілген алгебраны қанағаттандыратынын атап өтеміз:

$$\left[ \frac{\sigma_i}{2}, \frac{\sigma_j}{2} \right] = i\varepsilon_{ijk} \frac{\sigma_k}{2}.$$

Басқа сөзбен айтқанда, осы матрицалар  $SO(3)$  группасының алгебрасын құрайды. Паули матрицалары келесі маңызды қасиеттерге ие

$$\sigma_i^2 = \mathbb{1}, \quad (i = x, y, z); \quad \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i = i\varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (i \neq j), \quad (4.28)$$

осыдан Паули матрицалары (дәлірек  $i\sigma_i$ ) – бұл *кватерниондар* болатынына, яғни жалпыланған жорамал сандардың көрінісі екеніне көз жеткіземіз.

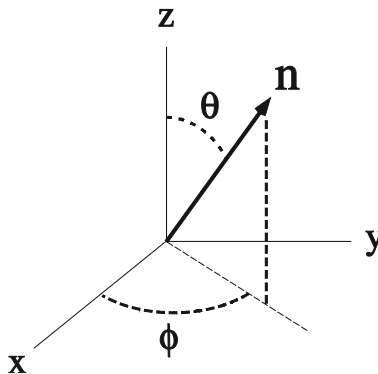
### Есеп:

Спині  $1/2$  болатын жүйе  $\sigma \cdot \mathbf{n}$  операторының өзіндік мәні  $1$ -ге тең өзіндік күйі болып табылады. Мұндағы  $\mathbf{n}$  кез келген бағыттағы (4.2-сурет) бірлік вектор  $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ . Спиндік толқындық функцияны табыңыздар.

### Жауабы:

$$|\psi_{\mathbf{n}}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Мұндай күйді «дайындау» үшін бөлшектер ағынын Штерн-Герлах магниттерінің (олар  $\mathbf{n}$ -мен бағыттас болуы және гиромангниттік қатынастың таңбасына сәйкес жоғары немесе төмен ауытқитын шоңғырларды таңдау арқылы) жиынтығынан өткізгенде аламыз.



4.2-сурет

### 4.7 Қосу ережесі

Бір бұрыштық момент операторынан артатын жүйені қарастырайық. Екі бұрыштық моменттерінің табиғаты оларды қарастырып отырған жүйеге тәуелді. Олар екі орбиталдық бұрыштық моменттерге, спиндері нөлге тең емес екі бөлшектерге, немесе бөлшектің орбиталдық бұрыштық моменті мен спиніне сәйкес келуі мүмкін. Екі  $\mathbf{J}_1$  мен  $\mathbf{J}_2$  бұрыштық моменттерін қосу ережесі олардың коммутациялық қатынастарынан шығады және әмбебап болады. Осындай жүйенің кез келген күйін  $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$  күйлерінің сызықтық комбинациясы, яғни  $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_{1z}$  және  $\mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}_{2z}$  операторларының өзіндік функцияларының *тікелей көбейтіндісі* ретінде өрнектеуге болады.

Толық бұрыштық момент келесі түрде анықталады

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{J}_2 \equiv \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2. \quad (4.30)$$

Екі бұрыштық момент тривиалдық коммутацияланатындықтан (өйткені олар кеңістіктің екі түрлі аудандарында әсер етеді)

$$[J_{1i}, J_{2j}] = 0.$$

$\mathbf{J}$  – толық бұрыштық моменті  $\mathbf{J}_1$  және  $\mathbf{J}_2$  бұрыштық моменттері қанағаттындыратын коммутациялық қатынастарға бағынады

$$[J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} J_k.$$

Екі сұраққа жауап берелік:

**Сұрақ 1:**  $\mathbf{J}_1$  және  $\mathbf{J}_2$  үшін  $j_1$  және  $j_2$  кванттық сандары берілсін. Толық бұрыштық момент қандай мәндерді қабылдай алады?

**Сұрақ 2:** Бұрыштық момент күйлері  $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$  мен толық бұрыштық момент  $\mathbf{J}^2$  және  $J_z$  операторларының өзіндік күйлері қалайша өзара байланысқан?

Сұрақтарға жауап берместен бұрын бұрыштық моменттің өзіндік күйлерінің екі табиғи базисы болатынын атап өтейік:

(i) Бұл базисте  $\mathbf{J}_1^2, J_{1z}, \mathbf{J}_2^2$  және  $J_{2z}$  операторлары диагоналды және олардың өзіндік функциялары төмендегідей болады

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle,$$

(ii) Балама базисте  $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{J}_1^2$ , және  $\mathbf{J}_2^2$  операторлары бір мезгілде нақты мәндерді қабылдайды

$$|j_1, j_2; J, M\rangle$$

және келесі қасиеттерге ие болады

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |j_1, j_2; J, M\rangle &= J(J+1) |j_1, j_2; J, M\rangle, \\ J_z |j_1, j_2; J, M\rangle &= M |j_1, j_2; J, M\rangle. \end{aligned}$$

Әрбір топтағы операторлар өзара коммутацияланатынын және әрбір жағдайда оның алдында көрсетілген операторлармен коммутацияланатын басқа ешқандай оператордың жоқ екендігіне оқырман көз жеткізуі қажет. Басқаша айтатын болсақ, олар бір мезгілде бақыланатын шамалардың екі баламалы максималды жиынтығын құрайды. Бұдан әрі оларды сәйкесінше бірінші және екінші базис деп атайтын боламыз.

Алдымен  $J_{1z}$  және  $J_{2z}$  екеуінің де өзіндік мәндері мүмкін болатын мәндерінің максимумын қабылдайтын күйді қарастырайық:

$$|j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle. \quad (4.31)$$

Бұл бірінші базистің *ең жоғары* күйі. Енді (4.30) қосындылау ережесінен  $J_z$  үшін құраушылардың қарапайым қосындысын  $M = m_1 + m_2$  аламыз. Ал *ең жоғары* күй  $M$ -нің де мүмкін болатын максималды мәнін қабылдауы керек, ол әрине  $j_1 + j_2$  болады. Осы  $J \geq M$  болғандықтан, (4.31) күйі  $J$ -дің максималды, яғни  $j_1 + j_2$  мәніне сәйкес келеді. Шындығында

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle &= (J_1^2 + J_2^2 + 2\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2) |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = \\ &= (J_1^2 + J_2^2 + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+} + 2J_{1z}J_{2z}) |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = \\ &= (j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1) |j_1, j_1, j_2, j_2\rangle \end{aligned}$$

осы теңдіктен (4.31) күйі – өзіндік мәні  $(j_1 + j_2)(j_1 + j_2 + 1)$  болатын  $\mathbf{J}^2$  өзіндік күйі болатынын көреміз

$$|j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = |j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle. \quad (4.32)$$

Бұл екі базисті байланыстыратын бірінші тривиалдық емес нәтиже. Дәлірек айтқанда, осы қатынастың салыстырмалы фазасы еркін түрде бірге теңестірілді. Біз қабылдағалы отырған фазалық конвенцияның бөлігі болып табылады.

Енді (4.32) жоғары күйіне төмендету операторымен  $J_{1-} + J_{2-} = J_-$  әсер етіп көрейік. Бірінші жағынан (толық бұрыштық момент базисында) табатынымыз

$$J_- |j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \sqrt{2(j_1 + j_2)} |j_1, j_2; j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle,$$

мұнда біз (4.26) теңдеуін және  $J_-$  -дің әсерінен бұрыштық моментінің  $J$  мәнін өзгерпейтінін пайдаландық. Екінші жағынан есептеп табатынымыз

$$(J_{1-} + J_{2-})|j_1, j_1, j_2, j_2\rangle = \sqrt{2j_1}|j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2}|j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle,$$

бұл базистер арасындағы екінші қатынасқа әкеледі

$$\begin{aligned} & |j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\ & = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Екі  $M = j_1 + j_2 - 1$  күйлерінің осы сызықтық комбинациясы (4.33) теңдеуінде пайда болатынын ескеру қажет. Бірінші базисте  $J_{1z} + J_{2z}$  операторының өзіндік мәндеріне сәйкес келетін екі сызықтық тәуелсіз күйлер болғандықтан, екінші базисте де екі күй болуы қажет. Оның біреуі (4.33) теңдеуінде бар, ал екіншісі қайда?

Екінші күй міндетті түрде  $j_1 + j_2 \geq J \geq j_1 + j_2 - 1$  аралығында болуы қажет. Алайда (4.33) теңдеуінде  $J = j_1 + j_2$ ,  $M = j_1 + j_2 - 1$  күйі табылғандықтан, жалғыз ғана мүмкін күй  $J = j_1 + j_2 - 1$  болады. «Жоғалған күй»  $|j_1, j_2; J = j_1 + j_2 - 1, M = j_1 + j_2 - 1\rangle$  болуы керек. Ал бірінші базис тұрғысынан оны қалайша табуға болады? Ізделінді күйіміз (4.33) теңдеуіне ортогоналды болғандықтан, оны «қолымызбен» құрастырып ала аламыз

$$\begin{aligned} & |j_1, j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\ & = e^{i\alpha} \left( \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}|j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle \right), \end{aligned} \quad (4.34)$$

мұндағы  $\alpha$  - өзiрге анықталмаған фаза.

Келесі қадамда (4.33) және (4.34) теңдеулеріне  $J_{1-} + J_{2-} = J_-$  операторымен әсер етіп көрейік. Онда  $M = j_1 + j_2 - 2$  екі күй аламыз

$$|j_1, j_2, j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle, \quad |j_1, j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle.$$

Жалпы,  $J_z$  мәндері  $M = j_1 + j_2 - 2$  тең болатын үш күй бар. Сондықтан толық бұрыштық момент базисінде басқа да күйдің болуы қажет. Осы бағыттағы пайымдауды жалғастырып, үшінші күйіміз  $J = j_1 + j_2 - 2$  мультиплетінің ең жоғары күйі болатын қорытындыға келеміз. Ал оның айқын өрнегін толық бұрыштық момент құраушыларының сызықтық комбинациясы түрінде жазу үшін табылған екі күйлерге ортогоналды етіп енгізу арқылы табуға болады.

Осылайша жалғастырып,  $n$ -ші қадамнан соң  $M = j_1 + j_2 - n$  -ге тең болатын  $n + 1$  сызықтық тәуелсіз күйлерді аламыз, олардың бірі  $J = j_1 + j_2 - n$  -ге тең «жаңа» мультиплетке сәйкес келеді. Басқа сөзбен айтқанда, әрбір қадамнан соң сызықтық тәуелсіз күйлердің саны бірге артып отырады. Бұл үдеріс  $n$ -нің саны  $\text{Min}\{2j_1, 2j_2\}$  (кішісінің) мәніне тең болғанша жалғасады. Мысалы,  $j_1 < j_2$  болсын. Онда  $n = 2j_1$  болады және төмендету операторының  $|j_1, -j_1, j_2, j_2\rangle$  күйін жойып жіберетінін (яғни, нөлге тең болады) ескеретін болсақ, онда жаңа мультиплет пайда болмайды. Бұдан келесі қорытынды шығады: толық бұрыштық моменттің мәні келесі аралықта табылады

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2|. \quad (4.35)$$

Тексеру мақсатында екі базистегі сызықтық тәуелсіз күйлерінің санын есептейік. Бірінші базистегі саны

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1).$$

Екінші базистегі сандарды есептеу үшін (4.35) теңдеуін ескеруіміз қажет. Енді табамыз ( $j_1 < j_2$  үшін)

$$\sum_{J=j_2-j_1}^{j_2+j_1} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1).$$

Бұдан (4.35) теңдеуінің шындығында орынды екенін көреміз. Басқаша айтатын болсақ, екі мультиплеттердің көбейтіндісі бұрыштық моменттері нақты болатын әртүрлі мультиплеттердің жиынына жіктеледі:

$$j_1 \otimes j_2 = j_1 + j_2 \oplus j_1 + j_2 - 1 \oplus \dots \oplus |j_1 - j_2|.$$

Бірнеше мысалдар қарастырайық. Екі спиндік дуплеттер  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$  жағдайы әсіресе маңызды. Қарастырған мысал үшін соңғы формуладан аламыз: күйлердің көбейтінділері спиндік триплетке ( $S = 1$ )

$$|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, \frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$$

және синглетке

$$\frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

жіктеледі. Алғашқы үш комбинацияның барлығы да симметриялы және оларды *параллель* спиндік күйлер деп атайды. Ал соңғы (спин

бойынша антисимметриялы) комбинация *антипараллель* спиндік күйлер болып табылады.

Егер  $j_1=j_2=1$  болса, онда толық бұрыштық момент базисінде келесі мультиплеттерге:  $J = 2$  (5 күй),  $J = 1$  (триплет) және  $J = 0$  (синглет) жіктеледі.

#### 4.7.1 Клебш-Гордан коэффициенттері

Келтірілген пайымдаулар 1-сұраққа толықтай, ал 2-сұраққа (4.34) өрнегіндегі фазаны бірізді таңдау жөніндегі бөлігіне жауап береді. Бір базистегі әрбір күй екінші базис күйлерінің сызықтық комбинациясы түрінде жіктеледі:

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = \sum_{J, M} |j_1, j_2; J, M\rangle \langle j_1, j_2; J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

және керісінше

$$|j_1, j_2; J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2; J, M\rangle.$$

Мұндағы жіктеу коэффициенттерін

$$\langle j_1, j_2; J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle, \quad \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2; J, M\rangle \quad (4.36)$$

*Клебш-Гордан коэффициенттері* деп атайды (одан әрі – КГ коэффициенттері). Ал (4.32), (4.33) және (4.34) теңдеулерін құрастыру кезіндегі табылған коэффициенттер – КГ коэффициенттерінің мысалдары болып табылады. Жоғарыда айтып өткеніміздей, КГ коэффициенттері әр түрлі күйлердің фазалары жөніндегі конвенциясына тәуелді. Осы кітаптағы біздің пайдаланған конвенция – Кондон-Шортли Конвенциясы деп аталады. Ол үш ережеден құралады:

- (1) Екі базистегі ең жоғары күйлердің коэффициенттері (4.32) теңдеуіндегідей 1-ге тең. Бұл күйлердің глобальдық салыстырмалы фазаларын бірінші және екінші базистерде бекітеді.
- (2) Төмендету операторының барлық матрицалық элементтері нақты және жартылай оң анықталған. Осы ереже бір мультиплеттің ішіндегі күйлердің арасындағы салыстырмалы фазаларды бекітеді.
- (3) Келесі матрицалық элементтер  $\langle j_1, j_2; J, M | J_{1z} | j_1, m_1, J \pm 1, M\rangle$  нақты және жартылай оң анықталған.

Осы конвенцияда барлық КГ коэффициенттері нақты: (4.36) теңдеуіндегі екі өрнекке тең. Оқырмандарға көмек ретінде

$(j_1, j_2)$  кіші мәндері үшін КГ коэффициенттері кітаптың соңындағы кестеде (24.5-сурет) берілген.

Кондон-Шортлидің үшінші ережесінен КГ коэффициенттеріндегі  $(j_1, m_1) \leftrightarrow (j_2, m_2)$  алмастыруы әдетте симметриялы болмайтынын байқаймыз.

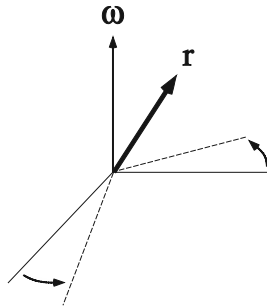
## 4.8 Спин

Координат осьтерінің кеңістік бұрылысы кезіндегі толқындық функциялар түрлендірулерінің қасиеттеріне қайтып оралайық. Бекітілген  $\omega$  бұрышына осьтің бойымен бұрылысы кезінде спинсіз бөлшектің толқындық функциясы скаляр тәрізді түрленеді, яғни

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \omega \times \mathbf{r} + \dots,$$

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}' + \omega \times \mathbf{r}') = \psi'(\mathbf{r}') = e^{i\omega \times \mathbf{L}} \psi'(\mathbf{r}'). \quad (4.37)$$

Басқаша айтсақ,  $S = 0$  болғанда, толқындық функцияның мәні кеңістіктің сол нүктесінде өзгермейді, алайда координат өзгерісінің негізінде оның *функционалдық пішіні* өзгереді (4.3-сурет).



4.3-сурет.  $\omega$  осінің бойымен  $\omega$  бұрышына осьтердің бұрылысы кезінде толқындық функцияның физикалық координаттары өзгермейді, бірақ оның координаттары  $\omega \times \mathbf{r}$  бұрылған.

Толқындық функциялардың функционалдық пішінінің мұндай өзгерісін  $SO(3)$  группасының көрінісі ретінде қарастыруға болады. Түрлендіру группасының тұрғысынан функциялардың қай жиынтығы группаның келтірілмейтін көрінісін, яғни өзара түрленетін объектілердің жиынтығын құрайтынын білу маңызды. Кеңістік бұрылыстары бұрыштық моментінің мәнін өзгерпейтініне күмән жоқ. Мұндай келтірілмейтін көріністер  $\mathbf{J}^2$ -тың бекітілген өзіндік мәндеріне сай болатын күйлердің *мультиплеттеріне* сәйкес келеді. Спинсіз бөлшектер үшін олар бекітілген  $L^2$  орбиталдық

бұрыштық моментіне сай болатын өзіндік күйлердің жиынтығы болады. Дәлірек айтатын болсақ, индексі  $\ell$  болатын сфералық функциялар  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$ ,  $m = \ell, \ell-1, \dots, -\ell$ . Жалпы толқындық функция сфералық функциялар бойынша жіктеледі

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} R_{\ell,m}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

Координаталар жүйесін бұру толқындық функцияның түрленуіне әкеледі

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\omega \hat{\mathbf{L}}} = \sum_{\ell,m} R_{\ell,m}(r) e^{i\omega \hat{\mathbf{L}}} Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

Алайда  $\mathbf{L}$  операторы  $\ell$  мәнін өзгерте алмайды, сондықтан

$$e^{i\omega \hat{\mathbf{L}}} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} D_{m',m}^{\ell}(\omega) Y_{\ell,m'}, \quad (4.38)$$

мұндағы  $D_{m',m}^{\ell}(\omega)$  – бұрылыс матрицасы деп аталады. Оның анықтамасын жазайық

$$D_{m',m}^{\ell}(\omega) = \langle \ell, m' | e^{i\omega \hat{\mathbf{L}}} | \ell, m \rangle. \quad (4.39)$$

Спині  $s$  болатын бөлшектің толқындық функциясының  $2s+1$  компонентасы болады, олар келесі заңдылықпен түрленеді

$$\psi \rightarrow e^{i\omega(\hat{\mathbf{L}}+\hat{s})} \psi;$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ \psi_{2s+1}(\mathbf{r}) \end{pmatrix},$$

мұнда  $\mathbf{L}$  операторы (бұрыштық айнымалыларға тәуелді дифференциалдық оператор болғандықтан)  $\mathbf{r}$ -дің әрбір құраушысына әсер етеді. Ал спин операторы спинорлық кеңістігінде әсер етеді:

$$\psi'_{\sigma} = \sum_{\sigma'} (e^{i\omega s})_{\sigma,\sigma'} \psi_{\sigma'}$$

$s$  матрицалық элементтері (4.23), (4.24) және (4.25) тең-деулерінде аналогиялы анықталады (ол үшін келесі қарапайым алмастыруларды жасау қажет  $J_1 \rightarrow s_x, J_2 \rightarrow s_y, J_3 \rightarrow s_z$ )

### Ескертулер

- Егер гамильтониан спинге тәуелсіз болса, онда оның өзіндік күйлерін келесі көбейтінді пішінінде жазуға болады

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})\chi_{\sigma}.$$

Мысалы, релятивистік емес жуықтауда сутегі атомы гамильтонианының түрі төмендегідей жазылады

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}. \quad (4.40)$$

(4.40) теңдеуіне бірінші релятивистік түзетуді көрсетелік

$$\Delta H = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3} + \frac{e^2}{2m^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{s} + \frac{\pi e^2}{2m^2} \delta^3(\mathbf{r}).$$

Мұнда  $H + \Delta H$  толық гамильтонианның кеңістік бұрылыстарына инвариантты болатынына көңіл бөлу керек. Шындығында

$$[\mathbf{J}, H + \Delta H] = 0,$$

мұндағы  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$ .

- Егер бөлшектің спині  $1/2$  болса, онда спин операторлары Паули матрицаларымен беріледі. Бұрылу матрицаларының айқын түрін алу үшін септігі тиетін пайдалы тепе-теңдікті жазайық

$$e^{i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \cos|\mathbf{a}| + i \frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin|\mathbf{a}|, \quad (4.41)$$

мұндағы  $\mathbf{a}$  – тұрақты вектор.

#### 4.8.1 Спині $1/2$ үшін бұрылыс матрицалары

Енді  $\mathbf{n}$  бағыты бойымен  $\phi$  бұрышына бұрылуы кезіндегі  $1/2$  спиндік толқындық функциялардың түрленуін жазайық:

$$\chi \rightarrow \exp\left[\frac{i}{2}\phi(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})\right]\psi \equiv U(\phi\mathbf{n})\psi.$$

Ал (4.41) тепе-теңдігін пайдаланатын болсақ, онда бұрылыс матрицасын жеңіл есептеп таба аламыз

$$U(\phi\mathbf{n}) = \cos\frac{\phi}{2} + i\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin\frac{\phi}{2}.$$

Мысалы,  $z$  осінің бойымен бұрылысында

$$U_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix},$$

ал  $x$  немесе  $y$  осьтері бойымен бұрылысында

$$U_x(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} & i\sin\frac{\phi}{2} \\ i\sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix}; \quad U_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\phi}{2} & \sin\frac{\phi}{2} \\ -\sin\frac{\phi}{2} & \cos\frac{\phi}{2} \end{pmatrix}.$$

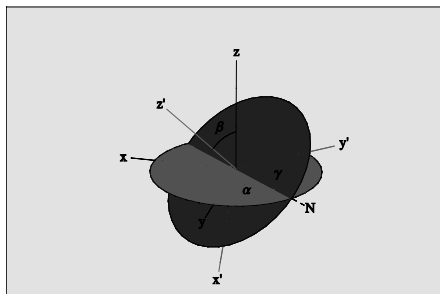
$2\pi$  бұрышына бұрылысы үшін

$$U_x(2\pi) = -1; \quad U_y(2\pi) = -1; \quad U_z(2\pi) = -1;$$

спині  $1/2$  бөлшектің толқындық функциясы таңбасын өзгертеді. Группалар теориясының тұрғысынан осы толқындық функцияларын қарастыру үшін көріністің жаңа түрлеріне әкеледі. Оларды  $SO(3)$  группасының спинорлық (немесе проекторлық) көрінісі деп атайды. «Спинорлық» деген жай атауы, оларды қарапайым векторлықтардан айыру үшін жасалған. Спині  $1$  болатын бөлшектердің толқындық функциялары  $U(2\pi) = 1$  бұрылысында векторлар тәрізді түрленеді.

Егер спин  $1/2$  болса, онда жалпы жағдайда бұрылыс матрицасы Эйлер бұрыштары  $(\alpha, \beta, \gamma)$  арқылы өрнектеледі (4.4-суретті қараңыз) және оның түрі төмендегідей болады

$$D^{\frac{1}{2}} \equiv U(\alpha, \beta, \gamma) = U_z(\gamma)U_y(\beta)U_z(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos\frac{\beta}{2} & e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin\frac{\beta}{2} \\ -e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin\frac{\beta}{2} & e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$



4.4-сурет. Эйлер бұрыштары

### Кез келген спинді бөлшектер үшін бұрылыс матрицасы

Спині  $S = n/2$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  бөлшектер үшін бұрылыс матрицасын келесі әдіспен табуға болады. Ол үшін спиндері  $1/2$  болатын  $n$  спинорды қарастырайық. Олардың көбейтіндісін абсолютті симметриялы етіп құрастырамыз. Онда жоғарыда қарастырған  $n=2$  мысалы үшін табылған триплеттік күйлерге аналогиялық комбинациялардың саны  $n+1$  болады. Әрине,  $S_z = \frac{n}{2}$  күйдің ең жоғары күйі  $S = \frac{n}{2}$  болатынына күмән жоқ

$$|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle. \quad (4.43)$$

Абсолюттік симметриялы болатын қалған күйлерді (4.43) теңдеуінен  $S_- = s_{1-} + s_{2-} + \dots + s_{n-}$  операторының бірнеше рет әсерінен соң алуға болады. Мысалы, ең жоғары күйге ең жақын болатын келесі күйді аламыз

$$\frac{1}{\sqrt{n}}(|\downarrow\uparrow \dots \uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow \dots \uparrow\rangle + \dots + |\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle).$$

Ал  $S_-$  операторы  $S$ -тің мәнін өзгертпейтіндіктен, осы  $n+1$  күйі  $S = \frac{n}{2}$  мультиплеттерін құрайтыны анық.

Сондықтан  $S$  спині үшін бұрылыс матрицасы спиндері бойынша абсолюттік симметриялы  $n=2S$  (4.42) матрицаларының тікелей көбейтіндісі болып табылады. Бұдан спиндері бүтін ( $n$  жұп) бөлшектердің толқындық функциясы бастапқы мәніне  $2\pi$  бұрышына бұрғаннан соң, қайтып оралатыны шығады. Ал спиндері жартылай бүтін ( $n$  тақ) бөлшектердің толқындық функциясы таңбасын өзгертеді.

### Қосымшаларға нұсқаулық

20.5-қосымшада Лежандр полиномдарының қысқаша қасиеттері келтірілген. Ал 20.6-қосымшада группалар теориясының негізгі аспектілері қарастырылған. 20.7-қосымшада бұрыштық момент теориясында пайдаланылатын формулалар жиынтығын табуға болады.

**Есептер**

(4.1) Спидері  $1/2$ -ге тең екі бөлшектің әсерлесу гамильтонианы

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2.$$

Барлық сақталатын әрі бақыланатын шамаларды атаңыздар және энергияның өзіндік мәндерін жазыңыздар. Жүйеге сыртқы өріс әсер етсін. Осы өріс тек бірінші бөлшекпен ғана  $V = \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_1$  әсерлесетін болса, сақталатын шамаларды табыңыздар және  $H_0 + V$  операторының спектрін анықтаңыздар.

(4.2)  $yz$  жазықтығында жататын және  $z$  осімен  $\theta$  бұрышын құрайтын оське спинінің проекциясы  $1/2$  болатын ( $s=1/2$ ) спинорының құраушыларын жазыңыздар. Есептеу нәтижелерін  $(\theta, \varphi)$  сфералық бұрыштарымен анықталатын кез келген  $\zeta$  осіне проекцияларының жалпы түрін жазыңыздар.

(4.3) Тыныштық күйіндегі спині  $1/2$  болатын  $\Lambda^0$  бөлшегі  $p + \pi$  бөлшектеріне ыдырайды. Енді  $\Lambda^0$  бөлшегі  $z$  осінің бойымен поляризацияланған болсын. Екінші ретті бөлшектер үшін үдерістің амплитудасын және бұрыштық таралуының ең жалпы формуласын жазыңыздар. Егер жұптылық сақталатын болса, онда қандай шектеулер пайда болады? Протонның көлденең поляризациясының (спинінің қозғалыс бағытына проекциясы) орташа мәнінің теңдеуін жазыңыздар.

(4.4) Спині  $S$  бөлшек сыртқы  $\mathbf{B}$  біртекті магнит өрісімен әсерлеседі

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\beta S_z.$$

Уақыттың  $t=0$  моментінде спин  $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$  бағытының бойымен бағдарланған, яғни  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} |0\rangle = |0\rangle$ .

а) Уақыттың  $t=0$  моментіндегі  $\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle$  орташа мәндерін есептеп табыңыздар. (Ұсыныс: спині  $1/2$  болатын  $N=2S$  бөлшектерден тұратын эквивалент жүйені қарастырыңыздар).

ә) Өлшенетін  $S_z$  шамасының  $t=0$  моментінде  $S_z$ -тің әртүрлі мәндерінде табылуының ықтималдылығын есептеңіздер.

б) Гейзенберг операторларын  $S_x^H(t), S_y^H(t), S_z^H(t)$  қарастырыңыздар. Гейзенбергтің қозғалыс теңдеуін жазыңыздар және оны шешіңіздер. Есептеулерден уақыттың  $t$  моментіндегі Шредингер операторларының  $\langle t | S_x | t \rangle, \langle t | S_y | t \rangle, \langle t | S_z | t \rangle$  мәндерін

бөліп алыңыздар.  $\langle t | S_x | t \rangle$  мәні бастапқы мәнімен тең болатын уақыттың  $t$  минималды мәнін табыңыздар.

- (4.5) Массасы  $m$ , спині  $1/2$  және заряды  $e$  болатын бөлшек үш өлшемді гармоникалық потенциалында орналасқан. Осы жүйеге әлсіз біртекті магнит өрісі әсер етсін. Гамильтонианның түрі

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}^2 - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

болады, мұндағы

$$\boldsymbol{\mu} = g \mu_B \mathbf{s} = \frac{g}{2} \mu_B \boldsymbol{\sigma}, \quad \mu_B = \frac{e \hbar}{2mc}.$$

- а)  $\mathbf{B} = 0$  болғанда жүйе энергиясының алғашқы бірнеше деңгейлерін, олардың орбиталдық бұрыштық моментін және толық бұрыштық моментін есептеп табыңыздар.
- ә) Енді векторлық потенциалы  $\mathbf{A} = \left( -B \frac{y}{2}, B \frac{x}{2}, 0 \right)$  болатын әлсіз магнит өрісін қарастырайық. Сақталатын шамаларды атаңыздар,  $B^2$  ретті эффектiлердi ескермеуге болады.
- б) Алдындағы есептеу нәтижелерін пайдаланып, әлсіз өріс жуықтауындағы жүйенің алғашқы екі деңгейінің энергияларын табыңыздар.

- (4.6) Массасы  $m$  және заряды  $e$  болатын бөлшекке  $z$  осінің бойымен бағытталған тұрақты электр өрісі әсер етеді.

- а) Координаталары  $\mathbf{r}(t)$  және импульсы  $\mathbf{p}(t)$  болатын аталған бөлшек үшін Гейзенберг теңдеуін жазыңыздар және оны шешіңіздер.
- ә) Жоғарыдағы есептің нәтижелерін пайдаланып,  $\mathbf{L}(t)$  операторын табыңыздар. Нәтижесі  $\mathbf{L}(t)$  қозғалыс теңдеуімен үйлесімде болатынына көз жеткізіңіздер.
- б)  $\mathbf{L}(t)$  орташа мәнін есептеп табыңыздар. Ол үшін келесі шарттарды пайдаланыңыздар

$$\langle \mathbf{r}(0) \rangle = 0; \quad \langle \mathbf{p}(0) \rangle = p_0 \hat{x}; \quad \langle \mathbf{L}(0) \rangle = 0.$$

- (4.7) Массасы  $m$  және спині  $1/2$  болатын бөлшек бір өлшемді гамильтонианмен өрнектеледі

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(x); \quad V[x] = \frac{\sigma_3 + 1}{4} m \omega^2 x^2.$$

- а)  $H$  спектрін және оның өзіндік функцияларын есептеңіздер.  
 ә) Уақыттың  $t = 0$  моментінде бөлшектің күйі

$$\psi(0, x) = \psi_0(x) \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}}$$

болсын, мұндағы  $|\pm\rangle - s_z$  жоғарғы және төменгі өзіндік күйлері,

ал  $\psi_0(x) = (m\omega / \pi\hbar)^{1/4} \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2)$  осциллятордың (жиілігі  $\omega$ )

төменгі күйінің толқындық функциясы. Егер осы күй  $H$  гамильтонианының өзіндік күйі болса, онда оның  $H$  орташа мәнін есептеңіздер.

- б) егер  $s_z$  -ті өлшеулер Штерн-Герлах тәжірибесінің көмегімен жүргізілсе, онда уақыттың  $t$  моментіндегі толқындық функцияны есептеңіздер.  $s_z = -1/2$  күйінде табылудың ықтималдылығын табыңыздар

(4.8) Сутегі атомындағы электронның спин-орбиталдық әсерлесуін және электрон мен протонның спин-спиндік әсерлесуін (өте нәзік құрылым) бірге қарастырайық:

$$H_{so} = A \mathbf{L} \cdot \mathbf{s}_e; \quad H_{ss} = B \mathbf{s}_p \cdot \mathbf{s}_e,$$

мұндағы  $A$  және  $B$  – тұрақтылар.

- а) Жоғарыда айтылған әсерлесулердің үлесі тым кіші деп және электрон мен протонның спиндерін ескере отырып, сутегі атомы  $n=1$ ,  $n=2$  күйлерінің сәтінәуін есептеп табыңыздар.  
 ә)  $H_{ss}$  әсерлесуін ескермей, сол күйлерді жіктеп жазыңыздар. Ол үшін  $L^2, J^2, F^2, F_z$  операторларын пайдаланыңыздар, мұндағы

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}_e, \quad \mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{s}_p.$$

- б) Жоғарыда жіктелген кейбір күйлер толық гамильтонианның өзіндік күйлері болады. Толық гамильтонианның өзіндік күйлерін табыңыздар және оның өзіндік мәндерін есептеңіздер.

# Симметрия мен статистика

## 5

### 5.1 Табиғаттағы симметриялар

### 5.2 Кванттық механикадағы симметриялар

### 5.3 Тектес бөлшектер: Бозе-Эйнштейн және Ферми-Дирак статистикалары

### Қосымшаларға нұсқаулық Есептер

Осы тарауда кванттық механикада маңыздылығы іргелі екі тұжырымдыма талданады. Біріншісі, ол – симметрия. Симметрия түсінігі жаратылыстану ғылымдарының кең диапазонында таныс болғанымен, ол кванттық механиканың салдарларын нәзік, сонымен қатар кеңінен шектейді. Екіншісі екі тектес бөлшектің алмасуы кезіндегі симметрияның қасиеті болып табылады. Спиндері жартылай бүтін тектес болатын бөлшектер (фермиондар) Ферми-Дирак статистикасына бағынады: бөлшектерді алмастыру кезінде олардың толқындық функциялары толығымен антисимметриялы болады. Спиндері бүтін тектес бөлшектер (бозондар) Бозе-Эйнштейн статистикасына бағынады. Ал олардың толқындық функциялары толықтай симметриялы.

### 5.1 Табиғаттағы симметриялар

Берілген физикалық жүйелердің теңдеулері көп жағдайларда әртүрлі айнымалылардың көмегімен өрнектеледі, мәселен баламалы санатындағы координаталар жүйелері болатын координаталық айнымалылары арқылы. Сөз, жалпы, физиканы сипаттайтын айнымалылардың түрлендірілуі (мысалы, классикалық механикадағы канондық түрлендірулер) жөнінде болып отыр.

Концепция симметриямен тығыз байланысты. Егер айнымалыларды түрлендіруден шығатын жаңа айнымалылармен өрнектелген гамильтонианның формальдық түрі тұрақты болса,<sup>1</sup> онда біз ойымызды физикалық заңдардың *симметриясы* немесе

---

<sup>1</sup> Гамильтонианның кейде түрі ғана емес, сонымен қатар мәні де сақталады, бірақ біз мұнда екі мүмкіндікті де жорамалдауымыз қажет.

олардың *инварианттылығы* жөнінде өрбітеміз. Шындығында, бір жүйені екі түрлі сипаттағанымен, қозғалыстың теңдеулері мен физикалық заңдылықтардың олардың екеуінде де бірдей болады.

Табиғатта симметрия кең тараған: атомдар мен кристалдардан бастап, биологиялық денелерге дейін.

Симметрияның салдары – сақталу заңы болады. Классикалық физиканың кеңінен танымал мысалдарын келтірейік: уақыттың біртектілігімен байланысты энергияның сақталуы (уақыттың ығысуындағы гамильтонианның инварианттылығы), импульстің сақталуы (егер кеңістіктің ығысуына қатысты гамильтониан инвариантты болса), бұрыштық моменттің сақталуы (егер кеңістік пен потенциал изотропты болса). Электр зарядының сақталуы да зарядталған бөлшектердің толқындық функцияларының фазалық түрлендіруі кезіндегі инварианттылығымен байланысты. Физикадағы сақталу заңдарының көптеген жағдайлары расында симметрияның кейбір негізгі қасиеттерінің салдары болып табылады.

Симметрияны екі түрге бөлуге болады: дискретті және үздіксіз, яғни олардың сәйкесінше дискретті немесе үздіксіз түрлендірулеріне бағынуына байланысты. Дискреттік симметрияның мысалы ретінде көптеген биологиялық, олардың қатарында адамның да денесінің жуықталған солды-оңды симметриясын келтірелік. Элементар бөлшектер физикасында аналогиялық симметрияны байқаймыз: күшті (ядролық), электромагниттік және гравитациялық әсерлесулеріндегі жақсы симметрия болып табылатын жұптылық, алайда әлсіз әсерлесуде сақталмайды.<sup>2</sup> Табиғаттың дискреттік симметриясының өзге де маңызды (өте жақсы) мысалдары ретінде  $CP$ ,  $T$ , және  $CPT$  симметрияларын айтуға болады.<sup>3</sup>

Түрлендірулердің үздіксіз жиынымен байланысқан симметрияны – үздіксіз симметрия деп атайды. Үшөлшемді бұрылыс кезіндегі  $SO(3)$  симметрия группасы (үздіксіз болатын Эйлер бұрыштарымен сипатталады) үздіксіз симметрияның айқын мысалы болады.

Симметрияларды тағы екі категорияға бөлу мүмкіндігіміз бар: кеңістік пен уақыт бойынша (дербес жағдайда, уақыт немесе кеңістік түрлендірулері кезіндегі инварианттылықпен байланысты) және ішкі симметриялар (мысалы, изоспіндер. Төменде қараңыз).

Теориялық физиканың 20-ғасырдағы алға жасаған үлкен қадамы: әсерлесудің пішінін (күштің түрін) анықтау үшін

<sup>2</sup> Қазіргі заманғы терминдерге сәйкес  $W$  және  $Z$  бозондарының алмасуларымен байланысқан әлсіз әсерлесулер кезінде жұптылық сақталмайды.

<sup>3</sup>  $C$  - «зарядтық түйіндес» симметриясы, яғни бөлшек пен антибөлшектің алмасуы кезіндегі симметрия, ал  $T$  – уақыттың кері бұрылуы. Төменде қараңыз.

симметрияның талабы жеткілікті түрде күшті болу мүмкіндігінің түсінігі енгізілді. Мысалы, зарядталған бөлшектер мен электромагниттік өрістің әсерлесуі туындысының түрі<sup>4</sup> минималдық ережесімен анықталады. Оның (минималдық ереженің) өзіндік сипаттамаларына сәйкес векторлық және скалярлық потенциалдар гамильтонианға келесі түрде енеді:

$$H = \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m} + q\phi + \dots$$

Пішінінің осындай болуы келесі талаптың орындалуын қажет етеді: электронның толқындық функциясын қайта параметрлеу мүмкіндігі болуы мақсатында қандай да  $f(\mathbf{r}, t)$  фазалық көбейткіші уақыт пен кеңістікке тәуелді

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{if(\mathbf{r}, t)} \psi(\mathbf{r}, t)$$

болуы қажет. Айтылған талаптың осындай түрі кеңінен белгілі (14-тарауды қараңыз).

Тіпті толқындық функциясы өлшемдік түрлендірулер кезінде біртекті емес түрленетін фотонның бар болуының қажеттілік шарты осы талаптың салдары. Енді Лоренцтің күші тәрізді эмпирикалық заңдар минималдық принциптің салдары ретінде қайта қабылданды. Бұл симметрия талабының күшті пішіні: кеңістік пен уақытқа тәуелді түрлендірулер кезінде жүйе тұрақты болады және оның әсерлесу түрі *өлшемдік принциптің* талабымен бір мәнді анықталады.

Электромагнетизм жағдайында түрлендіру группасы болып фазалық түрлендіруі -  $U(1)$  группасы табылады, ол әрі коммутативтік (абельдік) те. К.Н. Янг пен Р.Л. Миллс [Yang and Mills (1954)] және Р. Шоу [Shaw (1954)] толқындық функцияның көп компоненттік жиынына локальдық түрлендіруді қолдануының талабын модель ретінде құрастырып, өлшемдік принципті сол модельге кеңейтті (таратты). Ендігі талап – теория қайта түрлендіруге (өлшемдік түрлендіру)

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow U(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)$$

қатысты инвариантты болуы қажет болды. Мұндағы  $U(\mathbf{r}, t)$  -  $SU(2)$ ,  $SU(3)$ ,  $SO(3)$  және т.б. группалардың элементін өкілеттейтін матрица. Ол жалпы коммутативтік емес (абельдік емес) группадағы

<sup>4</sup> Релятивистік емес кванттық механикадағы туындысыз әсерлесулер, мысалы  $g\mu_B \mathbf{s} \cdot \mathbf{B}$  үшін мөлшерлік принциптің талабы төмендегідей: өлшемдік потенциалдар тек  $\mathbf{E}$  электрлік және  $\mathbf{B}$  магниттік өрістер түрлерінде ғана пайда болады.

таңдалған модельге тәуелді. Қазіргі кезде бұл Янг-Миллс теориясы ретінде танымал.

Расында іргелі әсерлесулердің стандарттық моделі: күшті әсерлесулер үшін кванттық хромодинамика, ал электроәлсіз әсерлесулері үшін Глэшоу-Вайнберг-Салам (Glashow-Weinberg-Salam) моделінің барлығы осы тектес теориялары (бірінші жағдай үшін  $SU(3)$  группасы және екіншісі үшін  $SU(2) \times U(1)$  группасы) екендігі керемет факт. Гравитациялықтан өзге *барлық* негізгі іргелі, физикалық құбылыстарды сипаттаудағы стандарттық модельдің айтарлықтай жегістігі Табиғаттың негізінде өте жоғары тривиалдық емес концептуалдық бірігудің тұрғандығын болжайды ('т Хоофт).<sup>5</sup>

Түбінде симметрияға екі түрлі әдістермен қол жеткізуге болады: не айқын, не жасырын. Біріншісі Табиғаттағы симметрияны іске асырудың қарапайым әдісі: күйлердің мультиплетіне тиесілі күйлердің арасындағы сетінеудің энергиясын табу нәтижесінде, симметрияның нақты операциясына қатысты өзара түрлендіру арқылы жету. Алайда, бұл симметрияны жүзеге асырудың жалғыз әдісі емес. Осы жағдайда физика заңдары мен гамильтонианның инвариантты болуы, ал негізгі күйдің инвариантты болмауы да мүмкін.

Адам денесінің солы-оңды симметриясының мысалын қарастыратын болсақ, дәлдік симметрияны үш түрлі әдіспен іске асырылуы мүмкін. Әрбір адамның жүрегі ортасында солды-оңды симметриялы болуы мүмкін; немесе әрбір жүрегі сол жағында болатын адамға жүрегі оң жағында болатын, ал қалған сипаттамалары тектес адам табылады (серіктестің жұптылығы); немесе барлық физикалық және биологиялық заңдар симметриялы<sup>6</sup> болса дағы, барлығының жүрегі сол жағында, яғни жүрегі сол жағындағы адамдардың да, жүрегі оң жағындағы адамдардың да болуына рұқсат берілуі мүмкін (*5.1-сурет*). Табиғаттың қалауындағы соңғы вариант «спонтандық бұзылған» симметрия деген атаумен кеңінен белгілі. *5.2.1- бөлімшесін қараңыз.*

Спонтандық бұзылған симметрияның белгілі мысалы ретінде кейбір металдарда (ферромагнетиктердегі) жүретін спонтандық магниттелуді келтірейік. Анықталған критикалық температурадан төмен барлық спиндер бір жаққа бағытталады, осылайша

---

<sup>5</sup> Дәлірек айтқанда Глэшоу-Вайнберг-Салам моделінің бір бөлігі өлшемдік принципімен толықтай анықталмаған Хиггс бөлшегімен байланысты. Женева қаласындағы ЦЕРН ғылыми орталығының Үлкен Адрондық Коллайдеріндегі жүргізілуі жоспарланған тәжірибелер «модельді одан әрі дамыту қажет пе, егер солай болса, онда қандай әдіспен?» деген сұраққа жауапты іздейді.

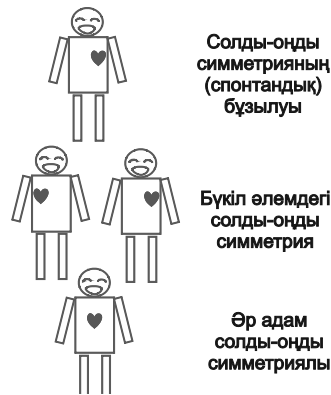
<sup>6</sup> Әрине, талдау мақсатында ғана болғандықтан, бұл дәрекілеу әрі жеңілдегілген мысал. Тереңірек деңгейде биологиялық жүйелер (мысалы, ДНК) солды-оңды симметриялы емес.

гамильтонианның  $SU(3)$  бұрылу инварианттылығы «бұзылады». Спонтандық бұзылған симметрия қатты дене физикасы мен элементар бөлшектер физикасының көптеген маңызды қосымшаларында кездеседі.

Парижде өткен ТН 2002 конференциясының қорытынды талдауында К.Н.Янг 20-ғасырдағы теориялық физиканы үш «әуенмен» сипаттады:<sup>7</sup>

### «Симметрия, кванттау және фазалық көбейткіш»

Бүгінгі күні іргелі әсерлесулердің стандарттық моделінің шегінен асып, Табиғатты тереңірек деңгейде түсіну үшін осы түсініктерге қосымша жаңа принциптер мен парадигмалар шындығында қажет пе, осы мәселені анықтау керектігі туындайды.



5.1-сурет. Солды-оңды симметрияны жүзеге асырудың түрлі жолдары

## 5.2 Кванттық механикадағы симметриялар

Кванттық механикалық жүйедегі симметрияның қатысы  $U$  унитарлық операторының табылуымен беріледі. Ал осы оператор гамильтонианмен коммутациялайды:

$$[U, H] = 0. \quad (5.1)$$

Сондай-ақ унитарлық операторы

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1$$

шартын қанағаттандырады, онда келесі теңдік енді (5.1) өрнегіне

$$U^\dagger H U = H \quad (5.2)$$

<sup>7</sup> «Фазалық көбейткіш» түсінігі жөнінде 8- және 14-тарауларын қараңыз.

эквивалентті болып табылады.  $U$  түрлендіруі гамильтонианды инвариантты етіп қалдырады. Біз мұндай операторлармен танысқан болатынбыз, мысалы

$$U = e^{i\hat{J}\cdot\omega}$$

кеңістік бұрылыстарын сипаттайды;

$$U = e^{i\hat{p}\cdot r_0/\hbar}$$

кеңістіктің ығысуын сипаттайды.

### Сақталу

Симметрияның мүмкін болатын салдарларының бірі – бөлшек зарядының сақталуы. Эрмиттік  $G$  операторымен сипатталатын динамикалық шаманың  $|\psi\rangle$  өзіндік күйі болсын деп пайымдайық. Оның түрі

$$U \approx 1 - i\epsilon G + \dots$$

жазылады және  $G$  операторы  $U$ -дың генераторы болады. Ал (5.1) және (5.2) өрнектерінен

$$[G, H] = 0 \quad (5.3)$$

коммутаторын аламыз. Эрмиттік  $G$  операторы динамикалық шаманың  $|\psi\rangle$  өзіндік күйін сипаттайтын болғандықтан,

$$G|\psi(0)\rangle = g|\psi(0)\rangle.$$

Ал уақыттың  $t > 0$  моментінде күйдің теңдеуі

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

болады, сондықтан

$$G|\psi(t)\rangle = Ge^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar}G|\psi(0)\rangle = g|\psi(t)\rangle.$$

Жүйе уақыт бойынша даму барысында  $G$  өзіндік күйі болып табылады, ал  $g$  заряды сақталады.

Электр зарядының сақталуын аналогиялық түрде жазуға болады.  $Q$  заряд операторы бөлшектің күйіне келесі түрде әсер етеді:

$$Q|e\rangle = -e|e\rangle;$$

$$Q|p\rangle = +e|p\rangle;$$

$$Q|n\rangle = 0;$$

$$Q|\pi^+\rangle = +e|\pi^+\rangle,$$

және т.с.с. Мұндағы кет-векторлары сәйкесінше бір электронның, протонның, нейтронның және пионның күйлерін өрнектейді.  $Q$  операторы барлық белгілі (гравитациялық, электроөлсіз және күшті) күштерді қамтитын гамильтонианмен коммутациялайды. Осы дерек бүтіндей жүйенің жалпы электр зарядының сақталуына кепіл болады. Оқулығымыздың көпшілік бөлігінде қабылданған релятивистік емес жуықтауындағы электр зарядының сақталуы бөлшектер саны сақталуының салдары болып табылады; және керісінше, релятивистік жағдайда бөлшектердің жаратылуы мен жойылуы мүмкін кезеңдерде (алайда толық энергия сақталады), электр зарядының сақталуы тривиалдық емес таңдау ережелерін береді.

Жалпы сақталу дегеніміз

$$0 = i\hbar \frac{dG}{dt} = i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} + [G, H] \quad (5.4)$$

тендеуінің орындалуын білдіреді (2.4.2-бөлімін қараңыз).

Уақытқа тым тәуелді емес операторлар үшін осы шарт (5.3) тендеуіне дейін жеңілдейді. Қосымша мүше үшін симметрияның қарапайым мағынасы бар. Алдымен қандай да параметрге және  $t$  уақытқа тәуелді  $G(\alpha, t)$  генераторы (немесе сәйкес келетін унитарлық операторы) табылсын деп қабылдайық. Онда (5.4) тендеуі

$$G(\alpha, t) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} G(\alpha, t_0) e^{iH(t-t_0)/\hbar}$$

өрнегіне эквивалентті болады. Оны тексеру қиын емес, уақыт бойынша туынды алатын болсақ болғаны.

Оның алдындағы тендеуінің

$$G(\alpha, t) e^{-iH(t-t_0)/\hbar} = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} G(\alpha, t_0) \quad (5.5)$$

мағынасы бар.

Егер күй эволюциясының түрленуі түрленген күйдің эволюциясына тең болса, яғни түрлендіру динамикалық эволюциямен коммутациялайтын болса, онда  $G$  сақталады (симметрия болады) дейді. Төменде Галилей үдеуінің мысалы келтірілген.

### Сегінеу

Симметрияның мүмкін болатын өзге салдары – ол энергия күйінің сегінеуі. Келесі стационарлық күйін

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

қарастырайық және  $H$  гамильтонианымен коммутациялайтын  $G$  операторы табылсын деп болжамдайық. Демек, мұннан

$$HG|\psi_n\rangle = GH|\psi_n\rangle = E_n G|\psi_n\rangle$$

аламыз. Онда бірнеше мүмкін болатын нұсқалар бар. Біріншіден,  $|\psi_n\rangle$  күйі  $G$  операторының анықталу облысында жатпауы ( $G|\psi_n\rangle \notin \mathcal{H}$ ) мүмкін; екіншіден,  $G$  операторы  $|\psi_n\rangle$  күйін жойып жіберуі, яғни  $G|\psi_n\rangle = 0$  мүмкін; үшіншіден,  $|\psi_n\rangle$  күйі  $G$  операторының өзіндік күйі болуы да мүмкін:

$$G|\psi_n\rangle = \text{const} \cdot |\psi_n\rangle.$$

Осы жағдайлардың бірі де бізді қызықтырмайды.

Алайда, егер аталған жағдайлардың бірі орындалмаса (яғни  $G|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}$ ;  $G|\psi_n\rangle \neq 0$ ;  $G|\psi_n\rangle \propto |\psi_n\rangle$ ), онда  $n$  деңгейі сетінейтінін табамыз: біз энергияның мәні сондай, бірақ энергияның басқа  $G|\psi_n\rangle$  өзіндік күйін таба аламыз. Сондықтан  $G$  операторымен  $|\psi_n\rangle$  күйіне бірнеше рет әсер етудің нәтижесінде, күйлердің сетінеген жиынын аламыз. Біз осы тәрізді мысалдардың бірнешесімен таныс болдық. Мысалы, егер гамильтониан бұрыштық моментінің  $L_i$  операторларымен (мұндағы  $i=1,2,3$ ) коммутациялайтын болса, онда ол үшөлшемді бұрылыстарға қатысты инвариантты. Берілген  $L$  орбиталдық кванттық санға сәйкес келетін энергия деңгейі  $(2L+1)$  рет сетінеген болып шығады. Сетінеудің осы түрін  $L_x$ ,  $L_y$  операторларының энергияның (және  $L_z$ ) өзіндік күйіне  $|E, L^2, L_z\rangle$  тривиалдық емес әсерлерінің нәтижесінен көреміз.

### 5.2.1 Негізгі күй және симметрия

*5.1-бөлімінде* талдағанымыздай, симметриялық түрлендірулер кезінде негізгі күйдің тәртібі өте маңызды. Кванттық механикада еркіндік дәрежелері шекті болатын негізгі күй симметрияға қатысты инвариантты, әрі жалғыз болады. Енді осы сұрақты формальді емес тұрғысынан талдайық. Алдыңғы параграфта егер  $H$  гамильтонианы  $U$  (унитарлық) операторымен коммутациялайтын және оның  $|\psi_0\rangle$  өзіндік күйі болса, онда  $U|\psi_0\rangle$  күйі де энергиясы сондай өзіндік күй болатынын көрсеткенбіз. Егер негізгі күй жалғыз болса, онда ол міндетті түрде инвариантты. Жалғыздық өзіне түйіндес операторлар жөніндегі математикалық ұстаным ғана бола алмайды. Тривиалдық мысал ретінде тектес операторларға еселі

гамильтонианның негізгі күйі жалғыз болмайтынын келтірейік. «Нағыз»  $|\psi_0\rangle$  негізгі күй болу үшін ол *орнықты* болуы қажет, яғни егер біз кіші ауытқуды  $\lambda V$  қосатын болсақ, онда жаңа  $|\lambda\rangle$  негізгі күй  $\lambda \rightarrow 0$  шектік жағдайда келесі шартты  $|\lambda\rangle \rightarrow |\psi_0\rangle$  қанағаттандыруы қажет. Бұл сетінеген субкеңістікте жататын негізгі күй үшін ақиқат бола алмайды. Екі күйі бар жүйе мысалы

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & \lambda V \\ \lambda V & E_0 \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

қажетті деңгейде жалпы бола алады: гильберттік кеңістіктен тыс тек екі «сетінеген»  $|\pm\rangle$  күйлерге әсер ететін ауытқуды ойлап таба аламыз. Осы жағдайда болжамдалған  $|+\rangle$  немесе  $|-\rangle$  негізгі күй үшін нағыз  $|\lambda\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$  негізгі күй (тіпті  $V$  - шексіз кіші диагональдық емес элементі үшін) кіші ауытқу болмайды. Кез келген еркіндік дәрежесі шекті сан болатын кванттық механикалық жүйе үшін туннельдік эффектілер әртүрлі негізгі күйлерді байланыстыратын диагональдық емес элементтерінің көтерілуіне (мәндерінің артуына) әкеледі.

Өте жалпыланған теоремаға сәйкес: кәдуілгі кинетикалық мүшелер мен жұптық әсерлесу потенциалдарынан құралатын «қисынды» гамильтониандар үшін жалпы айтқанда негізгі күй (яғни, дискретті спектр) болса, онда ол жалғыз болады. Бұл бірөлшемді жүйелердің сетінемеген теоремасының жалпыламасы. Шындығында теорема одан да артық нәрсені дәлелдейді: негізгі күйдің функциясын барлық жерде оң таңбалы етіп таңдауға болады. Қызығатын оқырман мұны [Reed and Simon (1980b)] кітабының 4-томынан таба алады. Бұл физикалық нақты есептерде негізгі күйдің жалғыздығын, сондай-ақ симметриялы болатынын көрсетеді.

*Еркіндік дәрежелері шексіз сан* болатын жүйелер жағдайында (5.6) теңдеуіндегі әртүрлі вакуумдық күйлерді біріктіре алатын «кіші» ауытқудың бар болуын (бұл зиянсыз болып көрінетін болжам) енді мұқият қайта қарау қажет. Дәл осы жерде еркіндік дәрежесі шектіден шексізге өту кезінде, мысалы қатты дене немесе кванттық өріс теориялары үшін жағдай өзгеруі мүмкін. Кездейсоқ магниттелу жағдайы үшін шексіз спиндердің санын төңкеру үшін шексіз энергия қажет, демек, диагональдық емес элементтер пайда болмайды. Ал жеткілікті төменгі температураларда (энергия энтропиялық эффектілердегі еркін энергияны жеңетін  $E - T S$  кездерде) жүйе барлық спиндері бағытталатын негізгі күйді таңдайды.

Еркіндік дәрежесі шексіз болатын жүйелерде симметрияның жүзеге асырудың екі тәсілі болуы мүмкін: 1) симметриялық

жалғыз негізгі күйге ие бола отырып, осы жағдайда барлық қозған күйлер әртүрлі сетінеген мультиплеттерде болады, симметрия стандарттық айқын жолымен жүргізіледі; 2) симметриялық емес негізгі күйдің табылуымен орындалады. Соңғы жағдайда «спонтандық бұзылған симметрия» дейді, ал шындығында симметрия бұзылған жоқ. Дербес жағдайда, егер екінші вариант үздіксіз симметриялық жүйеде жүзеге асырылса, онда ол жүйе міндетті түрде нольдік энергиялы кейбір қозуларды дамытады (Намбу-Голдстоун қозулары).<sup>8</sup>

### 5.2.2 Жұптылық

Жұптылық Табиғаттың ең жуықталған симметрияларының бірі. Бұл кеңістіктің шағылуына қатысты дискреттік симметрия, яғни

$$\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}.$$

Толқындық функциялар

$$\mathcal{P}|\psi(\mathbf{r})\rangle = |\psi(-\mathbf{r})\rangle$$

түрлендірулеруіне ұшырайды. Сонымен қатар операторлар төмендегідей

$$\mathcal{P}O(\mathbf{r}, \mathbf{p})\mathcal{P}^{-1} = O(-\mathbf{r}, -\mathbf{p})$$

түрленеді. Егер гамильтониан жұптылыққа қатысты инвариантты болса, онда

$$\mathcal{P}H\mathcal{P}^{-1} = H$$

немесе  $\mathcal{P}H = H\mathcal{P}$  теңдеулері орындалып, жұптылық сақталады.  $\mathcal{P}$  – симметрия операторы. Ал  $\mathcal{P}$  операторы  $H$  гамильтонианмен коммутациялайтын жағдайда, онда стационарлық күйлер  $\mathcal{P}$  операторының өзіндік мәндері ретінде таңдап алуымызға болады. Соңғы оператордың өзіндік мәндері шектеулі, яғни  $\pm 1$  болатыны шүбәсіз, себебі

$$\mathcal{P}^2 = 1.$$

Ал стационарлық күйлерді: жұп күйлер

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) = +\psi(\mathbf{r})$$

<sup>8</sup> Бұл Намбу-Голдстоун теоремасы ретінде танымал. Қараңыз [Nambu (1960), Nambu and Jona-Lasinio (1961), Goldstone, Salam and Weinberg (1962), Strocchi (1985)]. Табиғаттың көптеген жүйелерінде Намбу-Голдстоунның тербелмелі модасында симметрия жүзеге асырылады. Солардың ең тамаша мысалдарының бірі – элементар бөлшектер физикасындағы жеңіл  $\pi$ -мезондарды «жасырын»  $SU(2)$  симметриялы жуықталған Намбу-Голдстоунның бөлшектері ретінде түсіндіруі болып табылады.

және тақ күйлер

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r})$$

деп жіктеуге болады.

Потенциал сфералық симметриялы  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  болған жағдайда, жұптылық жақсы кванттық сан болып табылады. Мұндай жағдайда бұрыштық момент те сақталады және нақтылы бұрыштық моментке ие болған күй нақтылы жұптылықты қабылдайды. Мысалы, қарапайым бір бөлшекті жүйенің (немесе бір бөлшекті салыстырмалы қозғалысқа келтірілген екі бөлшекті жүйенің)  $R(r)Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$  толқындық функциясының жұп немесе тақ болуы

$$\mathcal{P} = (-1)^\ell \quad (5.7)$$

түрінде анықталады.

Алайда мұндай қатынас екі симметрияның (үшөлшемді бұрылыстарға және кеңістіктің шағылуына қатысты инварианттылық) принципіалды тәуелсіз тұжырымдамалары болатындығын атап өтелік. Мысалы, шағылуға

$$V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$$

қатысты инвариантты  $V(x^2 + 2y^2 + 7z^2)$  потенциалы сфералық симметриялы болуы міндетті емес. Және керісінше, кеңістік бұрылыстарына қатысты инвариантты болатын кейбір әсерлесулер

$$V = g \mathbf{r} \cdot \mathbf{s}$$

жұптылыққа қатысты инвариантты бола алмайды. Мұндағы  $\mathbf{s}$  – спин операторы. Элементар бөлшектер физикасындағы әлсіз әсерлесулерде жұптылық сақталмайды.

Жұптылық пен бұрыштық моменттің арасындағы қатынас (5.7) теңдеуіндегідей әрқашан қарапайым бола бермейтін тағы бір мысал келтірейік. Ол – өзара әсерлеспейтін бір бөлшектен асатын жүйе, бірақ олардың барлығы ортақ сфералық потенциалда қозғалады. (Өте дәрекі жуықтауда атомдық жүйелерді дәл осылайша қарастыруға болады.)

Толық толқындық функция нақтылы  $\ell_i$  бұрыштық моментіне ие болатын әрбір бөлшектің толқындық функцияларының көбейтіндісі ретінде табылады. Ал  $L$  толық бұрыштық момент

$$\ell_1 \otimes \ell_2 \otimes \ell_3 \dots = \ell_1 + \ell_2 + \dots + \ell_N \oplus \ell_1 + \ell_2 + \dots + \ell_N - 1 \oplus \dots$$

жіктеуіне кіретін мүмкін болатын мәндердің бірін қабылдайды. Сонымен, жұптылық қарапайым түрде анықталады:

$$\mathcal{P} = \prod (-1)^{l_i}.$$

Алайда,  $L$  мен  $\mathcal{P}$  арасында қарапайым қатынас жоқ.

### Ішкі жұптылық

Маңызды эмпирикалық факт болып: кез келген элементарлық бөлшек орбиталдық қозғалыспен байланысты жұптылықтан басқа, нақтылы ішкі жұптылыққа ие болуы табылады. Бұның әрбір бөлшекке тән спині оның орбиталдық қозғалысына ешқандай қатысы жоқ екендігінің кішігірім аналогиясы. Белгілі элементар бөлшектердің арасындағы кейбірінің ішкі жұптылықтарын көрсетейік:

$$\mathcal{P}|\pi\rangle = -|\pi\rangle; \quad \mathcal{P}|K\rangle = -|K\rangle; \quad \mathcal{P}|p\rangle = +|p\rangle;$$

$$\mathcal{P}|n\rangle = +|n\rangle; \quad \mathcal{P}|\bar{p}\rangle = -|\bar{p}\rangle$$

және т.б. Егер әсерлесу кезінде жұптылық сақталатын болса, онда толық жұптылық (орбиталдық толқындық функциялардың жұптылығы мен әсерлесуге қатысатын барлық бөлшектердің ішкі жұптылықтарының көбейтіндісі) кез келген үдерісінде сақталады.

Спин операторы жұптылыққа қатысты түрленуі келесі түрде жүргізіледі:

$$\mathcal{P}\mathbf{s}\mathcal{P}^{-1} = \mathbf{s},$$

яғни орбиталдық бұрыштық моментке ұқсас. Қарапайым  $\mathbf{p}$  импульс операторы координата операторы сияқты түрленеді

$$\mathcal{P}\mathbf{p}\mathcal{P}^{-1} = -\mathbf{p}.$$

Жалпы, барлық операторлардың жұптылыққа қатысты тәртібі бойынша жіктеуге болады. Импульс, координаталар, векторлық потенциал және т.б. *векторлар* болады; ал бұрыштық момент операторлары (спин операторын қоса) *аксиалдық векторлар* болады. Скалярлық шамалар (бұрылысқа қатысты инвариантты) жұптылығының таңбасы өзгертін болса, онда оларды *псевдоскаляр* деп атайды. Ал нағыз скалярлар жұптылыққа қатысты инвариантты болып қала береді.

Жұптылық табиғи анықтамасына қарамастан Табиғаттың дәл симметриясы болмайды, ол тек жуықталған симметрия. Жоғарыда аталғандай, әлсіз әсерлесулер (қазіргі заманғы терминдерге сәйкес  $W$  немесе  $Z$  бозондармен алмасу) жұптылықты бұзады. Шындығында, симметрия абсолюттік ереже емес, қарастырып отырған әсерлесудің (күштің) қасиеті екендігін көрсететін жақсы мысалы.

### Жұптылық операторының нақты түрі

Осы сұрақ жұптылық операторының айқын түрін құрастыру үшін  $q$  және  $p$  операторларының тұрғысынан қызығушылық туғызатыны анық. Алдымен бірөлшемді жүйені қарастырайық. *Кез келген* осындай жүйе үшін

$$A = \frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2} - \frac{\hbar}{2}$$

операторын талқылайық. Бұл, аддитивті тұрақтыдан басқасы,  $m = \omega = 1$  болатын гармоникалық осциллятордың қарапайым гамильтонианы. Осциллятор үшін Гейзенберг теңдеуінің белгілі шешімін пайдаланайық, (7.60) және (7.61) теңдеулерін қараңыз; эволюция периодының жартысынан кейін  $q$  және  $p$  таңбаларын өзгертетіні мәлім:

$$e^{\frac{i}{\hbar} A \pi} p e^{-\frac{i}{\hbar} A \pi} = -p, \quad e^{\frac{i}{\hbar} A \pi} q e^{-\frac{i}{\hbar} A \pi} = -q. \quad (5.8)$$

Бірақ, шындығында (5.8) теңдеуінің нәтижесі *тек*  $q$  және  $p$  канондық коммутаторларына тәуелді болады, демек кез келген жүйеде орынды. Яғни, жүйедегі жұптылық операторының кез келген айқын түрі:

$$\mathcal{P} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} A \pi\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2} - \frac{\hbar}{2}\right) \pi\right] \quad (5.9)$$

болады. Бір қарағанда алған нәтиже адамды абдыртуы да мүмкін: жұптылыққа қатысты жұп болатын оператор қалайша гамильтонианмен коммутациялай алады? Оған қоса, жиілігі  $\omega = 1$  немесе массасы  $m = 1$  жағдайларының қандай ерекшеліктері бар?

Осы мәселелерді анықтау үшін, алдымен  $A$  операторының өзіне-өзі түйіндес және оның өзіндік векторлары толық ортогоналдық базисті құрайтынын сөзсіз атап өтуіміз керек: гармоникалық осциллятордың стандарттық өзіндік күйлері. Сол күйлерге  $\mathcal{P}$  операторы

$$\mathcal{P}(n) = e^{in\pi} |n\rangle = (-1)^n |n\rangle$$

түрінде әсер етеді. Сондықтан, расында  $\mathcal{P}$  – жұптылық операторы. Басқа кез келген жүйенің күйлері сияқты  $\{|n\rangle\}$  базисі бойынша жіктеуге болады:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(x), \quad \varphi_n(x) \equiv \langle x | n \rangle, \quad (5.10)$$

бұдан  $\mathcal{P}$  әрқашан жұптылық операторы ретінде әсер ететінін көреміз.

Енді  $A$  операторының жұп және тақ өзіндік күйлерін бөліп алайық. Кез келген жүйеде кез келген оператор базисының пішіні

$$O = \begin{pmatrix} O_{жж} & O_{жт} \\ O_{тж} & O_{тт} \end{pmatrix}$$

(мұндағы  $жж$  – жұп-жұп,  $тж$  – тақ-жұп, ... күйлері) болады. Дербес жағдайда  $\mathcal{P}$  оператордың пішінін жазайық:

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Осы пішіннің ерекшелігі кез келген унитарлық түрлендірулерге қатысты инвариантты болады (7-тарау), яғни блоктық-диагональдық түрін сақтайды

$$S = \begin{pmatrix} S_{жж} & 0 \\ 0 & S_{тт} \end{pmatrix} \Rightarrow S\mathcal{P}S^\dagger = \mathcal{P}, \quad (5.12)$$

яғни түрлендіру кезінде жұп және тақ күйлер араласпайды. Енді, егер  $H$  жұп болса, онда эволюция операторының айқын түрі (5.12) теңдеуі типтес болады және, демек, жұптылықпен коммутациялайды.

Ал егер  $A$  операторының анықтамасындағы жиілік пен массаны өзгертетін болсақ не болар еді? Ол үшін келесі операторды қарастырайық:

$$\mathcal{P}_\omega = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 \frac{q^2}{2} - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \frac{\pi}{\omega} \right] \equiv \exp \left( \frac{i\pi A_\omega}{\omega\hbar} \right).$$

Шындығында, ештеңе де өзгермейді. Оған қоса, жаңа  $A_\omega$  операторының  $|n_\omega\rangle$  өзіндік мәндерін  $D$  масштабтық түрлендіруінен шығарып алуымызға болады

$$D: p \rightarrow \frac{p}{\sqrt{m\omega}}, \quad D: q \rightarrow q\sqrt{m\omega}; \quad |n_\omega\rangle = D|n\rangle.$$

$D$  құрылымы (5.12) теңдеуімен бірдей екені айқын. Ал  $|n_\omega\rangle$  базисінде  $\mathcal{P}_\omega$  операторының пішіні (5.11) теңдеуіндегі болатыны анық, бірақ мәселе оның пішіні  $|n\rangle$  базисінде де сондай болады; және керісінше, алғашқы  $\mathcal{P}$  операторының пішіні  $|n_\omega\rangle$  базисінде де тура сондай болады. Расында, (5.12) теңдеуінен

$$\langle n_\omega | \mathcal{P} | k_\omega \rangle = \langle n | D^\dagger \mathcal{P} D | k \rangle = \langle n | \mathcal{P} | k \rangle$$

оның салдарын аламыз. Басқаша айтатын болсақ, сыртқы түрлеріне тәуелсіз  $\mathcal{P}_\omega$  және  $\mathcal{P}$  операторлары – бір оператор!

Енді осы айтылғанды көпөлшемді жүйелер үшін жалпылау қиын емес; ол үшін (5.9) теңдеуінде оператордың декарттық координаталарындағы әрбір компоненттерін көбейту қажет. Осы бөлімнің нәтижелері элементар бөлшектердің ішкі жұптылығына емес, тек «орбиталдық» жұптылығына қатысты екені анық.

### 5.2.3 Уақыттың кері бұрылуы

Симметрияның өзге маңызды мысалы болып  $T$  уақыттың кері бұрылуы табылады. Классикалық механикада әлсіз күштің әсерінен қозғалатын бөлшек үшін Ньютонның теңдеуі:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V$$

уақыттың  $t \rightarrow -t$  кері бұрылуына инвариантты. Бұдан шығады, егер  $(\mathbf{r}_1, t_1)$  нүктесінен  $(\mathbf{r}_2, t_2)$  нүктесіне дейін қозғалыс мүмкін болса, онда  $(\mathbf{r}_2, -t_2)$  нүктесінен  $(\mathbf{r}_1, -t_1)$  нүктесіне дейін сол траекториямен, бірақ қарама-қарсы бағыттағы қозғалыс та мүмкін. Ал теңдеудің мүмкін болатын шешімдері  $\mathbf{r}(-t) = \mathbf{r}(t)$  және  $\mathbf{p}(-t) = \mathbf{p}(t)$ . Және керісінше, егер күштің құрамында жылдамдыққа пропорционал үйкеліс те бар болса, онда уақыттың кері бұрылуында қозғалыс мүмкін болмас еді.

Кванттық механикада динамика Шредингер теңдеуімен өрнектеледі

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = H\psi(\mathbf{r}, t). \quad (5.13)$$

Мысалы үшөлшемді  $V(\mathbf{r})$  потенциалындағы қозғалатын бөлшек үшін мынадай

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

болады. Ал  $t \rightarrow t' = -t$  түрлендіруі теңдеуге

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi(\mathbf{r}, -t') = H\psi(\mathbf{r}, -t')$$

жалпы басқа, Шредингер теңдеуінің түпнұсқалық пішініне өзгешелік пішін береді. Кванттық механикалық заңдардың уақыттың кері бұрылуына инвариантты болуы жүзеге асыру мүмкін болмайтын сияқты көрінеді.

Іс жүзінде уақыттың кері бұрылуында қозғалыстың толқындық функциясы тек  $\psi(\mathbf{r}, -t)$  түрінде берілуі қажетті емес. Алдыңғы теңдіктің түйіндесін табатын болсақ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi^*(\mathbf{r}, -t') = H^* \psi^*(\mathbf{r}, -t'),$$

оның алғашқы (5.13) теңдеуіне ұқсайтынын көреміз. Шредингердің түпнұсқалық теңдеуін қалпына келтіруге болады, егер  $O$  (анти-)унитарлық операторы бар және оның түрі:

$$OH^*O^{-1} = H$$

болса. Осы жағдайда кері қозғалыстың толқындық функциясы

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = O\psi^*(\mathbf{r}, -t) \quad (5.14)$$

түрінде анықталады да, жаңа  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)$  толқындық функциясы Шредингердің түпнұсқалық теңдеуіне тектестігін қанағаттандырады. Біздің жағдайымызда уақыттың кері бұрылуындағы қозғалыс расында кванттық механикадағы эволюция болып табылады.

Егер  $O$  операторы кез келген  $\psi$  және  $\phi$  векторлық күйлері үшін

$$\langle O\phi | O\psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$$

қатынасын қанағаттандыратын болса ((5.14) теңдеуін қараңыз), онда оны *антиунитарлық оператор* деп атайды. Керісінше, қарапайым  $U$  унитарлық операторы

$$\langle U\phi | U\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$$

кез келген күй векторларының жұбы үшін осы теңдікті қанағаттандырады. Теорияның барлық физикалық болжамдары унитарлық немесе антиунитарлық түрлендірулер кезінде бұрынғыдай қалатыны айқын. Кванттық механикадағы симметрияға қол жеткізудің мүмкіндіктерін келесі теоремадан белгілі.

**5.1-теорема (Вигнер теоремасы).** *Кванттық механикадағы кез келген симметриялық түрлендіруге не унитарлық, не антиунитарлық түрлендірумен қол жеткізіледі.*

Тағы да қайта ескертейік: уақыттың кері бұрылуы ( $T$ ) кезінде симметрия Табиғаттың абсолюттік заңы емес, түрлендірудің ерекше түрінің өзгешелігіне көбірек келеді. Алайда микроскопиялық деңгейде консервативті емес, сондықтан ( $T$ ) кезінде инвариантты болмайтын жүйелер жеңіл қабылданады. Іргелі түрлендірулер деңгейінде  $T$  өте жақсы жуықтайтын симметрия болатыны белгілі. Біздің білуімізше гравитациялық, электромагниттік және күшті түрлендірулерде  $T$  кезінде сақталады; ал әлсіз түрлендірулердің субжиынтығында  $W$  бозондар алмасуының нәтижесінде ол кішігірім ( $T$ ) бұзылады. (Аталған симметрияның бұзылуы  $CP$ -

симметриясымен байланысты. Алайда, локальдық эрмиттік гамильтонианмен сипатталған кез келген теория үшін *CPT* көбейтіндісі жақсы симметрия болып есептеледі. Ол *CPT* теоремасы ретінде көбірек танымал. Егер *CPT* Табиғаттың дәл симметриясы болса, онда *CP*-бұзылуының нәтижесінде *T*-бұзылуы да болжанады, және керісінше.) Ал  $K^0 - \bar{K}^0$  жүйесіндегі *CP*-бұзылуын талдау үшін *22.1-бөлімінің қосымшасын қараңыз.*

Уақыттың кері бұрылуы симметриясының ұлы құпиясы – іргелі әсерлесулердегі уақыттың кері бұрылуының симметриясы *T* дәл болатындай сақталатынына қарамастан, ол макроскопиялық әлемде дәрекі бұзылады: ол үшін теродинамиканың екінші заңы – энтропияның арту заңын еске алсақ болғаны: онда уақыт тілшігі әрқашан өткен шақтан болашаққа бағытталады. Макроскопиялық әлемді анықтайтын көптеген электромагниттік, химиялық және гравитациялық үдерістерге сөзсіз қатысы жоқ, саны өте аз *T* бұзылатын әсерлесулердің уақыт тілшігін бұрады деген оғаш идеядан алшақ болған жөн. Уақыт тілшігінің қалай да Ғаламның кеңеюімен байланысты болуы әбден мүмкін. Бірдей уақыт эволюциясының түсінігі Үлкен Жарылыс моментінен бастап өзгергенін біз білеміз.

#### 5.2.4 Галилей түрлендіруі

Енді бір-бірімен салыстырмалы  $\mathbf{V}$  тұрақты жылдамдақпен қозғалатын

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{V}t \quad (5.15)$$

екі  $K'$  және  $K$  санақ жүйелерін қарастырайық. Бір санақ жүйесіндегі  $\psi'(\mathbf{r}', t)$  толқындық функция екіншісіндегі  $\psi(\mathbf{r}, t)$  толқындық функциясымен қалайша байланысқан? Түрлендіру заңын табу үшін  $K$  санақ жүйесіндегі жазық толқынын  $K'$  жүйесіндегі басқа жазық толқыны ретінде қарастыру қажет. Олардың өзара қалай түрленетінін білгеннен соң, жалпы толқындық функцияның қалайша түрленетінін табуға мүмкіндік болады. Себебі кез келген толқындық функцияны жазық толқындар қатарына жіктелетінін білеміз.

Екі жүйедегі жазық толқындардың өрнектерін жазайық:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)\right]; \quad (5.16)$$

$$\psi(\mathbf{r}', t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' - E't)\right]. \quad (5.17)$$

Екі жүйедегі импульс пен энергияның байланысы классикалық механикадан мәлім:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}' + m\mathbf{V} \quad E = E' + \mathbf{V} \cdot \mathbf{p}' + \frac{1}{2}m\mathbf{V}^2. \quad (5.18)$$

Енді (5.15) және (5.18) теңдеулерін (5.16) өрнегіне әкеліп қойып, одан

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}' - E't)} e^{i\hbar\left(m\mathbf{V} \cdot \mathbf{r}' + \frac{1}{2}m\mathbf{V}^2 t\right)}$$

болатынын көреміз. Теңдіктің оң жағындағы екінші фазалық көбейткіштен оның жазық толқынға ешқандай қатысы жоқ екендігіне көзіміз жетіп тұр. Сондықтан, осы теңдікті жазық толқындардың комбинациясынан құруға болатын жалпы толқындық функция үшін орындалады деп қабылдайық:

$$\psi'(\mathbf{r}', t) = e^{i\hbar\left(m\mathbf{V} \cdot \mathbf{r}' + \frac{1}{2}m\mathbf{V}^2 t\right)} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (5.19)$$

Ал (5.19) теңдігіндегі  $\mathbf{r}$  (5.15) теңдеуіндегідей  $\mathbf{r}'$  және  $t$  арқылы өрнектелетіні анық.

Жүйе көп бөлшектерден құралған жағдайда (5.19) теңдігіндегі фаза

$$m\mathbf{V} \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2}m\mathbf{V}^2 t \rightarrow \sum_i m_i \mathbf{V} \cdot \mathbf{r}'_i + \frac{1}{2}m_i \mathbf{V}^2 t = M_{\text{мол}} \mathbf{V} \cdot \mathbf{R}_{\text{CM}} + \frac{1}{2}M_{\text{мол}} \mathbf{V}^2 t$$

түрінде анықталады. Бұл массалар орталығының координаттарымен байланысты, ал  $M_{\text{мол}}$  – толық масса еркін бөлшектің рөлін атқарады.

(5.19) түрлендіру заңы әдетте орынды және Галилей түрлендіруіне қатысты динамикалық заңның *инварианттылығын* тұспалдамайды. Әрине, біз еркін бөлшектер жағдайын қарастырып отырмыз. Енді еркін дене үшін Шредингер теңдеуінің расында инвариантты болатынын тексеріп көрейік.  $\psi$  толқындық функциясы Шредингер теңдеуін қанағаттандырады

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \psi. \quad (5.20)$$

Уақыт бойынша  $\psi'$  дербес туындысын шешуіміз қажет. Алайда (5.19) теңдеуінің оң жағы уақыттан тікелей және  $\mathbf{r} = \mathbf{r}' + \mathbf{V}t$  қатынасы арқылы жанама тәуелді екенін естен шығармауымыз керек. Сондықтан

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' &= \left( \frac{1}{2} m V^2 \psi + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi + i\hbar \mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \psi \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \left( m \mathbf{V} \cdot \mathbf{r}' + \frac{1}{2} m V^2 t \right)} = \\
&= \left( \frac{1}{2} m V^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} \psi + i\hbar \mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \psi \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \left( m \mathbf{V} \cdot \mathbf{r}' + \frac{1}{2} m V^2 t \right)} = \\
&= \left( \frac{1}{2} m V^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} \psi + i\hbar \mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \psi \right) e^{-\frac{i}{\hbar} \left( m \mathbf{V} \cdot \mathbf{r}' + \frac{1}{2} m V^2 t \right)}.
\end{aligned}$$

Соңғы мүшеде  $\partial / \partial \mathbf{r} = \partial / \partial \mathbf{r}'$  екендігі ескерілген.

Екінші жағынан,  $\psi'$  үшін кинетикалық мүшені тікелей есептеп таба аламыз:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} \psi' = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} \psi - 2i \frac{1}{\hbar} m \mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} \psi - \frac{m^2}{\hbar^2} V^2 \right] e^{-\frac{i}{\hbar} \left( m \mathbf{V} \cdot \mathbf{r}' + \frac{1}{2} m V^2 t \right)}.$$

Демек,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'^2} \psi'$$

теңдігін табамыз. Ал бұл  $K'$  жүйесіндегі эволюцияның теңдеуі, өз кезегінде ол  $K$  жүйесіндегі теңдеуімен тектес.

Мына түрлендіруі

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{V}t; \quad \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + m\mathbf{V}$$

келесі унитарлық операторымен генерацияланған

$$U = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \mathbf{V} (\mathbf{p}t - m\mathbf{r}) \right].$$

Мұны  $\mathbf{V}$  шексіз кіші шамасын ескеріп, тексеру оңай. Түрлендіру генераторы ретінде

$$G = \mathbf{p}t - m\mathbf{r}$$

операторын аламыз. Ол уақытқа тәуелді. Ал  $\mathbf{p}^2 / 2m$  гамильтонианы үшін біз

$$i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} + [G, H] = i\hbar \mathbf{p} + \left[ \mathbf{p}t - m\mathbf{r}, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right] = 0$$

теңдеуін тауып, оның (5.4) теңдеуімен үйлесімде болатынын көреміз.

Кері дәлелдеуді жаттығу ретінде оқырманға қалдырайық: егер жүйе Галилей түрлендіруіне инвариантты болса, онда гамильтониандағы массалар орталығына тәуелділігі  $\mathbf{P}^2 / 2M$  болатындығын көрсетіңіздер, мұндағы  $\mathbf{P}$  – толық импульс және  $M$  – толық масса.

### 5.2.5 Вигнер-Эккарт теоремасы

Симметрияны пайдаланудың аргументін дәл көрсететін өте пайдалы теорема. Алдымен толқындық функциясының түрі  $\psi_0(r)$ , яғни тек радиалдық бөлігімен өрнектелетін спинсіз бөлшекті қарастырайық. Ол үшөлшемді бұрылыстарға қатысты инвариантты екені анық және  $\ell=0$  күйіне сәйкес келсін. Енді келесі күйді

$$\psi_i(r) = \text{const} \cdot \mathbf{r}_i \psi_0(r)$$

қарастырайық, ол бірінші функцияға координата операторымен әсер етіп табылған толқындық функция. Бұл  $\ell=1$  күйі, ол  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi), m=1,0,-1$  сфералық функцияларының қандай да комбинациясына пропорционалды. Бұрыштық моментінің ( $\ell=1$ ) мәні  $\mathbf{r}_i$  операторының табиғатына тәуелді емес. Сол сияқты

$$\psi'_i(r) = \text{const} \cdot \mathbf{p}_i \psi_0(r)$$

күйі жөнінде айтуға болады.

Үшөлшемді бұрылыстарда  $O$  генератор операторының

$$O \rightarrow e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} O e^{-i\omega \cdot \mathbf{J}}$$

түрленуін жазайық, ал күйдің түрленуі

$$| \rangle \rightarrow e^{i\omega \cdot \mathbf{J}} | \rangle$$

өзге пішінде жазылады. Біз анықталған күйлердің  $(J, M)$  – яғни бұрыштық моменттері анықталған – қарапайым әрі әмбебап әдіспен түрленетінін көрсеткенбіз ((4.38) теңдеуін қараңыз):

$$|J, M\rangle \rightarrow \sum_{M'} D_{M', M}^J(\omega) |J, M'\rangle.$$

$J$  спині үшін бұрылыс матрицасы мәңгіге анықталған: ол тек қана  $J$ -дің мәніне тәуелді, жүйенің басқа ешқандай да атрибутына тәуелді емес.

Аналогиялық анықталған операторлар осы тәрізді түрленеді. Мұнда  $\mathbf{r}^2, \mathbf{p}^2, U(r)$  операторларының барлығы *скалярлық* шамалар: олар бұрылыстарға қатысты инвариантты, ал  $\mathbf{r}, \mathbf{p}, e^{\mathbf{J}}$  сияқты

операторлары *векторлық* шамалар болатынын еске саламыз. Ал векторлардың көбейтіндісі тәрізді түрленетін шамаларды әдетте *тензорлар* деп атайды.

Бұрылысқа қатысты операторлардың түрлендіру қасиеттерін зерттеу үшін тензордың құраушыларын айырып таныған ыңғайлы. Оларды алдымен кейбір сфералық функциялардың құраушыларына (әдетте *сфералық тензорлар* деп атайды) пропорционал етіп, декарттық құраушыларымен байланысын анықтау керек. Мысалы, 1-рангылы сфералық тензор  $(A_x, A_y, A_z)$  векторына эквивалент. Ал оның құраушылары  $T_{\ell, m}, m=1, 0, -1$  болады, мұндағы

$$T_{1,1} = -\frac{A_x + iA_y}{\sqrt{2}}; \quad T_{1,0} = A_z; \quad T_{1,-1} = -\frac{A_x - iA_y}{\sqrt{2}}. \quad (5.21)$$

Дербес жағдайда  $\mathbf{r}$  радиус-векторы сфералық тензорларының құраушылары:

$$T_{1,1} = -\frac{x + iy}{\sqrt{2}}; \quad T_{1,0} = z; \quad T_{1,-1} = -\frac{x - iy}{\sqrt{2}} \quad (5.22)$$

болып табылады

Олар  $Y_{1,1}, Y_{1,0}, Y_{1,-1}$  сфералық функцияларына пропорционалды<sup>9</sup> ((4.20) теңдеулеріне қараңыз).

(5.22) теңдіктеріне кері түрлендірулерді жазалық:

$$A_x = -\frac{T_{1,1} - T_{1,-1}}{\sqrt{2}}; \quad A_y = -i \frac{T_{1,1} + T_{1,-1}}{\sqrt{2}}; \quad A_z = T_{1,0}.$$

2-рангылы сфералық тензордың («спині 2») құраушыларын декарттық координаталардағы түрлерін жазайық:

$$T_{2,0} = -\sqrt{\frac{1}{6}}(A_{xx} + A_{yy} - 2A_{zz});$$

$$T_{2,\pm 1} = \mp(A_{xz} \pm iA_{yz});$$

$$T_{2,\pm 2} = \frac{1}{2}(A_{xx} - A_{yy} \pm 2iA_{xy}).$$

Конструкциясына сәйкес, компоненттері  $2p+1$  «спині»  $p$  сфералық тензор төмендегідей:

$$T_q^p \Rightarrow e^{i\omega \cdot \mathbf{j}} T_q^p e^{-i\omega \cdot \mathbf{j}} = \sum_{q'} D_{q'q}^p T_{q'}^p$$

<sup>9</sup> Ландау және Лифшиц пайдаланған конвенцияда (5.21) және (5.22) теңдеулері  $i$  көбейткішіне көбейтілген.

түрленеді. Ал ол  $T_q^p$  операторының  $|j, m; n\rangle$  күйіне әсерінен  $T_q^p |j, m; n\rangle$  күйін алатынымызды және оның түрленуі бұрыштық моменттердің екі өзіндік күйлерінің тікелей көбейтіндісі сияқты

$$|p, q\rangle \otimes |j, m\rangle$$

болатынын білдіреді. Яғни:

$$\begin{aligned} T_q^p |j, m; n\rangle &\Rightarrow e^{i\omega \hat{J}} T_q^p |j, m; n\rangle = e^{i\omega \hat{J}} T_q^p e^{-i\omega \hat{J}} e^{i\omega \hat{J}} |j, m; n\rangle = \\ &= \sum_{q', m'} D_{q'q}^p D_{m'm}^j T_{q'}^p |j, m'; n\rangle. \end{aligned}$$

Осының салдары болып келесі теорема табылады:

**5.2-теорема (Вигнер-Эккарт теоремасы). Матрицалық элемент**

$$\langle J, M; n' | T_q^p | j, m; n \rangle$$

*Клебш-Гордан коэффициенттеріне пропорционалды:*

$$\langle J, M; n' | T_q^p | j, m; n \rangle = \langle p, j; J, M | p, q, j, m \rangle \langle J, n' | \mathbf{T}^p | j, n \rangle, \quad (5.23)$$

мұндағы  $n, n'$  - кванттық сандар (радиалдық кванттық сан, бөлшектің түрі және т.с.с.). Ал  $\langle J, n' | \mathbf{T}^p | j, n \rangle$  пропорционалдық тұрақтысы - келтірілген матрицалық элемент деп аталады. Осы элемент бұрыштық моментінің абсолюттік мәніне және басқа да кванттық сандарға тәуелді, бірақ ешқашан да азимуттық кванттық сандарға тәуелді болмайды. Ал соңғы аталғандарға тәуелділік Клебш-Горданның әмбебап коэффициенттеріне «кіріп» кетеді. (5.23) теңдігі айырмашылық тек  $M, q, m$  азимуттық кванттық сандарында ғана болатын матрицалық элементтердің арасындағы көптеген тривиалдық емес қатынастарды береді. Дербес жағдайда, ол таңдау ережелерінің жиынына әкеледі: жалғыз нөлге тең болмайтын матрицалық элементтер – нөлге тең емес Клебш-Гордан коэффициенттері болады. Біз рұқсат етілген өтулер жөнінде айтып отырмыз. Осы термин электромагниттік өтулерді талдауынан алынған (9.5-бөлімін қараңыз).

Оқырманға жаттығу ретінде тексере алатын кейбір мысалдарды көрсетейік:

1. Скаляр,  $p=0$ . Тек  $j=J, m=M$  өтулері рұқсат етіледі.

2. Вектор,  $p=1$ . Рұқсат етілген өтулер:

$$|J-j| = \pm 1, 0 \quad ((J=0)-(j=0) \text{ рұқсат етілмеген}); \quad M = m + q.$$

### 5.3 Тектес бөлшектер: Бозе-Эйнштейн және Ферми-Дирак статистикалары

Тектес бөлшектердің алмасуына қатысты симметрия алдыңғы бөлімде талдаған симметрияның жалпы тұжырымдасымен тығыз байланысқан. Табиғатта бірдей типті бір бөлшектен астам болатын жүйелер молынан кездеседі; атом (электрондардың көптігі), металл (бір типті атомдардың көптігі және одан да көп электрондар) жөнінде, қала берді ғаламның кез келген құрамдас бөлігін еске түсірудің өзі жеткілікті.

Кванттық механикада мұндай жүйелердің толқындық функциялары тектес бөлшектердің алмасуы кезінде қатысты дәл қасиеттеріне бағынатын болып шықты: олар толығымен абсолютті симметриялы (спиндері бүтін болатын бөлшектер үшін оларды *бозондар* деп атайды) немесе толығымен антисимметриялы (спиндері жартылай бүтін бөлшектер үшін оларды *фермиондар* деп атайды) болуы қажет. Яғни толқындық функциялар Бозе-Эйнштейн (БЭ) статистикасына немесе Ферми-Дирак (ФД) статистикасына бағынады. БЭ немесе ФД **статистикалары** кванттық механиканың барлық қосымшаларына: атомдардан бастап макроскопиялық жүйелер үшін қоятын шектеулердің ұзақ та терең салдарларына жеткізеді.

Екі тектес бөлшектердің анықтамасына сәйкес өздеріне тән: массасы, заряды және спині тәрізді қасиеттері бойынша бөліп ала алмайтындығымызға көңіл аударыңыздар. Осы тұрғыдан классикалық және кванттық механикалардың ешқандай айырмашылығы жоқ. Енді бөлшектерді әртүрлі етегін бөлігін қарастырайық. Классикалық физикада әрбір бөлшектің анықталған траекториясы (тарихы) бар. Бұл бөлшектерді таңбалап қойғанмен бірдей, яғни кез келген уақытта бөлшектің кеңістіктегі сол уақыт моментіндегі орнын анықтауға мүмкіндік береді. Сондықтан, қаншалықты күрделі болса дағы, эволюциясының келесі уақытында әрбір бөлшек өзінің индивидуалдылығын сақтайды.

Ал кванттық механикада жағдай мүлдем өзгеше. Анықталмағандық қатынастарының арқасында әрбір бөлшектің траекториясы нақты анықталмайды. Сондықтан, мысалы екі тектес бөлшектен құралған жүйенің, физикалық күйі аргументінің екі жиынынан құралған толқындық функциясымен сипатталады:

$$\psi(\xi_1, \xi_2), \quad \xi \equiv \{\mathbf{r}, \sigma\}, \quad \sigma = s, s-1, \dots, -s,$$

мұндағы  $\sigma$  – спиннің үшінші құрамдас бөлігі. Бөлшектердің орын алмасуы

$$\psi(\xi_2, \xi_1)$$

күйін жаратады, ал ол екі тектес бөлшектің бірдей болуының салдарынан тура сондай  $\psi(q_1, q_2)$  кванттық күйді өрнектеуі қажет. Кванттық механиканың ережелеріне сәйкес күйлердің толқындық функцияларының арасындағы байланыс төмендегідей

$$\psi(\xi_2, \xi_1) = e^{i\alpha} \psi(\xi_1, \xi_2) \quad (5.24)$$

жорамалданады, мұндағы  $\alpha$  – қандай да фаза. Екі тектес бөлшектердің алмасуын қайталайтын болсақ, онда бастапқы толқындық функцияға қайтып ораламыз:

$$e^{2i\alpha} = 1. \quad (5.25)$$

Демек, (5.24) теңдігіндегі фаза келесі

$$e^{i\alpha} = \pm 1 \quad (5.26)$$

мәндерді қабылдайтынын аламыз. Енді осы айтылғанды  $N$  тектес бөлшектерден құралатын жүйе үшін жалпыландыруға болады. Кез келген екі тектес бөлшекті алмастыру кезінде толқындық функция не симметриялы, не антисимметриялы болуы қажет.

Ендеше қандай таңбаны таңдауымыз керек? Жоғарыда біз жорамалдаған болатынбыз: Табиғаттағы спиндері бүтін болатын барлық бөлшектер (бозондар) толығымен симметриялы болатын толқындық функциялармен сипатталады, ал спиндері жартылай бүтін болатын тектес бөлшектердің (фермиондар) толқындық функциялары толығымен антисимметриялы болады, яғни кез келген бөлшектер жұбының орнын алмастыру кезінде таңбасын өзгертеді. Олай болса, бозондар **Бозе-Эйнштейн статистикасына** бағынады, ал фермиондар **Ферми-Дирак статистикасын** қанағаттандырады. Немесе қысқа түрінде сәйкесінше БЭ немесе ФД статистикасы.

Мысалы, спиндері  $1/2$  болатын екі тектес фермиондардың (екі электрон, екі протон және т.б.) толқындық функциясының түрі төмендегідей

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\xi_1, \xi_2) - \psi(\xi_2, \xi_1)) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) - \psi(\mathbf{r}_2, \sigma_2; \mathbf{r}_1, \sigma_1)) \quad (5.27)$$

болады, мұндағы  $\sigma_{1,2} = \uparrow, \downarrow$ .

Жалпы жағдайда, бөлшектердің тектес болуы келесі формалдық бекініммен анықталады: *әрбір*  $A(\xi_1, \dots, \xi_n)$  бақыланатын шама бір бөлшектік айнымалыларының орнын ауыстыруға қатысты *симметриялы* болады. Бұл физикалық бақыланатындардың санына тыйым салатынын ескертеміз. Мысалы, екі бөлшектің  $\mathbf{r}_1$  операторы бақыланбайды, ал  $\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$  операторы бақыланады. 2-тарауда бастаған дискуссиямызды жалғастыратын болсақ, онда осы қарастырған жағдайда әрбір түйіндес операторға бақыланатын сәйкес келмейтінін көреміз.

### Ескертулер

- (I) Релятивистік емес кванттық механикада бөлшектің спині мен статистикасының қатынасы (спин мен статистикалық қатынас деп аталады) эмпирикалық заң болып табылады. Осыған қарамастан, ол релятивистік кванттық механиканың негізгі нәтижелерінің бірі, ал спин мен статистикалық қатынас арнайы салыстырмалық теориясының ережелері мен энергияның оң таңбалы болуынан шығады. *17.2.3-бөлімін қараңыз.*
- (II) Спиндері жартылай бүтін (немесе бүтін) болатын *барлық* бөлшектердің Ферми-Дирак (немесе Бозе-Эйнштейн) статистикасына бағынуы – ішкі қарама-қайшылығы жоқ ереже. Спині  $\frac{1}{2}$ , сонықтан да фермион болатын нуклонды (атом ядросын құрайтын екі құрама бөлшектердің: протон мен нейтронның жалпы атауы) қарастырайық. Енді  $n$  нуклондардан құралған екі ядроның спині не бүтін, не жартылай бүтін болады; ол  $n$ -нің не жұп, не тақ болуына сәйкес келеді. Алайда екі тектес ядролардың орнын алмастыру нуклондардың  $n$  жұбын алмастыруға эквивалент. Демек, бастапқы толқындық функция не симметриялы ( $n$  - жұп), не антисимметриялы ( $n$  - тақ).
- (III) Формалдық тұрғыдан  $N$  тектес бөлшектердің толқындық функциясын  $N$  объектілер группасының орнын алмастыру көрінісі ретінде қарастыруға болады. (Стандарттық) пайымдауға сәйкес нақтылы координаталар және нақтылы спиннің құрамдас бөліктері үшін толқындық функция (қандай да еркін

фазалық дәлдікпен анықталған) комплексті сан болады. Бұл өз кезегінде толқындық функциялардың бірөлшемді алмастыруы группаларының көрінісін құрайтынын гипотезаға сәйкес келеді. Осы шарттан міндетті түрде (5.25) нәтижесін және одан (5.26) теңдігін аламыз.<sup>10</sup>

Жоғарыда қарастырылған мәселелер физикалық әлемнің бір аспектісіне тәуелді: конфигурациялық кеңістіктің топологиялық құрылымына. Расында, екі бөлшектің алмастыруын анығырақ талдау үшін алдымен екі бөлшекті екі түрлі нүктелерге орналастыру қажет. Бөлшектердің біріншісін  $\{0\}$  нүктесінде, ал екіншісін жалпы  $\{x\}$  нүктесінде орналассын деп қабылдайық. Екі бөлшектің қайталанатын алмастырулары  $\{x\}$  нүктесіндегі бөлшектің  $\{0\}$  нүктесін айналып, бастапқы нүктеге қайтып оралуларына эквивалент болатыны анық. Ендеше үшөлшемді кеңістік минус нүкте, яғни  $\mathbf{R}^3 / \{0\}$  қарапайым түрде байланысқан<sup>11</sup>

$$\pi_1(\mathbf{R}^3 / \{0\}) = 1.$$

Сондықтан (5.25) қасиеті теория тізбекті болуы үшін қажет: құрық нөлге ұмтылған кезде, толқындық функция секіріп кете алмайды.

(IV) Алайда, жоғарыдағы келтірілген талқылаудан кейбір екі өлшемді жүйелер үшін ережелерден тыс мүмкіндігінің болатынын көрсетеді. Расында, екі өлшемді минус нүкте топологиялық  $S^1$  шеңберінің эквиваленті, ал оның іргелі группасы  $\mathbb{Z}$  болады. Осы жағдайда жалпырақ статистика болуы да мүмкін. (5.25) және (5.26) теңдеулеріндегі тривиалдық емес болатын жалпырақ статистикаға бағынатын қозулар (оларды *аниондар* дейді) – *бөлшектік статистика*

<sup>10</sup> Осы пайымдауды жалғастырып, логикалық түрде жалпы типті статистикаға (парастатистикаға) бағынатын жаңа кванттық теория құруға болады. Алайда, статистиканың ерекше түрлеріне арқа сүйейтін физикалық бөлшектер мен жүйелер беймәлім.

<sup>11</sup>  $\pi_i(M)$  символы ( $M$  кеңістігінің іргелі группасы)  $S^1$  шеңберінен  $M$  кеңістігіне карталардың эквивалентті кластарының группасын білдіреді. Құрықтың бірқалыпты нүктеге айнала алатын кез келген кеңістіктің  $\pi_i(M) = 1$  тривиалдық іргелі группасымен байланысы болады; шеңберден шеңберге өту картасы оң немесе теріс айналыстарының сандары бойынша жіктелуі мүмкін, сондықтан  $\pi_i(S^1) = \mathbb{Z}$ ; торус үшін  $\pi_i(T^1) = \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ , және т.с.с.

деген атумен кеңінен танымал - Холлдың кванттық эффектісінің физикасында, сол сияқты мүмкін жоғары температуралы асқын өткізгіштікте де маңызды рөл атқарады.

Толқындық функцияны тектес бөлшектердің алмасуына қатысты симметриялау немесе антисимметриялау операциясын келесі жолмен

$$S = \frac{1}{N!} \sum_p p; \quad A = \frac{1}{N!} \sum_p \epsilon_p p \quad (5.28)$$

жүзеге асыруға болады, мұндағы  $P$  (1, 2, ...,  $N$ ) бөлшектерінің барлық мүмкін болатын орын алмастыруларын білдіреді. Ал  $P$ -ның жұп немесе тақ алмасуына байланысты  $\epsilon_p = \pm 1$  болады.<sup>12</sup> Ол проекциялайтын операторы тәрізді әсер етеді

$$S^2 = S; \quad A^2 = A; \quad SA = 0.$$

Сонымен қатар,  $N$  тектес бөлшектердің гамильтонианы осы бөлшектердің операторларының (импульс, координата, спин және т.б.) алмасуына инвариантты. Демек, симметриялау немесе антисимметриялау үдерістері эволюция операторымен

$$e^{-iHt/\hbar}$$

коммутациялайды, яғни жүйенің уақыт бойынша эволюциясында статистика тұрақты және сақталады.

Симметрилық және антисимметрилық күйлер бір-бірімен ортогональді болғандықтан

$$\langle \psi_S | \psi_A \rangle = \langle \psi_S | SA | \psi_A \rangle = 0,$$

$N$  тектес бөлшектерден құралатын (статистикасы анықталған) жүйе ешқашан статистикасы «дұрыс емес» жүйемен араласып немесе қосылып кетпейді. Бұл кванттық механиканың барлық конструкцияларының: толықтылығы, унитарлығы (жалпы ықтималдылығының бірге тең болуы) және т.б., тіпті нақтылы статистикамен шектелген күннің өзінде өзгермейтіндігінің кепілі болады.

<sup>12</sup> Кез келген алмастыруды объектілер жұбының жұп немесе тақ алмастыруларының көбейтіндісі ретінде құрастыруға болады; тіпті егер ауыстыруды осылайша құрастырудың жалғыз ғана әдісі болмаса да, әрбір алмастырудың жұптылығын нақты анықтауға болады.

### 5.3.1 Тектес бозондар

Енді  $N$  тектес бозондардан құралған жүйені қарастырайық. Спіндері нөлге тең және  $V(\mathbf{r})$  потенциалында әсерлесетін (мұндағы  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ) екі бірдей бөлшектердің толқындық функциясының қарапайым түрін

$$\Psi = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}$$

жазуға болады, мұндағы  $\Phi(\mathbf{R})$  – массалар орталығын сипаттайды, ал  $\psi(\mathbf{r})$  – салыстырмалық қозғалыстың функциясы. Екі бөлшектің алмасуы кезінде  $\Psi$  функциясының симметриялы болуының шартын

$$\psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$$

жазайық. Сондықтан  $\ell = 0, 2, \dots$ , яғни бұрыштық моментін тек жұп мәндерінің қозғалысына ғана рұқсат етіледі.

Енді жалпы жағдайды талқылау үшін күйлердің келесі базисін таңдаған ыңғайлы:

$$|p_{i_1}\rangle \otimes |p_{i_2}\rangle \dots |p_{i_N}\rangle \equiv |p_{i_1}, p_{i_2}, \dots, p_{i_N}\rangle, \quad (5.29)$$

жүйенің құрамдастығын ескеу керек

$$\boxed{\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N.} \quad (5.30)$$

Бірбөлшекті күйлердің  $|p_{i_k}\rangle$  ( $k=1, \dots, N$ ) мүшелерін осылайша сипаттау әлсіз әсерлесетін (бірінші жуықтауда әсерлеспейтін деп қарастыруға да болады)  $N$  бөлшектердің жағдайында әсіресе пайдалы болады. Әрине, (5.29) күйлері тіпті әсерлесулер маңызды болған күннің өзінде, құрамдас жүйенің мықты базисін құрайды.

Жалпы  $N$  жағдайы үшін күй векторының түрі

$$|p_{i_1}, \dots, p_{i_N}\rangle_{\mathcal{S}} = \left( \frac{N_1! N_2! \dots N_r!}{N!} \right)^{1/2} \sum_{P'} P' |p_{i_1}, \dots, p_{i_N}\rangle, \quad (5.31)$$

$$N_1 + N_2 + \dots + N_r = N$$

болады, мұндағы  $N_i$  – бірбөлшекті күйлерді «толтыратын» бөлшектердің саны,  $p_i$  – барлық кванттық сандар, олардың қатарында спин де бар.

Координаталық көріністе  $N = 2$  үшін толқындық функцияның мүмкін болатын түрін жазайық:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{p_2}(\mathbf{r}_2) + \psi_{p_2}(\mathbf{r}_1)\psi_{p_1}(\mathbf{r}_2)], & (p_1 \neq p_2), \\ \psi_{p_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{p_1}(\mathbf{r}_2), & (p_1 = p_2). \end{cases}$$

Бөлшектердің бірдей координаталарды  $\mathbf{r}_1 \approx \mathbf{r}_2$  толтыруының ықтималдылығы классикалық механикада *екі есе* артық болатынын атап өтейік. Аналогиялық аргументті импульстік көріністе де жасауға болады.

Мұнда ескеретін жайт бар. (5.31) күйлерінің түрі (5.30) тензорлық кеңістігінде базис құрайды. Жалпы күй осындай векторлардың сызықтық комбинациясымен сипатталады. Бұдан, тіпті, егер кез келген  $N$ -бозондық толқындық функциясының симметрия қасиетін

$$\Phi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \Phi(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, \dots, \xi_{i_N})$$

әрбір  $(1, 2, \dots, N) \rightarrow (i_1, i_2, \dots, i_N)$  алмастыруы үшін қанағаттандыратын болса да, алайда симметриялы бірбөлшекті толқындық функциялар көбейтіндісі симметриялауы ретінде жазуға келмейді.<sup>13</sup>

Осы тектес бозондардың (яғни олар: элементар бөлшектер, атомдар немесе молекулалар) толқындық функциясының қасиеттері нақтылы феномендердің негізінде жатыр. Мысал ретінде Бозе-Эйнштейн конденсатын келтірейік, онда атомдардың макроскопиялық санына қарамастан олардың орналасатын кванттық күйлерін бір толқындық функциясымен сипаттауға болады. Бұл күйлер Табиғатта абсолюттік нөлге жақын өте төмен температураларда жүзеге асырылады. Мысал ретінде ертеректен белгілі сұйық гелийді (*асқын аққыштық*) айтатын болсақ, соңғы кездері БЭ конденсаты газ тәрізді атомдар үшін жүзеге асырылды [Кеттерле (2002)] немесе жақында тіпті әртүрлі молекулалар үшін

<sup>13</sup> Мысалы,  $\psi(x_1, x_2) = e^{-(x_1 + x_2)^2}$  толқындық функциясы симметриялы, бірақ көбейтіндісінің симметриясы емес. Әрине,  $\psi$  функциясын (5.31) түріндегі жазық толқындар  $e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} + e^{ik_2 x_1} e^{ik_1 x_2}$  тобына жіктеуге болады.

де жүргізіле бастады. Асқын өткізгіштік феномені де осымен байланысты.

### 5.3.2 Тектес фермиондар және Паули принципі

Тағы да ең қарапайым мысалдан бастайық: спиндері  $1/2$ -ге тең екі тектес бөлшек (мысалы, екі протон) пішіні (5.27) теңдеуіндегі тәрізді толқындық функцияларымен сипатталсын. Егер екі бөлшек тек салыстырмалы координатаға  $\mathbf{r}$  ғана тәуелді потенциалында әсерлесетін болса, онда толқындық функцияны келесі

$$\Psi = \Phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}$$

түрде жазуға болады, мұндағы  $\Phi(\mathbf{R})$  – массалар орталығының еркін қозғалысын сипаттайды. Ал спиндері  $1/2$  тең екі бөлшектің спиндік күйлерін әрқашан спині 1-ге тең (спиндік триплет)

$$|\uparrow\uparrow\rangle, \quad \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\downarrow\downarrow\rangle$$

және спині 0-ге тең (спиндік синглет)

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

күйлеріне жіктеуге болады. Екі спиннің алмасуы кезінде триплеттік күйлер симметриялы, ал синглеттік күй антисимметриялы. Бұдан, сәйкес келетін орбиталдық толқындық функциялардың жұптылығы қарама-қарсы болуы қажеттігін табамыз

$$\psi_{1m}(-\mathbf{r}) = -\psi_{1m}(\mathbf{r}), \quad (m=1,0,-1), \quad \psi_{00}(-\mathbf{r}) = \psi_{00}(\mathbf{r}).$$

Сондықтан, спиндері  $1/2$  тең екі тектес бөлшектердің салыстырмалы қозғалысының бұрыштық моменті тақ (толық спин 1) және жұп (толық спин 0) мәндері үшін шектеледі.

Егер (5.29) тікелей көбейтінді күйлерінің базисын  $N = 2$  үшін пайдаланатын болсақ, онда толқындық функциясының түрі

$$|p_1, p_2\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_1\rangle|p_2\rangle - |p_2\rangle|p_1\rangle) \quad (5.32)$$

болады. Ал жалпы  $N$  тектес фермиондардан құралатын жүйенің күйін келесі

$$\mathcal{A}|p_1\rangle|p_2\rangle\dots|p_N\rangle = \frac{1}{N!} \sum_P \epsilon_P |p_1\rangle|p_2\rangle\dots|p_N\rangle$$

түрінде жазамыз, координаталық көріністе оның түрі Слэтер детерминантын қабылдайды:

$$\psi_{\{p_i\}}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix}.$$

Мұндағы  $\xi_S$  – орбиталдық және спиндік айнымалыларды білдіреді.

Сондықтан, екі немесе одан артық тектес фермиондар бірдей күйде толтырылған болса, онда бірден артық фермионның толқындық функциясы нольге тең болады:

$$\psi_{\{p_i\}}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = 0, \text{ егер } p_j = p_k, \quad j \neq k.$$

Екі тектес фермионға бірдей кванттық күйде орналасуға болмайтын тыйым салатын ережені **Паулидің тыйым салу принципі** деп атайды. Паулидің тыйым салу принципі тектес бөлшектердің (атом ядролары, атомдар, молекулалар, қатты денелер, газдар және нейтрондық жұлдыздар) кванттық механикалық жүйелерінің барлық қосымшаларында орындалатын абсолюттік іргелі ережесі болып табылады.

Сондықтан Слэтер детерминанты  $N$  фермиондар үшін гильберттік кеңістіктегі *базис* ретінде қабылдауға мүмкіндік бар. Жалпы толқындық функциясын Слэтер детерминанттарының сызықтық комбинациясы ретінде беріледі. Осы конструкциялардың атомдарға қолданылуын *15-тараудан қараңыз*.

Жалпы жағдайда  $N$  тектес фермиондар бар болса

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \epsilon_P \Psi(\xi_{i_1}, \xi_{i_2}, \dots, \xi_{i_N})$$

әрбір  $P$  ауыстыру үшін, яғни  $(1, 2, \dots, N) \rightarrow (i_1, i_2, \dots, i_N)$ . Назар аударыңыздар: жоғарыда көрсетілген Паулидің тыйым салу принципі бірбөлшектік кванттық сандардың жүйені жақсы сипаттай алатын жағдайларына қатысты. Бірақ ол әрқашан орындала бермейді.

Атом қабықшаларындағы электрондық конфигурациялар Паулидің принципімен іс жүзінде шектелгендіктен, бір атомдық орбитада екі электрон (спиндік күйлері тең болатын) орналаса алмайды. Элементтердің периодтылық табиғаты шындығында Паулидің принципі мен атомдық орбиталардың квантталуының салдары болып табылады. *15-тарауды қараңыз.*

### Қосымшаларға нұсқаулық

20.8-қосымшада  $S_N$  ауыстыру группасы мен Юнг схемалары қысқаша баяндалған. 20.9-қосымшада көпбөлшекті күйлердің арасындағы матрицалық элементтерді есептеп табудың үлгісі берілген. Сол формулаларды атомдардың толқындық функциясын құрау кезінде пайдаланылатын боламыз.

20.10- және 20.11-қосымшалары Фок көрінісіне және екінші ретті кванттаудың релятивистік емес жағдайына қысқаша кіріспе болып табылады. Бұл қосымшалар релятивистік емес кванттық механика мен өрістің кванттық теориясының байланысын түсіну үшін көмек ретінде арналған. *Релятивистік* кванттық өріс пен элементар бөлшектердің теориясы жөніндегі толығырақ ақпаратты 17-тараудан табасыз.

### Есептер

- (5.1) Спині  $J = 1$  және жұптылығы белгісіз бөлшек тыныштық күйінен спиндері  $1/2$  болатын екі тектес бөлшекке бөлінеді.
- (а) Соңғы бөлшектердің орбиталдық бұрыштық моментін және толық спинін есептеп табыңыздар.
- (ә) Бөліну кезінде жұптылық сақталады деп пайымдап, бөлшектің жұптылығын анықтаңыздар.
- (б) Енді бастапқы бөлшекті  $|J, J_z\rangle = |1, 0\rangle$  күйінде болды деп пайымдайық. Сфералық функциялар мен спиндік күйлердің айқын түрін пайдаланып, белгісіз радиалдық функцияның көмегімен ақтық күйді жазыңыздар.

Енді соңғы бөлшектер  $(\theta, \varphi)$  және  $(\pi - \theta, \varphi + \pi)$  бағыттарында ұшып шығады, ал спиндерінің құрамдас бөліктерін өлшеу Штерн-Герлах қондырғысымен жүргізіледі деп пайымдайық.

(в)  $(\theta, \varphi)$  бекітілген мәндері үшін соңғы күйдегі нормаланған спиндік толқындық функциясын жазыңыздар.

(г)  $(\theta, \varphi)$  бағытындағы шыққан бөлшек спинінің құраушысы  $s_z = \frac{1}{2}$  болатындығының ықтималдылығын есептеңіздер.

(д) Бір мезгілдегі  $(s_y(1), s_y(2))$  өлшеулерінің  $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

болатындығының ықтималдылығын есептеңіздер.

(5.2) Дейтрон  $d$  дегеніміз заряды  $+1$  болатын, протон (р) мен нейтроннан (n) құралатын ядро. Оның спині  $1$  және жұптылығы  $-$  оң  $(+1)$ . Заряды  $-1$  және спині  $0$  болатын терм пион  $\pi^-$  дейтронмен байланысып, «дейтерий атомын» құруы мүмкін. Осы жүйе Бордың төменгі орбитасында құралады деп пайымдайық.

(а) Осы жүйенің Бор радиусы мен стандарттық Бор радиустарының қатынастарын табыңыздар. Сол сияқты жүйенің байланыс энергиясын есептеңіздер. Кейбір есептеулерге қажетті массалар төменде  $M_e B / c^2$  өлшемінде берілген:

$$M_{\pi^-} = 139.6; \quad M_{e^-} = 0.51;$$

$$M_d = 1875.6; \quad M_p = 938.3.$$

(ә) Жоғарыда сипатталған байланысқан күй  $\pi^- + d \rightarrow n + n$  реакциясында бөлінеді. Бұрыштық момент те, жұптылық та сақталады. Осы берілген шамалардан  $\pi^-$  ішкі жұптылығын анықтауға бола ма?

(б) Бастапқы күйде  $J_z = 0$  болатынын біліп, соңғы күйдегі нейтрондардың бұрыштық таралуын есептеңіздер.

(в) Сутегі атомы осындай бірнеше аналогиялық үрдістерден кейін неліктен  $e^- + p \rightarrow n + \nu$  бөлінбейтінін түсіндіріңіздер. Мұндағы  $\nu$  – (электрондық) нейтрино.

(5.3) Екі еркін тектес бөлшектердің жүйесі үшін толықтық қатынасының айқын түрін жазыңыздар.

(5.4) Екінші ретті кванттау формализмінде  $U(x_1, x_2)$  потенциалындағы әсерлесетін бөлшектердің жүйесі үшін Гамильтон және Гейзенберг теңдеулерін жазыңыздар.

(5.5) Юнг экспериментінің жеңілдетілген түрін қарастырайық. Ол үшін 1-ші және 2-ші тесіктерінен өтетін фотондарды сипаттайтын электромагниттік өрістердің екі қарапайым тербелуші модаларының динамикасын шектейік. Фотон ағынын сипаттау үшін Фок формализмін пайдаланып,  $n$  рет қайталанатын бірфотондық экспериментте 1-ші тесігінен фотонның  $k$  рет өтуінің ықтималдылығын есептеңіздер. Тура осындай нәтиже бір эксперименттегі  $n$  фотондардың ағынын 1 тесігінен  $k$  фотондардың өтуінің ықтималдылығына тең болатынын көрсетіңіздер.

# Үшөлшемді есептер

# 6

## 6.1 Қарапайым үшөлшемді жүйелер

### 6.2 Потенциалдық шұңқырлардағы байланысқан күйлер

### 6.3 Үшөлшемді осциллятор

### 6.4 Сутегі атомы

#### Қосымшаларға нұсқаулықтар

#### Есептер

#### Сандық талдау

Осы тарауда бірнеше қарапайым үшөлшемді жүйелерін: еркін бөлшектер, потенциалдық шұңқыр мен тосқауыл, гармоникалық осциллятор және сутегі атомын зерттейміз.

## 6.1 Қарапайым үшөлшемді жүйелер

### 6.1.1 Келтірілген масса

Массалары  $m_1$  және  $m_2$  болатын екі бөлшек өзара  $V(\mathbf{r})$  потенциалында әсерлеседі, мұндағы

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

салыстырмалы координатасы. Осындай жүйенің гамильтонианы

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2 + V(\mathbf{r})$$

теңдеуімен анықталады. Массалар орталығының координаталарын енгізейік

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}.$$

Енді жаңа координаталардағы толық гамильтонианды қайта жазамыз:

$$H = \frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\mathbf{r}),$$

мұндағы

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

келтірілген масса деп аталады. Айнымалыларды ажырату үшін шешімді

$$\psi = \Phi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$$

түрінде іздейміз. Осылайша салыстырмалы қозғалыстың теңдеуін аламыз:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H^{(can)} \psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\mathbf{r}) \right) \psi.$$

Осы теңдеуінің пішіні  $V(\mathbf{r})$  потенциалында қозғалатын келтірілген массалы бір бөлшек үшін Шредингер теңдеуіне келеді.

### 6.1.2 Сфералық симметриялық потенциалындағы қозғалыс

Егер потенциал радиус-вектордың  $r \equiv |\mathbf{r}|$  абсолюттік шамасына ғана тәуелді болса, онда уақытқа тәуелсіз Шредингер теңдеуін

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (6.1)$$

айнымалыларды ажырату әдісімен

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r) \Phi(\theta, \phi)$$

шешуге болады. Бұрыштық бөлігі сфералық функциялардың (сфералық гармоникалардың)

$$\Phi(\theta, \phi) = Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$$

көмегімен шешіледі. Ал радиалдық бөлігі үшін келесі

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) = 0$$

теңдеуін шешу қажет. Алдымен радиалдық бөлігінің шешімін тауып, оны талдайық. Сонымен шешімін келесі

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

түрде іздейтін болсақ, онда  $\chi$  үшін теңдеуіміз

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \chi = 0$$

болады. Бірақ бұл формальды түрде Шредингер теңдеуі, ал оның эффективті потенциалы:

$$V_{\text{эфф}}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}.$$

Екінші мүшесі ортадан тебу (айналмалы қозғалыс үшін  $F \sim m r \dot{\theta}^2 \sim (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2 / m r^3$  классикалық күші) күшін өрнектейтіні түсінікті.

Нормалау шарты

$$\int_0^{\infty} dr r^2 |R|^2 = \int_0^{\infty} dr |\chi|^2 = 1,$$

ал функцияның координаттар басындағы тұрақтылығын ескеру қажет:

$$\chi(0) = 0.$$

Енді есеп бөлшектің  $V = V_{\text{эфф}}(r)$ ,  $r > 0$ ;  $V(0) = \infty$  потенциалындағы  $0 \leq r < \infty$  жартылай осінің бойымен қозғалысының шешімін табуға эквивалентті.

Бірөлшемді дискреттік деңгейлері үшін (3.2) сетінемегендік туралы теорема осы жағдай үшін де әділетті: радиалдық толқындық функция (әрбір  $\ell$  үшін) бір кванттық сан -  $n$  басты кванттық санымен анықталады. Ол энергияның өзіндік мәндерін анықтайды. Бұдан келесі қорытынды жасауға болады: сфералық симметриялық потенциалында стационарлық күй бақыланатындардың максималдық жиынымен байланысқан үш кванттық ( $n$ ,  $\ell$ ,  $m$ ) сандарымен бірмәнді беріледі. Тарихи қалыптасқан дәстүр бойынша әртүрлі орбиталдық кванттық сандарымен  $\ell = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, \dots$  сипатталатын күйлерге  $S, P, D, F, G, H, I, K, \dots$  толқындары сәйкес келеді.

### 6.1.3 Сфералық толқындар

Алдымен еркін бөлшекті қарастырайық, яғни  $V = 0$ . Осы жағдай үшін импульстің өзіндік күйлерінің (жазық толқындар) көмегімен Шредингер теңдеуі жеңіл шешіледі. Алайда, бұрыштық моменттің

нақтылы мәндеріне сәйкес келетін шешімдер шашырау есептерінде де қажет болады.

Берілген  $\ell$  үшін радиалдық теңдеудің түрін жазайық:

$$\left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{k,\ell}(r) = 0, \quad (6.2)$$

мұндағы  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ . Енді (6.2) теңдеуін қайта жазамыз:

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R = 0. \quad (6.3)$$

Ал  $\ell=0$  үшін (6.2) теңдеуінің түрі біршама жеңілденеді

$$R'' + \frac{2}{r} R' + k^2 R = 0$$

немесе

$$(rR)'' + k^2 (rR) = 0.$$

Координаттар басында  $r = 0$  үздіксіз шешімнің түрі

$$R = A \frac{\sin kr}{r}$$

болады, ал үздікті (сингулярлық) шешімі

$$R = A' \frac{\cos kr}{r}.$$

Нормалаушы тұрақтысы  $A$  мына шарттан

$$\int_0^{\infty} dr r^2 R_{k',\ell} R_{k,\ell} = 2\pi \delta(k' - k)$$

табылады, яғни

$$A^2 \int_0^{\infty} dr \sin kr \sin k'r = -\frac{A^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dr e^{ikr} (e^{ik'r} - e^{-ik'r}) = \frac{\pi A^2}{2} \delta(k - k').$$

Осылайша,  $A = 2$ .

Ал  $\ell \neq 0$  үшін шешімін келесі жолмен табамыз. Егер біз  $R_\ell = r^\ell \eta_\ell$  деп қабылдасақ, онда  $\eta_\ell$  үшін теңдеудің түрі төмендегідей болады:

$$\eta_\ell'' + \frac{2(\ell+1)}{r} \eta_\ell' + k^2 \eta_\ell = 0.$$

Оны  $r$  бойынша дифференциалдайтын болсақ, онда жаңа теңдеу

аламыз:

$$\eta_\ell''' + \frac{2(\ell+1)}{r}\eta_\ell'' + \left(k^2 - \frac{2(\ell+1)}{r^2}\right)\eta_\ell' = 0.$$

Алайда,  $\eta_\ell' = r_\ell \zeta_\ell$  алмастыруынан соң, оның түрі төмендегідей өзгереді

$$\zeta_\ell'' + \frac{2(\ell+2)}{r}\zeta_\ell' + k^2\zeta_\ell = 0,$$

яғни -дің теңдеуі болып қалады. Бұл  $\zeta_\ell = \eta_{\ell+1}$  екендігін білдіреді. Сонымен,

$$\eta_\ell' = r\eta_{\ell+1}$$

біз рекуренттік қатынасын таптық. Енді  $\chi_0 = R_0$  бастап, басқа барлық радиалдық толқындық функцияларын таба аламыз. Үздіксіз шешімдері

$$R_\ell = N_\ell r^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin kr}{r}$$

болады, ал координаттар басындағы ерекше (сингулярлық) шешімдері

$$Q_\ell = N_\ell r^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\cos kr}{r}.$$

Нормалаушы тұрақтылар тиісті түрде анықталады, мысалы,  $N_\ell = (-1)^\ell 2 / k^\ell$  ([Landau and Lifshitz (1976 c)] қараңыз).

Ал  $R_\ell$  функциясының координаттар басындағы, яғни  $r = 0$  төңірегіндегі тәртібі  $\xi \equiv r^2$  айнымалысын енгізудің нәтижесінде жеңіл анықталады

$$\left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin kr}{r} = \left(2 \frac{d}{d\xi}\right)^\ell \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} k^{2n+1} \xi^n = \frac{k^{2\ell+1} (-1)^\ell}{(2\ell+1)!!} + O(r^2),$$

мұндағы  $(2\ell+1)!! \equiv (2\ell+1)(2\ell-1)(2\ell-3)\dots 5 \times 3 \times 1$ . Осылайша,

$$R_\ell \approx \frac{2k^{\ell+1} r^\ell}{(2\ell+1)!!} \{1 + O(r^2)\}.$$

Еркін сфералық толқындары – Бессельдің сфералық функциялары арқылы өрнектеледі, ал соңғылары реті жартылай бүтін болатын Бессель функциялары болып табылады:

$$R_{k,\ell}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) = 2kj_{\ell}(kr),$$

$$Q_{k,\ell}(r) = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}} N_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) = 2kn_{\ell}(kr).$$

Мұндағы  $J_{\nu}(z), N_{\nu}(z)$  – Бессель теңдеулерінің екі тәуелсіз шешімдері

$$\frac{d^2}{dz^2} Z_{\nu} + \frac{1}{z} \frac{d}{dz} Z_{\nu} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) Z_{\nu} = 0.$$

Мұндағы  $J_{\nu}(z)$  функциясы  $z = 0$  нүктесіндегі үздіксіз шешімі (мысалы, қараңыз [Gradshteyn and Ryzhik (1965)]).

Бессельдің сфералық функциялары қарапайым функциялар болып табылады:

$$j_{\ell}(x) = (-1)^{\ell} x^{\ell} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^{\ell} \frac{\sin x}{x}; \quad n_{\ell}(x) = (-1)^{\ell} x^{\ell} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^{\ell} \frac{\cos x}{x}.$$

Бірнеше мысалдар келтірейік:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x},$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x},$$

$$j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2}, \quad n_2(x) = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3 \sin x}{x^2};$$

және т.б. Олардың  $x=0$  нүктесінің төңірегіндегі тәртібі де белгілі:

$$j_{\ell}(x) \sim \frac{x^{\ell}}{(2\ell+1)!!}, \quad n_{\ell}(x) \sim \frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}. \tag{6.4}$$

Ал олардың асимптотикадағы  $x \rightarrow \infty$  тәртібі

$$j_{\ell}(x) \sim \frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right), \quad n_{\ell}(x) \sim \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right) \tag{6.5}$$

болады. Кейде олардың өзге комбинацияларын енгізген де пайдалы, оларды Ханкельдің сфералық функциялары (бірінші және екінші текті) деп атайды

$$h_{\ell}^{(1)}(x) \equiv j_{\ell}(x) + in_{\ell}(x), \quad h_{\ell}^{(2)}(x) \equiv j_{\ell}(x) - in_{\ell}(x).$$

Олардың асимптотикадағы тәртібін де жазайық

$$h_{\ell}^{(1)}(x) \sim \frac{1}{x} e^{i\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}, \quad h_{\ell}^{(2)}(x) \sim \frac{1}{x} e^{-i\left(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}. \quad (6.6)$$

(Көңіл аударыңыздар: Ханкель функциялары  $1/x$  көбейткішінің дәлдігімен  $\sin x$ ,  $\cos x$  нақты функцияларына қатысты  $\exp \pm ix$  экспоненциалдық функцияларының аналогиясы болып келеді.) Ал сәйкес келетін радиалдық функцияларының түрі төмендегідей:

$$R_{k,\ell}^{(1)} = 2k h_{\ell}^{(1)}(kr), \quad R_{k,\ell}^{(2)} = 2k h_{\ell}^{(2)}(kr).$$

Қай шешімін пайдалану, ол қарастырып отырған физикалық есепке байланысты (шекаралық шарттар, координаталар басындағы үздіксіздікке және т.б.). Төрт шешімнің асимптотикалық тәртібі:

$$R_{k,\ell}(r) \sim \frac{2}{r} \cos\left(kr - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right), \quad Q_{k,\ell}(r) \sim \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right),$$

$$R_{k,\ell}^{(1)} \sim \frac{2}{r} e^{i\left(kr - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}, \quad R_{k,\ell}^{(2)} \sim \frac{2}{r} e^{-i\left(kr - \frac{(\ell+1)\pi}{2}\right)}.$$

Соңғы екі функция шашыраңқы ( $R^{(1)}$ ) және жинаңқы ( $R^{(2)}$ ) сфералық функциялары.

Жазық және сфералық толқындар еркін Шредингер теңдеуі шешімдерінің толық жиынын береді: екеуін бірінің бірі бойынша жіктеуге болады. Мысалы, еркін жазық толқынды сфералық толқындар бойынша жіктейік:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta). \quad (6.7)$$

Осы формуланы теңдіктің екі жағындағы  $(r \cos \theta)^n$  көбейткішінің алдындағы коэффициенттерін салыстыру арқылы тексеруге болады. Оған қоса, координаталық тәуелсіз пішінде қайта жазу мүмкіндігі де бар:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} j_{\ell}(kr) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\Omega_1) Y_{\ell m}^*(\Omega_2), \quad (6.8)$$

мұндағы  $\Omega_1$  мен  $\Omega_2$  –  $\mathbf{k}$  және  $\mathbf{r}$  векторларының бұрыштық айнымалылары.

## 6.2 Потенциалдық шұңқырлардағы байланысқан күйлер

Төмендегі потенциал

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -V_0, & \text{егер } r < a, \\ 0 & \text{егер } r > a \end{cases} \quad (6.9)$$

атом ядросының рудиментарлық (элементар) модельдерін сипаттайды: ядролық күш шектеулі және нақты анықталған әсерлесу радиусы бар. Осы әсерлесудің радиусы шексіз болатын Кулон күшінен принципіалдық айырмашылығы.

Потенциалдық шұңқырдан тыс Шредингердің радиалдық теңдеуі еркін болады:

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R = 0, \quad r > a,$$

мұндағы  $k^2 = 2mE / \hbar^2 < 0$  ( $k$ —таза жорамал сан), ал шұңқырдың ішінде

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(k'^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R = 0, \quad r < a,$$

мұндағы  $k'^2 = 2m(E + V_0) / \hbar^2 > 0$  ( $k$  — нақты) энергияның диапазонында жатады. Мұнан екі облыста да радиалдық теңдеудің түрі Шредингердің еркін теңдеуімен бірдей болатынын көреміз. Сондықтан шешімі Бессельдің сфералық функцияларының немесе оларға эквивалентті Ханкельдің сфералық функцияларының комбинациялары болады.

Ішкі облыс ( $r < a$ ) үшін координаталар басындағы үздіксіздік шартынан бірімәнді болып, келесі шешім таңдалады:

$$R_\ell^{(iukr)} = A j_\ell(k'r), \quad (6.10)$$

мұндағы  $A$  — тұрақты коэффициент. Екінші жағынан, ішкі шешімді толқындық функцияның нормаланатындай етіп таңдау қажет. Ал (6.5) және (6.6) асимптотикалық тәртібінен

$$k = i\sqrt{-2mE} / \hbar \equiv i\kappa, \quad \kappa = \sqrt{-2mE} / \hbar$$

( $\kappa > 0$ ) болатынын көреміз және  $r \rightarrow \infty$  үшін

$$j_{\ell, n_\ell}, h_\ell^{(2)} \sim \frac{1}{r} e^{+\kappa r}; \quad h_\ell^{(1)} \sim \frac{1}{r} e^{-\kappa r}.$$

Сондықтан, тек  $h_\ell^{(1)}(i\kappa r)$  функциясы ғана нормаланумен үйлесімді. Яғни,

$$R_{\ell}^{(сырт)} = B h_{\ell}^{(1)}(ikr). \quad (6.11)$$

Ішкі (6.10) шешім мен сыртқы (6.11) шешім  $r = a$  нүктесінде тең болулары қажет. Бұдан келесі шартты

$$\frac{ik h_{\ell}^{(1)'}(ika)}{h_{\ell}^{(1)}(ika)} = \frac{k j'_{\ell}(k'a)}{j_{\ell}(k'a)}$$

аламыз, ал осы шарт энергияның өзіндік мәндерін анықтайды.

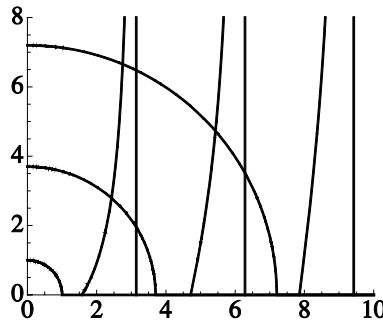
Мысалы,  $\ell = 0$  үшін  $j_0(k'r) = \frac{\sin k'r}{k'r}$ ,  $h_{\ell}^{(1)}(ikr) = -\frac{e^{-kr}}{kr}$  болатынын табамыз және жоғарыдағы шарттың нәтижесіндегі айнымалыларды алмастыратын  $\xi \equiv k'a$ ;  $\eta \equiv ka$  болсақ, онда

$$\xi \operatorname{ctg} \xi = -\eta \quad (6.12)$$

теңдігін аламыз. Ал  $\xi$  және  $\eta$  айнымалылары келесі қатынаспен шектелген

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}. \quad (6.13)$$

Мұндағы теңдеулер жүйесі бірөлшемді симметриялы потенциалдық шұңқыр есебімен бірдей ((3.23) теңдеуін қараңыз). Дәлірек айтқанда, қазір шешімнің тек бір түрін ғана, яғни тақ шешімдерін қарастырамыз. Бұл координаттар басындағы  $\chi(0) = 0$  үздіксіздік шартының салдары. Бірінші квадранттағы, яғни  $\xi > 0$ ,  $\eta > 0$  (6.12) және (6.13) теңдеулерінің қисықтарынан (6.1-сурет) байқайтынымыз:



6.1-сурет. Үшөлшемді потенциал үшін графикалық шешім

1.  $\sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} \leq \pi / 2$  үшін шешімі болмайды: байланысқан күйлер жоқ.
2.  $\pi / 2 < \sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} \leq 3\pi / 2$  үшін тек жалғыз шешімі бар: байланысқан бір күй бар.

3. Параметрлердің  $3\pi/2 < \sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} \leq 5\pi/2$  диапазонында байланысқан екі күй бар.

Одан әрі солай жалғаса береді.

Бірөлшемді айырмашылығы: ені/тереңдігінен болмайды.<sup>1</sup> потенциалдық шұңқыр шұңқырдың төмен жағдайынан минималдық байланысқан күй

$$\left( \sqrt{2mV_0 a^2 / \hbar^2} = \pi / 2 \right)$$

### 6.3 Үшөлшемді осциллятор

Келесі қарапайым мысал ретінде үшөлшемді осцилляторды қарастырамыз

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}^2. \tag{6.14}$$

Осы есепті декарттық координаталарында айнымалыларды ажырату әдісімен жеңіл шешуге болады

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi(x) \phi(y) \chi(z).$$

Онда алдында талқылаған бірөлшемді осциллятор есебіне келеді. Энергияның деңгейлері сетінейді

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \omega \hbar \left( n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right), \tag{6.15}$$

мұндағы  $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots$ . Сәйкес келетін өзіндік функцияларды жазайық:

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

мұндағы  $\psi_n(x)$  - бірөлшемді осциллятордың (3.33)  $n$ -ші нормаланған өзіндік функциясы:

$$\psi_n(x) = C_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} = C_n H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

ал нормалаушы тұрақты мен  $\alpha$ - параметрі:

$$C_n = \left( \frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right)^{1/2}, \quad \alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

<sup>1</sup> Ықтималды түсіндірмесі: импульстің минималдық флуктуациясы анықталмағандық қатынасының салдары, ал жоғары өлшемді жүйелер үшін эффект одан сайын артады.

Анизотроптық осциллятор үшін есеп кішігірім түзетулермен шешіледі.

Одан да зейінімізді изотроптық осцилляторға (6.14) бөлейік. (6.15) теңдеуінен спектрлерінен қозған күйлердің өздеріне тән сетінеуін көреміз:  $d(1) = 3$ ,  $d(2) = 6$ ,  $d(3) = 10$  және т.с.с., ал  $n$ -ші деңгей үшін

$$d(n) = \frac{(n+2)(n+1)}{2}. \quad (6.16)$$

Осы сетінеу бізге келесі фактыны түсінуге көмектеседі: энергияның  $n$ -ші өзіндік мәндеріне импульстің  $\ell = n$  өзіндік күйлері кіреді және одан басқа сол деңгей анықталған жұптылыққа ие ( $n$ -нің жұп немесе тақ болуына сәйкес не жұп, не тақ) болады. Енді  $\ell = 0, 2, \dots, n$  ( $n$ -жұп) немесе  $\ell = 1, 3, \dots, n$  ( $n$ -тақ) болғанына байланысты  $(2\ell+1)$ -дің еселігін қосынды-лап, сетінеуін (6.16) есептейік.

Келесі сұраққа жауап берейік: (6.16) теңдеуінің физикалық мағынасы неде? Кез келген симметрия осындай сетінеуге ие бола ма? Ол үшін, яғни талқылап отырған ішінара сетінеуді түсіндіру үшін жарату және жою операторларының формализмін пайдаланайық.<sup>2</sup> Мұны 3.4.2-бөлімінде талқылағандықтан және әр осциллятор үшін жарату және жою операторларын енгізгендіктен, гамильтонианды бірден жазайық:

$$H = \frac{\omega\hbar}{2} \sum_{i=1}^3 (a_i a_i^\dagger + a_i^\dagger a_i) = \omega\hbar \sum_{i=1}^3 \left( a_i^\dagger a_i + \frac{3}{2} \right). \quad (6.17)$$

Әлбетте, осы гамильтонианның үшөлшемді бұрылыстарына қатысты инвариантты, мұнда  $(a_1, a_2, a_3)$  вектор тәрізді түрленеді, ал қарапайым бұрылыс матрицалары нақты болады. Бізге анықталған  $\ell$  күйі үшін  $(2\ell+1)$ -еселі сетінеуді түсіндіретіні мәлім. Соған қарамастан, (6.17) теңдеуіндегі группасындағы инварианттылығы  $SO(3)$  қарағанда *артығырақ*. Расында,  $a_i$  үш операторларының арасында  $SU(3)$  арнайы унитарлық группасының түрлендірулеріне қатысты инвариантты. Ортогоналдық группа деп кез келген  $\mathbf{a}$  векторы үшін  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}$  скалярлық көбейтіндісі инвариантты болатын группаны атайды, ал  $SU(3)$  группасы деп

<sup>2</sup> Иргелі әсерлесулер және элементарлық бөлшектер теориясында әртүрлі  $SU(n)$  группалары пайда болады. Мысалы, күшті әсерлесулердің  $SU(3)$  өлшемдік группасында және Вайнберг-Саламның электрәлсіз әсерлесуіндегі  $SU(2) \times U(1)$  группасында «түс» группасы. Арнайы унитарлық группаның пайда болуының себебі әрқашан бірдей: кванттық механикалық жүйенің үшөлшемді гармоникалық осцилляторы үшін сияқты,  $n$  осцилляторларының гамильтонианы немесе лагранжианы  $SU(n)$  группасына қатысты автоматты түрде инвариантты болуына өкеледі.

$$\sum_{i=1}^3 z_i^* z_i$$

көбейтіндісі инвариантты болатын группаны айтады. Мұндағы  $(z_1, z_2, z_3)$  – кез келген комплексті үшөлшемді вектор. Бұдан әрі унитарлық группалардың жалпы қасиеттерінің егжей-тегжейіне тоқталмаймыз. Ал  $SU(n)$  арнайы унитарлық группасы жөнінде қысқаша талқылау көрсетілген *20.6-қосымшасында*. Осы мақсатта  $SU(3)$  группасының *толық симметриялы* келтірілмейтін көріністері (мультиплеттері) Юнгтың көлденең схемаларымен сипатталатынын атап өту жеткілікті (*20.8-қосымшасын қараңыз*)

$$(\cdot), \square, \square\square, \square\square\square, \square\square\square\square, \square\square\square\square\square, \text{ және т.с.с.}$$

Мұндағы біріншісі синглеттік (тривиалдық) көріністі білдіреді. Осы симметриялық көріністердің *өлшемі* төмендегідей

$$\frac{(n+2)(n+1)}{2}, \quad n=0, 1, 2, 3, \dots$$

анықталатыны белгілі.

## 6.4 Сутегі атомы

Сутегі атомы - статикалық кулондық потенциалының

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \tag{6.18}$$

салдарынан протон мен электронның байланысқан күйі. Бұл барлық мүмкін атомдарының ішіндегі ең қарапайымы және дәл шешілетіні. Келтірілген массасы  $m = m_e m_p / (m_e + m_p) \approx 0,995 m_e$  тең болғандықтан, бірінші жуықтауда оны электрон массасымен теңестіріп қарастыруға да болады. Радиалдық теңдеуінің түрі төмендегідей:

$$\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) R = 0. \tag{6.19}$$

Эффективтік потенциал

$$V_{эфф}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}$$

$r \rightarrow \infty$  болған жағдайда, нольге ұмтылады. Байланысқан күйлер тек энергияның теріс мәндерінде ғана мүмкін. Енді жаңа

$$\tilde{E} \equiv \frac{mE}{\hbar^2} = [cM^{-2}] \quad (6.20)$$

түрін қабылдап және ұзындық бірлігін келесідей таңдап алайық:

$$\frac{\hbar^2}{me^2} \equiv r_B = 1,$$

мұндағы  $r_B \approx 0,5 \times 10^{-8}$  см – Бор радиусы. Бұл есептің масштабын орнатады: сутегі атомының толқындық функциясы осы ұзындықтың ретімен анықталады, ал энергияның деңгейлері осы қашықтықтардағы кулондық энергияларымен сипатталатын болады. Қарапайым есептеулерден өлшемдерді оны еш қиындықсыз қалпына келтіріледі. Ал

$$\frac{d^2}{dr^2} R + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} R - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} R + 2 \left( \tilde{E} + \frac{1}{r} \right) R = 0 \quad (6.21)$$

теңдеуі өлшемсіз  $\rho$  айнымалысын

$$\rho \equiv \frac{2r}{\lambda}, \quad \lambda \equiv \frac{1}{\sqrt{-2\tilde{E}}} \quad (6.22)$$

енгізген соң, қайта жеңілдетіледі. Енді (6.21) теңдеуінің түрі

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R = 0$$

болады, мұндағы  $R' \equiv (d/d\rho)R$ .

$\rho$ -ның кіші мәндерінде квадраттық жақшаның ішінде ортадан тебу күші басым болғандықтан, оның тәртібі келесі түрде жазылады:

$$R_\ell \sim \rho^\ell,$$

ал жалпы теңдеудің өзі шамамен  $R'' - (1/4)R \approx 0$  пішінін қабылдайды. Ал оның асимптотикадағы тәртібін төмендегідей етіп тұспалдайық:

$$R_\ell \sim e^{\pm \rho/2}. \quad (6.23)$$

Әлбетте, функцияның нормалануын қамтамасыз ету үшін біз  $e^{-\rho/2}$  экспонентаның теріс көрсеткішін таңдауымыз керек. Сондықтан, шешімін енді

$$R_\ell \equiv \rho^\ell e^{-\rho/2} \omega_\ell$$

түрінде іздейміз. Ал  $\omega_\ell$  үшін теңдеуі

$$\rho \omega'' + (2l + 2 - \rho) \omega' + (\lambda - l - 1) \omega = 0. \quad (6.24)$$

Бізге  $\rho \rightarrow \infty$  болғанда  $\omega(0) = \text{const} (\neq 0)$ ,  $\omega(\rho) < \rho^A$  шешімі қажет. Бұл мәселені дәрежелі қатарға жіктеп шешуге болады. Сондықтан, (6.24) теңдеуінде

$$\omega(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k, \quad a_0 \neq 0 \quad (6.25)$$

апарып қойып, одан келесі өрнектерді аламыз

$$\begin{aligned} (2\ell + 2)a_1 + (\lambda - \ell - 1)a_0 &= 0, \\ 2a_2 - a_1 + 2(2\ell + 2)a_2 + (\lambda - \ell - 1)a_1 &= 0, \\ \dots \\ (k + 1)k a_{k+1} - k a_k + (k + 1)(2\ell + 2)a_{k+1} + (\lambda - \ell - 1)a_k &= 0 \end{aligned}$$

және т.с.с. Бұдан қарапайым рекурренттік қатынасты табамыз

$$(k + 1)(2\ell + 2 + k)a_{k+1} + (\lambda - \ell - k - 1)a_k = 0, \quad k \geq 1. \quad (6.26)$$

Ал (6.25) шексіз қатар болуы мүмкін, сондықтан оны үзу керек, сонда  $\omega$  полином болып қалады. Соңғы жағдайда  $\omega(\rho)$  асимптотикалық тәртібін қатардың көп ретті мүшелерінен табу жеңіл болады, ал олар жуықталған келесі шартты қанағаттандырады

$$a_{k+1} = \frac{a_k}{k} = \frac{a_{k-1}}{k(k-1)} = \dots = \text{const} \cdot \frac{1}{k!},$$

сондықтан

$$\omega(\rho) \sim e^\rho, \quad \rho \rightarrow \infty \text{ үшін.}$$

Ал (6.23) теңдеуінің «бұрыс» шешімінің тәртібі нормалану шартымен үйлеспейтіні айқын. Сондықтан серияның үзілуін талап етуіміз қажет.

(6.26) рекурренттік қатысынан серияның үзілу шартын табамыз: егер  $\lambda$  тұрақтысы

$$\lambda - \ell - k - 1 = 0 \quad (6.27)$$

кез келген  $k$  теріс емес бүтін сан үшін орындалуы керек. Ал  $\ell$  бүтін сан болғандықтан, онда  $\lambda$  да оң бүтін сан болады

(6.22) және (6.20) теңдіктерінен олар сутегі атомының квантталған энергиясын анықтайтынын көреміз

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2mn^2}.$$

Энергияның дұрыс өлшемдерін алу үшін оның  $r_B^{-2}$  көбейткішін

қалпына келтіруіміз қажет. Осыдан біз атақты Бордың деңгейлерін аламыз:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{e^4}{2n^2 r_B}, \quad r_B = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad (n=1,2,3,\dots) \quad (6.28)$$

Әрбір  $n$ -нің мәнінде  $\ell$  бұрыштық момент келесі мәндерді қабылдайды

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

((6.27) теңдеуін қараңыз). Ал энергия  $\ell$  бұрыштық моментінен тәуелсіз болғандықтан және әрбір  $\ell$ -дің мәніне  $2\ell+1$  күйлері сәйкес келетіндіктен, онда энергияның әрбір  $n$ -ші деңгейі

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2 \quad (6.29)$$

рет сәтіндейді. Мұндай сәтінәу кулондық байланысқан күйлерінің өзіндік ерекшеліктері болып табылады.<sup>3</sup>

Жоғарыда келтірілген рекурренттік формулаларды байланысқан толқындық функцияларды құрастыруға пайдалануға болады. Соған қарамастан, функцияны генерациялау әдісінің аналогиясы бірөлшемді гармоникалық осцилляторда қолданылғанмен, ол күшті әрі сутегі атомының жалпы өзіндік функцияларын зерттеу үшін дұрысырақ келетіні сөзсіз. Ал  $\lambda = n$  (оң бүтін сан) үшін  $\omega(\rho)$  қанағаттандыратын теңдеудің

$$\rho\omega'' + (2\ell+2-\rho)\omega' + (n-\ell-1)\omega = 0 \quad (6.30)$$

үздіксіз шешімі бар. Оны Лагерраның ассоциацияланған полиномдары деп атайды:

$$\omega_{n,\ell} = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho). \quad (6.31)$$

Лагерра полиномдары генерациялайтын функцияларынан бастау алады:

$$U(\rho, s) = \frac{e^{-\rho s/(1-s)}}{1-s} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L_k(\rho)}{k!} s^k, \quad (6.32)$$

мұндағы  $s < 1$ . Лежандр немесе Эрмит полиномдары жағдайындағы тәрізді алдымен (6.32) теңдеуінің екі жағынан да  $\rho$  бойынша туынды алайық. Нәтижесінде

<sup>3</sup> Изотроптық үшөлшемді осциллятор жағдайындай осы сипаттама сәтінәуінің пайда болуы  $SO(4)$  группасының симметриясынан болып табылады: кулондық байланысқан күй гамильтонианының көрінісі. 6.3-есепті қараңыз.

$$L'_k - kL'_{k-1} = -k L_{k-1}$$

аламыз, екінші жағынан  $d/ds$  бойынша туынды

$$L_{k+1} = (2k + 1 - \rho)L_k - k^2 L_{k-1}$$

теңдеуін береді. Екі қатынастардың үйлесуінен келесі дифференциалдық теңдеуді табамыз

$$\rho L''_k + (1 - \rho)L'_k + k L_k = 0.$$

Бұл (6.30) теңдеуін еске салғанымен, бірақ онымен бірдей емес. Алайда, егер Лагерраның ассоциацияланған полиномдарын келесі түрде

$$L^p_k(\rho) \equiv \frac{d^p}{d\rho^p} L_k(\rho),$$

жазатын болсақ, онда ол

$$\rho L^{p''}_k + (p + 1 - \rho)L^{p'}_k + (k - p)L^p_k = 0$$

теңдеуін қанағаттандырады да, расында параметрлері қажетті түрде анықталған (6.30) формуласына тең болады. Лагерраның ассоциацияланған полиномдары

$$U_p(\rho, s) = \frac{(-1)^p e^{-\rho s/(1-s)}}{(1-s)^{p+1}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L^p_k(\rho)}{k!} s^k \quad (6.33)$$

түрінде генерацияланады. Қорытындылай келе  $n$ -ші Бор деңгейінің радиалдық толқындық функциясын жазайық:

$$R_{n,\ell} = \rho^\ell e^{-\rho/2} \omega(\rho) = C_{n,\ell} \rho^\ell e^{-\rho/2} L^{2\ell+1}_{n+\ell}(\rho), \quad (6.34)$$

$$\rho \equiv \frac{2r}{n} = \frac{me^2}{\hbar^2} \frac{2r}{n} = \frac{2r}{nr_B}; \quad r_B \equiv \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Мұнда  $r_B \approx 5,291 \times 10^{-9}$  см Бор радиусы, ол негізгі күйдің толқындық функциясының кеңістік кеңеюін анықтайды. Нормалаушы тұрақты тең болады:

$$C_{n,\ell} = -\frac{2}{n^2} r_B^{-3/2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}}.$$

Алғашқы бірнеше радиалдық өзіндік функцияларын (6.33) өрнегінің көмегімен жеңіл табуға болады. Негізгі күй мен бірінші қозған

күйдің  $(n=2, \ell=0,1)$  радиалдық толқындық функцияларын келтірейік:

$$\begin{aligned} R_{1,0}(r) &= 2 r_B^{-3/2} e^{-r/r_B}, \\ R_{2,0}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{2}} r_B^{-3/2} \left( 2 - \frac{r}{r_B} \right) e^{-r/2r_B}, \\ R_{2,1}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}} r_B^{-3/2} \frac{r}{r_B} e^{-r/2r_B}. \end{aligned}$$

Енді жалпы күйдің  $(n, m)$  толқындық функциясының түрін жазайық:

$$\psi_{(n,\ell,m)} = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi).$$

Оқырманға ыңғайлы болу үшін төменгі бірнеше деңгейлерге сәйкес келетін сфералық функцияларды (4.20) оның есіне сала кетейік:

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (\cos^2 \theta - 1), \\ Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, & Y_{2,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{1,\pm 1} &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, & Y_{2,\pm 2} &= \mp \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned}$$

Mathematica бағдарламасында (6.34) радиалдық функцияны алу үшін келесі түрде жазу жеткілікті

$$R[r_-, n_-, L_-] := \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-L-1)!}{(n+L)^2}} \left( \frac{2r}{n} \right)^L e^{-\frac{r}{n}} \text{LaguerreL} \left[ n-L-1, 2L+1, \frac{2r}{n} \right].$$

Көңіл аударыңыздар: Mathematica бағдарламасында Лагерра полиномдары индекстерінің жазылу әдісі Кванттық механика оқулықтарындағы әдеттегі жазылуынан өзгеше келеді ((6.34) теңдеуін қараңыз).

## Бақылаулар

- (1) Осылайша кванттық механика Бордың тапқан энергиялық деңгейлерін дәлме-дәл қайта жаңғыртады және олар сызықтық спектрлердің эксперименталдық мәндерімен жақсы үйлесімде табылады. Сонымен қатар, жоғарыда көрсетілгендей, сетінеу есептің кванттық механикалық тұрғыда қарастыруының

салдары болады.

- (2) Негізгі күйдің толқындық функциясының кеңістік «ұзындығын»  $r = r_B = 5,291 \times 10^{-9} \text{ cm}$  береді және ол сутегі атомының «мөлшері» ретінде қарастырылады.
- (3) Энергия мен толқындық функциялар үшін жоғарыда келтірілген формулалар кез келген сутегітекес атомдар үшін орынды, яғни электрон мен заряды  $Z|e|$  болатын ядродан құралған атом үшін қарапайым  $e^2 \rightarrow Ze^2$  алмастыруын жасау қажет
- (4) Импульстің  $\sqrt{\langle p^2 \rangle}$  орташа мәнінің реті  $me^2 / \hbar$ . Мұны электрондардың  $r_B$  бойынша таралуы мен Гейзенбергтің анықталмағандық қатынастарынан табуға болады. Электронның орташа «жылдамдығының» реті

$$v \sim p / m = e^2 / \hbar = \alpha c = c / 137 \ll c,$$

мұндағы  $\alpha \equiv e^2 / \hbar c = 1/137$  - *нәзік құрылым тұрақтысы*. Осылайша электронның қозғалысы релятивистік емес болатынын көреміз, демек, (6.18) жуықталған гамильтонианның қолданылуын *апостериорлық* түрде ақтайды. Сонымен қатар,  $10^{-2}$  реттік түзетулерді ескеруге болады.

- (5) Байланысқан электронды босату үшін қажетті энергияны иондалу энергиясы деп атайды және оның шамасы:

$$e^2 / 2r_B \sim 14 \text{ эВ},$$

ол *Ридберг энергиясы* атауымен танымал.

- (6) Сутегі спектінің басты сериялары 6.1-кестесінде келтірілген. Әрбір серия оны ашқан ғалымның есімімен аталған.

Лайман сериялары	$n_1 = 1$	$\nu = (E_n - E_1) / h$	$n = 2, 3, \dots$	Ультракүлгін
Бальмер сериялары	$n_2 = 2$	$\nu = (E_n - E_2) / h$	$n = 3, 4, \dots$	Көрінетін
Пашен сериялары	$n_3 = 3$	$\nu = (E_n - E_3) / h$	$n = 4, 5, \dots$	Инфрақызыл
Брәкет сериялары	$n_4 = 4$	$\nu = (E_n - E_4) / h$	$n = 5, 6, \dots$	Инфрақызыл
Пфунд сериялары		$\nu = (E_n - E_5) / h$	$n = 6, 7, \dots$	Инфрақызыл

6.1-кестесі. Сутегі атомының спектрлік сериялары

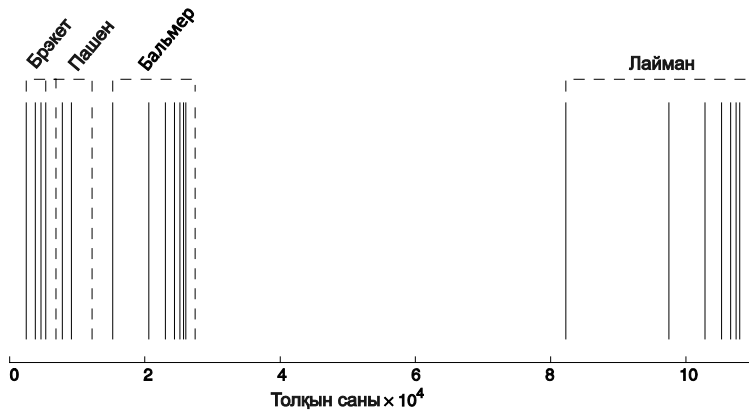
### Қосымшаларға нұсқаулық

Үш- немесе екіөлшемді (дельта-функция) потенциалында қозғалатын бөлшектің байланысқан күйдегі энергияларының деңгейлерін талдаңыздар:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - g\delta^D(\mathbf{r}), \quad D=2,3.$$

Бұл стандартты кванттық механикалық әдістің жауабын дұрыс болмайтын есептің мысалы. Физикалық мағыналы жүйені алу үшін  $g$  әсерлесу тұрақтысын *қайта нормалау* қажет. Бұл төртөлшемді өрістің релятивистік кванттық теориясындағы кеңінен белгілі рәсім немесе оның өзге математикалық жолы бар:  $\mathbf{R}^D/\{0\}$  кеңістігіндегі еркін гамильтонианды өзіне түйінdestік түрде кеңейту қажет. Барлық жағдайларда энергиясын есептеп табылмайтын (эксперименттік кіріс), байланысқан бір күйі бар қарапайым жүйені табуға болады, бірақ толқындық функциясы мен шашырау амплитудасы сол арқылы бізмәнді анықталады. Осындай жүйе 20.13-қосымшада қарастырылған. Дәл осы потенциал, алайда біршама басқа тұрғыдан 6.5-есебінде берілген. Ал 6.3-есебінде сутегі атомындағы Бор деңгейлерінің  $n^2$  сетінеуінің пайда болуы талқыланады.

Өзге 20.12-қосымшасында кванттық механикалық суперсимметриялы жүйелер талқыланған.



**6.2-сурет.** Сутегі атомының кейбір спектрлік сызықтарының схемасы. Абсцисса бойымен толқын сандары ( $1/\lambda$ ) орналасқан. Тік пунктирлі сызықтар әртүрлі сериялардың соңын білдіреді. Төрт серия көрсетілген. Кейбір сериялар, мысалы, Брәкет және Риц-Пашен серияларының арасындағы бірен-саран қиылысуына көңіл аударыңыздар.

### Есептер

(6.1) Массасы  $m$  бөлшек радиалдық потенциалында қозғалсын:

$$V(\mathbf{r}) = V(r) = \begin{cases} \infty, & r < R \\ 0, & R \leq r \leq R + a. \\ \infty, & r > R + a \end{cases}$$

Жүйенің спектрін зерттейік.

(а) Толқындық функцияның радиалдық бөлігі үшін дұрыс орнатылған шекаралық шарттар жағдайында сфералық координаталарында стационарлық шешімдердің бөлінетінін көрсетіңіздер.

(ә) Бекітілген  $L$  (бұрыштық момент) жағдай үшін энергия деңгейлерін анықтайтын шартты табыңыздар.

(б)  $L = 0$  үшін (ә) есебін шешіңіздер.

(в)  $a \ll R$  үшін бірінші қозған күйі  $\Delta E = \hbar^2 / mR^2$  негізгі күйден жоғары жататынын көрсетіңіздер. Осы нәтижені физика тұрғысынан түсіндіріңіздер.

(6.2) Сутегі радиалдық толқындық функциясының  $n \rightarrow \infty$  шегін есептеп табыңыздар.

(6.3) Ленц  $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} - \frac{1}{2Z}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p})$  векторының  $H$  гамильтонианмен коммутацияланатынын пайдаланып, сутегі энергияларының  $n^2$  сәтінәуін түсіндіріңіздер.

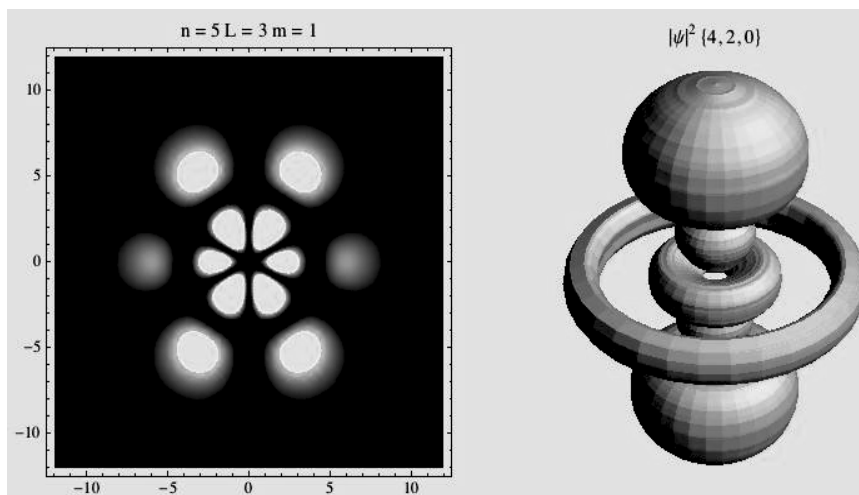
(6.4) Кулон есебін параболалық координаталарында

$$x = \sqrt{\xi, \eta} \cos \varphi; \quad y = \sqrt{\xi, \eta} \sin \varphi; \quad z = \frac{1}{2}(\xi - \eta)$$

шешіңіздер.

(6.5) Массасы  $m$  бөлшек радиалдық потенциалда  $v\delta(r - R) / 4\pi R^2$  қозғалады. Кіші  $R$  үшін үздіксіз өзіндік күйлерді және мүмкін болатын байланысқан күйлерді есептеп табыңыздар.

$$n = 5 \quad L = 3 \quad m = 1 \quad |\psi|^2 \{4, 2, 0\}$$



6.3-сурет. Екі және үш өлшемдегі  $(n, \ell, m) = (5, 3, 1)$  және  $(4, 2, 0)$  күйлері үшін электронның табылуы ықтималдылығының тығыздығы

### Сандық талдау

(6.1) Сутегі атомы үшін радиалдық толқындық функцияларын құрыңыздар. Электрондардың тығыздығы үшін екі- және үшөлшемді графиктерін салыңыздар (6.3-суретін қараңыз).

(6.2) Алғашқы бірнеше еркін сфералық толқындардың  $j_{\ell, n_{\ell}}$  графигін салыңыздар. Жіктеудің

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta)$$

$(\ell)$  термдер санына тәуелділігін тексеріңіздер.

(6.3) Келесі потенциалдық шұңқырдағы

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{r}) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

барлық байланысқан күйлерінің энергия деңгейлері мен бұрыштық моментінің кванттық сандарын сандық түрінде есептеп табыңыздар. Параметрлер ретінде келесі мағлұматтарды пайдаланыңыздар:

$$V_0 = 300 \text{ МэВ}; a = 3 \text{ фм}; p = 940 \text{ МэВ} / c^2.$$

Оған қоса,  $1 \text{ фм} = 10^{-13} \text{ см}$ ,  $\hbar c \approx 200 \text{ МэВ} \cdot \text{фм}$  болатынын ескеріңіздер.

(6.4) Mathematica бағдарламасын пайдаланып, сутегі атомы үшін параболалық координаталарындағы 6.4-есебінің шешімін тексеріңіздер.

# Кванттық механиканың кейбір ерекшеліктері

## 7

- 7.1 Көріністер
  - 7.2 Күйлер мен операторлар
  - 7.3 Шектелмеген операторлар
  - 7.4 Унитарлық түрлендірулер
  - 7.5 Гейзенберг көрінісі
  - 7.6 Анықталмағандық принципі
  - 7.7 Аралас күйлер мен тығыздық матрицасы
  - 7.8 Жалпыланған координаталардағы кванттау
- Тереңдетіп оқу үшін  
Қосымшаларға нұсқаулықтар  
Есептер

Осы тарауда кванттық механиканың басты тұжырымдамалары қайта қаралған және ұқыптырақ анықталған. Бұл өзара унитарлық түрлендірумен байланысқан күйлер мен операторлардың көріністері таңдауының әлдеқандай еркіндігін ашық білдіреді. Тіпті жүйенің уақыт бойынша эволюциясының өрнегі өзгеруі мүмкін, мысалы, уақытқа тәуелді күйлердің векторларымен (Шредингер көрінісі) уақытқа тәуелді емес, уақытқа тәуелді операторлармен (Гейзенберг көрінісі) жүргізіледі. Сол сияқты, толық кванттық механикалық сипаттау мүмкін емес болатын жалпыланған физикалық жағдайларды сипаттауға мүмкіндік беретін кванттық күйлер түсінігінің әлдеқайда жалпы түрлері ұсынылған. Осы жағдайдағы «күй» түсінігін *аралас күй* деп атайды және ол *тығыздық матрицасымен* сипатталады; ал толқындық функциясымен *таза күйлер* анықталады.

## 7.1 Көріністер

Кванттық механикада күйлер мен динамикалық айнымалыларды сипаттауда кең еркіндік берілген; физикалық нәтижелер пайдаланылатын тілге, яғни *көрініске* тәуелді болмауы керек. Мұндай тілді таңдау еркіндігі классикалық механикада да кездеседі, яғни өзара канондық түрлендірулермен байланысқан канондық айнымалылардың мүмкін болатын кең кластары бар. Сонымен қатар, қарастырылып отырған есепке сәйкес әртүрлі

көріністерді пайдалану мүмкіндігінің кванттық механикада әлдеқайда терең салдарлары мен мағыналары бар.

Тілдің мұндай таңдау еркіндігі күйлер мен операторлар, жүйенің уақыт бойынша эволюциясы және т.с.с. орталық түсініктердің осыған дейін оқулығымызда берілген анықтамасы (Шредингер көрінісі), енді әлденеше жалпы және абстрактілі болуын қажет етеді. Әдетте, әртүрлі сипаттамалар *унитарлық түрлендірулермен* байланысқан болады. Унитарлық түрлендірулер теориясы кванттық механиканың барлық құрылымының концептуалдық ұсынымдарымен қоса, шешімдердың мықты әдісін ұсынды.

Осыған дейін ұсынған кванттық механиканың принциптерін келесідей жолдармен жалпылауға болады:

P1 Сеперабельдік гильберттік кеңістігі  $\mathcal{H}$  әрбір кванттық механикалық жүйемен байланысқан. Кванттық күй осы кеңістікте сәулеленумен, яғни фазаға дейінгі дәлдікпен бірлік нормаланған вектормен (толқындық функциямен) сипатталады.

P2 Эрмиттік (өзіне түйіндес)  $A$  операторы  $\mathcal{H}$  кеңістігінде әрбір  $A$  бақыланатын шамамен байланысты.

P3  $A$  бақыланатынның  $|\psi\rangle$  күйіндегі орташа мәні  $\langle\psi|A|\psi\rangle$  түрінде беріледі. Егер  $A$  операторының өзіндік мәні  $a_k$  және сәйкес келетін өзіндік векторы  $|k,\alpha\rangle$  болса ( $\alpha$  индексі мүмкін болатын сәтінуді көрсетеді), онда  $|\psi\rangle$  күйіндегі  $A$  өлшенетін  $a_k$  шамасының табылу ықтималдылығы  $\sum_{\alpha} |\langle k,\alpha|\psi\rangle|^2$  түрінде беріледі.

P4 Эрмиттік (өзіне түйіндес)  $H$  операторы табылады, осы оператор (гамильтониан деп аталады) Шредингер теңдеуіне сәйкес

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi\rangle$$

уақыт бойынша эволюциясын анықтайды.

P5 Кванттық  $Q$  және  $P$  операторлары кез келген декарттық координаталар жүйесінде классикалық канондық  $q$  мен  $p$  айнымалыларымен байланысқан. Олар Гейзенбергтің коммутациялық қатынасына бағынады:

$$[Q, P] = i\hbar.$$

Осы тараудың мақсаты аталған ережелерді кішкене мұқияттырақ жіктей келе, нақтырақ етіп анықтау. Осы тараудың басқа да маңызды сұрағы: жоғарыда келтірілген [P1] принципіне сәйкес, аралас күйлердің жағдайын енгізу үшін кванттық күй түсінігін *жалпыландыру* болып табылады.

### 7.1.1 Координаттық және импульстік көріністер

Осы тараудың кіріспесінде келтірілген принциптердегі көріністердің алмасуы мысалынан бастайық.

Шредингер жуықтауында  $\psi(x, t)$  толқындық функциясы кванттық күйдің көрінісі болып табылады. Мұнда  $x$  айнымалысы *параметрдің* рөлін келесі мағынада атқарады: кеңістіктің кез келген нүктесінде табылуының ықтималдылығын анықтауға көмектеседі, алайда бөлшектің *күйі* расында  $\psi$  толық функциясымен көрсетіледі. Сонымен қатар  $x$  басқа да рөл ойнайды: ол  $q$  координата операторының өзіндік мәні болады және ол төмендегідей анықталады:

$$\hat{q}\psi(q) = q\psi(q).$$

Осы оператордың өзіндік функциялары болып  $f_q(x) = \delta(q - x)$  табылады, ал жоғарыда айтып өткеніміздей:

$$f_q(x) = \delta(q - x), \quad \hat{q}\delta(q - x) = x\delta(q - x) = q\delta(q - x).$$

Бұл бізге шекті өлшемді кеңістіктегі векторлармен аналогия жүргізуге көмектесуі мүмкін:  $v_i$  векторының құраушылары  $e_i$  ортонормалаған бірлік векторларының базисінде әртүрлі  $v_i = (e_i, v)$  құрамдас бөлігі ретінде анықталады. (мұндағы  $(*, *)$  екі вектордың скалярлық көбейтіндісін білдіреді). Әрине,  $v$  векторының белгілі базиске қатысты құрамдас бөліктерін пайдалануы арқылы, олардың қалай өрнектелгеніне тәуелсіз қатаң анықтамасы бар.

Мұнда ұқсас идеяны пайдаланбақпыз: анықталған базиске тәуелсіз  $\psi$  «күй векторын» немесе екі күй векторларының скалярлық көбейтіндісін қабылдауымыз керек. Базиске тәуелсіз екі шекті өлшемді векторларының арасындағы скалярлық көбейтіндінің мәні сияқты

$$(a, b) = a_i b_i,$$

тура солай

$$(a, b) = a_i b_i$$

кванттық механикалық күйлердің векторлары мен олардың эрмиттік скалярлық көбейтіндісін анықтаймыз және ол таңдалған базиске тәуелсіз.

Сондықтан біз төмендегідей жаза аламыз:

$$\psi(x) = \int dx' \delta(x' - x) \psi(x') = \int dx' f_x^*(x') \psi(x') \quad (7.1)$$

және (7.1) теңдеуін скалярлық көбейтінді ретінде түсіндіреміз

$$\langle x | \psi \rangle.$$

Енді Дирактың енгізген скалярлық көбейтіндінің анықтамасын қайта жазайық:

$$\int dx' \phi^*(x') \chi(x') = \langle \phi | \chi \rangle. \quad (7.2)$$

Күй векторы  $|q\rangle$  – координатаның өзіндік функциясы, ол құраушылары  $\langle x | q \rangle = f_q(x) = \delta(x - q)$  болатын абстракттылық векторлар базисінің рөлін атқарады. Шекті өлшемді векторлармен толықтай аналогия болу үшін енді базистік векторлар ортонормаланған және толық жиын (яғни, кез келген күйді олардың сызықтық комбинациясы ретінде өрнектеуге болады) құрауы қажет. Соңғы талабымыз – ол (7.1) өрнегі, ал біріншісі:

$$\langle q | q' \rangle = \int dx f_q^*(x) f_{q'}(x) = \int dx \delta(q' - x) = \delta(q - q'),$$

бұл  $(e_i, e_j) = \delta_{ij}$  талабына ұқсас.

Басты идеямыз – құрылымды  $q$  (осы айнымалы Шредингер көрінісі немесе *координаталар көрінісі* үшін маңызды) басқа айнымалыны пайдаланып жасау қажет. Ал *импульстік көріністе* алдымен  $\hat{p}$  өзіндік векторларының  $x$ -көрінісіндегі түрін қарастырамыз

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad (7.3)$$

және олар ортонормаланғандық шартын қанағаттандырады

$$\langle p | p' \rangle = \delta(p - p'). \quad (7.4)$$

Ендеше импульстік көріністе күйдің абстрактылық векторы (немесе «кет» векторы)  $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$  түрінде анықталады, ал осы күйдің  $x$ -көрінісіндегі түрі (7.3) теңдеуімен беріледі.

Сонымен, импульстік көріністе  $|\psi\rangle$  жалпы күйдің түрін жазайық

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle = \int dx f_p(x)^* \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x).$$

$p$ -көрінісіндегі «толқындық функция» – ол кәдуілгі қарапайым толқындық функцияның Фурье-құраушысы. Осылайша,  $x$ -көріністен  $p$ -көрінісіне ауысуы Фурье-түрлендіруіне әкеледі. Дербес жағдайда, координатаның  $x'$  өзіндік мәніне сәйкес келетін өзіндік күйі  $p$ -көрінісіндегі түрі келесідей болады

$$\langle p|x\rangle = \int dx' f_p^*(x') \delta(x-x') = f_p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \quad (7.5)$$

және эрмиттік скалярлық көбейтінді қасиетінің арқасында  $\langle p|x\rangle = \langle x|p\rangle^*$  болатынын көреміз. Енді басқа мысал қарастырайық. Гармоникалық осциллятор энергиясының  $n$ -ші өзіндік күйін екі көріністе қарастырайық. Осының алдында  $x$ -көрінісі үшін жазған болатынбыз (3-тарауды қараңыз):

$$\langle x|n\rangle = \psi_n(x) = C_n H_n(\alpha x) e^{-p/2 \alpha^2 \hbar^2}. \quad (7.6)$$

Тура осы күй  $p$ -көрінісінде келесі толқындық функциямен сипатталады:

$$\psi(p) = \langle p|n\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|n\rangle = \frac{C_n}{\alpha \hbar^{1/2}} (-i)^n H_n\left(\frac{p}{\alpha \hbar}\right) e^{-p/2 \alpha^2 \hbar^2}, \quad (7.7)$$

яғни (7.6) теңдеуінің Фурье-түрлендіруі болып табылады.

Базисті өзгертудің әффектісін операторлардың өзінен де байқауға болады. Импульстік көріністе импульс  $\hat{p} = p$  мультипликативті операторымен беріледі, ал координата операторы дифференциалдық операторы болып өзгереді:

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

Мұның  $x$ -көрінісіндегі «ескіден» таныс  $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  өрнегінен (түбегейлі) айырмашылығы оның таңбасында екенін атап кетелік.

Бұл әрі іргелі коммутациялық қатынастың

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

барлық көріністерде орындалуы үшін де қажет.

Біз  $p$ -көрінісіндегі гармоникалық осциллятордың гамильтонианы келесі пішінді қабылдайтынын көреміз

$$H = -\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} + \frac{p^2}{2m},$$

яғни  $x$ -көрінісіндегі стандарттық пішініндегі

$$m \rightarrow M = \frac{1}{m\omega^2}, \quad \omega \rightarrow \omega$$

алмастыруларын жүргізсек болғаны. Бұл (7.7) нәтижесінің қарапайым түрін түсіндіреді: ешқандай Фурье-түрлендіруін жүргізбей-ақ, (7.6) теңдеуінде алмастыруды жасау арқылы қол жеткізуге болады!

## 7.2 Күйлер мен операторлар

### 7.2.1 Бра және кет; абстрактылық гильберттік кеңістік

Алдындағы талқылау концептуалдық маңызды фактіні анық бөліп көрсетті: кванттық күй абстрактылық векторымен (сәулеленумен) сипатталады, оны *кет*- векторы деп атайды:

$$|\psi\rangle.$$

Мұның тағы ыңғайлылығы түйіндесін –  $\langle\psi|$  бра-векторын енгізу жеңіл болады. Бұл терминдерді алғаш рет Дирак енгізген, негізін ағылшын сөзі «bracket» - «жақша» құрайды. « $\psi$ » комплексті функциясын (мысалы,  $x$ -тан) арқылы белгілі көріністе сипаттау мүмкін. Енді операторлар, қозғалыс теңдеулері және т.б. осындай абстрактылық векторлар кеңістігіндегі түрлерін анықтау қажет. Біз алдымен осы кеңістіктің қасиеттерін зерттеп алайық, одан соң әртүрлі көріністердің (унитарлық түрлендірулер) өзара қатынастарын қарастырамыз.

Жүйенің кванттық күйлерін сипаттайтын  $\mathcal{H}$  векторлары кеңістігінің қажетті қасиеттерін жазамыз:

[1]  $\mathcal{H}$  – векторлық кеңістік.

[2]  $\mathcal{H}$  кеңістігіндегі әрбір векторлар жұбының  $\langle \chi | \psi \rangle$  скалярлық көбейтіндісіне комплекстік сан сәйкес келеді.

[3]  $\mathcal{H}$  – толық.

[4]  $\mathcal{H}$  – сеперабельді.

Осындай қасиеттерге ие болатын кеңістікті (сеперабельдік) *гильберттік кеңістік* деп атайды.<sup>1</sup>

[1]  $\mathcal{H}$  – векторлық кеңістік

Осы қасиеті  $\mathcal{H}$  кеңістігіндегі екі  $|\psi\rangle, |\phi\rangle$  векторлары беретін кез келген комбинациясы да

$$c\psi + d\phi \in \mathcal{H}, \quad c, d \in \mathbb{C} \quad (7.8)$$

$\mathcal{H}$ -та жататынын білдіреді. Басқаша айтатын болсақ, векторлардың қосындысы және олардың комплекссті сандармен көбейтіндісі стандартты ережелермен анықталады:

$$\psi + \phi = \phi + \psi; \quad (\psi + \phi) + \chi = \psi + (\phi + \chi);$$

$$c(\psi + \phi) = c\psi + c\phi; \quad (cd)\psi = c(d\psi);$$

$$0 \cdot \psi = \mathbf{0}; \quad 1 \cdot \psi = \psi.$$

Дербес жағдайда,  $\psi - \psi = \mathbf{0}$  нөлдік вектор  $\mathcal{H}$ -те табылады. Егер  $c_1 = c_2 = \dots = c_k = 0$  және

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_k\psi_k = \mathbf{0} \quad (7.9)$$

болса, онда  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$  векторлары *сызықтық тәуелсіз* деп аталады.  $\mathcal{H}$  өлшемділігі сызықты тәуелсіз векторлардың санына тең.

[2]  $\mathcal{H}$  кеңістігіндегі әрбір векторлар жұбының  $\langle \chi | \psi \rangle$  скалярлық көбейтіндісіне комплекстік сан сәйкес келеді.

---

<sup>1</sup> Шектіөлшемді евклидттік кеңістіктің (элементтері  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  болатын)  $n \rightarrow \infty$  жағдайында жалпыландыру нәтижесінде осы гильберттік кеңістіктің анықтамасын алғаш рет Д.Гильберт (~1910 жылдары) енгізген болатын. Гильберттік кеңістік өзінің негізін қалаушысының көптеген қасиеттерін сақтап қалды.

Векторлардың әрбір  $\psi$  және  $\phi$  жұбына  $\mathcal{H}$ -та олардың скалярлық көбейтіндісі  $\langle \chi | \psi \rangle \in \mathbb{C}$  (комплекссті саны) төмендегідей анықталады:

$$\begin{aligned}\langle \phi | c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \rangle &= c_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + c_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle; \\ \langle \phi | \psi \rangle^* &= \langle \psi | \phi \rangle;\end{aligned}$$

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0, \quad (=0, \text{ егер және тек қана егер } |\psi\rangle = 0). \quad (7.10)$$

Алғашқы екі қатынастан<sup>2</sup> табамыз:

$$\langle c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 | \phi \rangle = c_1^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + c_2^* \langle \psi_2 | \phi \rangle.$$

Егер еркіндік дәрежесі  $n$  болса, онда координаттық кеңістікте скалярлық көбейтіндіні келесі айқын түрде жазуға болады:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int dq \phi^*(q) \psi(q),$$

мұндағы  $dq \equiv d^n x$ . Мысалы, үшөлшемді кеңістіктегі екі бөлшекті жүйе үшін  $n = 6$ .

Скалярлық көбейтіндінің (7.10) оң болуы күй векторының нормасын енгізуге рұқсат береді

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}.$$

Норманы енгізу – әрбір вектор ұзындығы –  $\mathcal{H}$ -тағы кез келген күй жұптарының өзара «арақашықтығын» келесідей анықтауға мүмкіндік береді

$$\|\psi - \phi\| = \sqrt{\langle \psi - \phi | \psi - \phi \rangle}. \quad (7.11)$$

Сондықтан  $\mathcal{H}$  метрикалық кеңістік болады. Осы кеңістікте Коши критеріі бойынша тізбектің  $\{\psi_n\} = \psi_1, \psi_2, \dots$  шегін енгізуімізге мүмкіндік бар

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_n = \psi \text{ табылады, егер } \forall \epsilon > 0, \exists N > 0: \forall n > N, \|\psi_n - \psi\| < \epsilon$$

Егер кез келген үш нүкте (мұнда  $\mathbf{0}$ ,  $\psi$  және  $\phi$  қарастырылып отыр) үшін келесі қатынас орындалатын болса

$$\|\psi - \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\|, \quad (7.12)$$

<sup>2</sup> Кейде әдебиеттерде өзге де анықтамалар, мысалы,  $\langle \phi | \psi \rangle$  орнына  $(\phi, \psi)$  немесе  $(\psi, \phi)$  пайдаланылады.

онда арақашықтық анықтамасын қабылдауға болады (үшбұрыш теңсіздігі). Енді  $\phi$ -ді  $-\phi$ -ге алмастыратын болсақ, онда (7.12) теңдеуін қайта жазуға тура келеді

$$\|\psi + \phi\| \leq \|\psi\| + \|\phi\|. \quad (7.13)$$

Ал (7.13) теңдеуінің (7.11) анықтамасын қанағаттандыратынын дәлелдеу қиын емес. Алдымен

$$\langle \psi + \phi | \psi + \phi \rangle = \|\psi\|^2 + \|\phi\|^2 + 2\operatorname{Re}\langle \phi | \psi \rangle$$

болатынын көрсетейік. Алайда, кез келген комплексті сан үшін

$$\operatorname{Re}\langle \phi | \psi \rangle \leq |\langle \phi | \psi \rangle|$$

қатынасы орындалады, сондықтан бізге тек

$$|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \|\phi\| \|\psi\| \quad (7.14)$$

(Шварц теңсіздігі) орынды екенін көрсету ғана жеткілікті.

Ал (7.14) теңсіздігінің дұрыстығына көз жеткізу үшін келесі векторды қарастырған жеткілікті

$$\tilde{\phi} \equiv \phi - \psi \cdot \sqrt{\langle \psi | \phi \rangle} \|\psi\|^{-1}.$$

(7.14) теңдеуі  $\tilde{\phi}$ -дің жартылай оң анықталғандығының салдары болып табылады. Сонымен қатар, теңдік белгісі орындалуы үшін  $c_1\psi = c_2\phi$ ,  $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$  болуы қажет екендігін ескертеміз.

### [3] $\mathcal{H}$ – толық

Коши тізбегі дегеніміз:

$$\forall \epsilon > 0, \exists N: \forall n, m > N, \|\psi_n - \psi_m\| < \epsilon,$$

$\mathcal{H}$  кеңістігі толық, егер Кошидің әрбір тізбегі  $\mathcal{H}$  кеңістігінде жинақты болса.

Толықтық шартын қанағаттандырмайтын кеңістіктің мысалы ретінде нақты сандардың  $\mathbb{R}$  субкеңістігі болып табылатын рационалдық сандар  $\mathbb{Q}$  жиынын айтуымызға болады.

Толық кеңістіктің ыңғайлы қасиеті: әрбір жабық субкеңістікті толық деп есептеуге болады. Жабық субкеңістігі барлық шектік нүктелерді қамтитынын еске түсірейік. Сондықтан, жабық

векторлық кеңістік  $\mathcal{H}$  толық және гильберттік кеңістік болып табылады.

#### [4] $\mathcal{H}$ – сеперабельді

Яғни  $\mathcal{H}$  кеңістігінің барлығында тығыз болатын әрі  $S \subset \mathcal{H}$  саналатын базасы  $\mathcal{H}$ -та табылады. Басқа сөзбен айтқанда, әрбір  $\psi \in \mathcal{H}$  векторы  $S$ -тағы тізбектердің  $\{\psi_n\}$  шегі болады. (Рационалдық сандардың жиыны есептелетін базаны құрайды және нақты сандар кеңістігінің барлығында тығыз болады, сондықтан  $\mathbb{R}$  – сеперабельді).

[1] - [4] қасиеттерінің ең маңызды салдары:  $\mathcal{H}$  кеңістігіндегі толық және ортонормаланған  $\{\psi_n\}$  векторлар жүйесінің бар болуы.  $\mathcal{H}$ -тағы кез келген векторды келесі түрде жазуға болады:

$$\psi \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N c_n \psi_n \equiv \sum c_n \psi_n, \text{ мұндағы } \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (7.15)$$

Жіктеу коэффициенттері  $c_n$  төмендегідей беріледі

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle.$$

Демек, әрбір вектор үшін мына қатынас орындалады

$$|\psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi \rangle.$$

Оны символдық түрде

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | = 1$$

жазуға болады, ал бұл 2.6-бөлімінде көрген толықтық қатынасы.

Қайта ескертейік: барлық сызықтық комбинациялар (7.15)  $\mathcal{H}$ -тағы векторды сипаттай бермейді. Ақтық норманың талабына сай ортогоналдылықтың арқасында төмендегі шарт орындалуы керек:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_i |c_i|^2 < \infty.$$

Гильберттік шекті өлшемді кеңістігінде [3] және [4] қасиеттері автоматты түрде қанағаттандырады. Және керісінше, шексізөлшемді гильберттік кеңістіктер үшін осы талаптар іргелі мағынағы ие болады.

### 7.3 Шектелмеген операторлар

Бақыланатындар абстрактылық гильберттік кеңістігінде әсер ететін операторлармен сипатталады

$$A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}. \quad (7.16)$$

Біз оператордың әсерінен соң оның сызықтық құрылымы сызықтығын сақтағанын қалаймыз, сондықтан оның сызықты болғаны қажет

$$A(\alpha_1|\varphi_1\rangle + \alpha_2|\varphi_2\rangle) = \alpha_1 A|\varphi_1\rangle + \alpha_2 A|\varphi_2\rangle.$$

Егер  $C$  нақты оң саны табылатын болса және ол үшін мына теңсіздік

$$\|A\psi\| < C\|\psi\|, \quad \forall \psi \in \mathcal{H} \quad (7.17)$$

орынды болса, онда операторды *шектелген* деп атайды; кері жағдайда ол шектелмеген.  $A$  операторының *нормасы* (белгіленуі  $\|A\|$ )  $C$  тұрақтысының төменгі шегі ретінде анықталады және ол (7.17) теңдігін қанағаттандырады, яғни

$$\|A\| = \sup_{\psi \neq 0} \|A\psi\|/\|\psi\| \quad \text{немесе} \quad \|A\| = \sup_{\|\psi\|=1} \|A\psi\|. \quad (7.18)$$

Басқаша айтсақ, егер  $\|A\| < \infty$  болса, оператор шектелген. Егер  $A$  операторы шектелген болса, онда оның үздіксіз екендігіне көз жеткізу жеңіл. Шекті өлшемді гильберттік кеңістікте барлық операторлар шектелген, ал шексіз өлшемді кеңістікте олай емес.

Сызықтық операторлар үшін үздіксіздік түсінігі глобальді: егер оператор нүктеде үздіксіз болса, онда ол барлық гильберттік кеңістігінде сондай. Және керісінше, егер оператор шектелмеген болса, онда ол барлық жерде үздікті. Айтылғанды кішкене жеңілдетіп түсінуге болады, ол үшін үздіксіздік шартын  $\psi$  жазайық:

$$\forall \epsilon > 0, \forall \delta > 0: \quad \forall \varphi: \|\varphi - \psi\| < \delta \Rightarrow \|A\varphi - A\psi\| < \epsilon.$$

Мұны  $0$  нүктесінің маңайы жөніндегі бекінімге аударуға болады, онда  $f = \varphi - \psi$  және  $A(\psi) - A(\varphi) = A(\psi - \varphi) = A(f)$  түрінде жазамыз.

Іргелі коммутациялық қатынас

$$[Q, P] = i\hbar \quad (7.19)$$

неліктен кванттық механикада шектелмеген операторларының

қолданылатынын түсіндіреді. Шындығында ол (7.19) теңдеуінен шығады:

$$PQ^n - Q^n P = i\hbar n Q^{n-1}, \quad (7.20)$$

демек

$$n\hbar \|Q^{n-1}\| \leq 2\|PQ^n\| \leq 2\|P\|\|Q\|\|Q^{n-1}\|,$$

мұнда біз кез келген операторлардың жұбы үшін орынды келесі теңсіздіктерді пайдаландық

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|, \quad \|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|,$$

сондықтан

$$2\|P\|\|Q\| \geq n\hbar.$$

Теңсіздік кез келген  $n$  үшін орынды болғандықтан,  $P$  және  $Q$  операторларының кем дегенде біреуі шектелмеген.

Шектелмеген операторлардың өзге де мысалдарын келтірейік:

(i) Гармоникалық осциллятордың энергия операторы

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

шектелмеген, өйткені  $H\psi^{(n)} = E_n\psi^{(n)}$  үшін  $E_n$ -нің кез келген үлкен мәнінде  $\|\psi_n\|=1$  болатын  $\psi_n$  күйлері бар.

(ii) Координата операторы  $x$ : мысалы,  $\psi^{(n)} = \frac{e^{-x^2/2n^2}}{\pi^{1/4} n^{1/2}}$  күйі нормаланған, бірақ

$$\|x\psi_n^{(n)}\|^2 = \frac{n^2}{2}$$

кез келген үлкен мән қабылдай алады.

(iii) Бірөлшемді кеңістікте  $\psi(x) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{x^2 + a^2}} \in \mathcal{H}$ , бірақ  $x\psi \notin \mathcal{H}$ .

Осы мысалдардан анық көретініміз: кейде оператордың  $\mathcal{H}$  кеңістігіндегі векторға әсері анықталмайды (яғни, күй  $\mathcal{H}$  кеңістігінде жатпайды). Сондықтан  $A$  операторының  $\mathcal{D}(A)$  анықталу облысын табу керек, ол үшін  $A$  әсер ететін субкеңістікті анықтайық:

$$\psi \in \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{H}, \text{ егер } A\psi \in \mathcal{H}. \quad (7.21)$$

(7.21) анықтамасындағы анықталу облысын кеңейтуді қажет ететін жағдайда, оған рұқсат ету үшін жеткілікті икемді.  $A$  операторының  $B$  операторына *кеңеюін* келесі түрде анықтауға болады

$$\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(B) \quad \text{және} \quad \forall |f\rangle \in \mathcal{D}(A): \quad A|f\rangle = B|f\rangle.$$

Шектелмеген операторлармен жұмыс істеу қажеттілігі динамикалық айнымалылармен байланысқан операторларға қойылатын дәлірек шарттарды алмастыруға болмайтын талап етеді.

Алдымен 2.3.2-бөлімшесіндегі талқылауымызды еске түсірейік.  $A$  операторы эрмиттік немесе симметриялы деп аталады, егер

$$\forall f, g \in \mathcal{D}(A): \quad \langle Af | g \rangle = \langle f | Ag \rangle. \quad (7.22)$$

Кез келген күйінде динамикалық айнымалының орташа (күтілетін) мәні нақты болуы қажет. Осы айтылғанның қажетті және жеткілікті шарты:  $A$  операторының эрмиттік болуы.

Шекті өлшем ( $N$ ) кеңістігіндегі осы талап келесі шартқа эквивалентті: операторды өрнектейтін матрица берілген базисте эрмиттік болуы қажет. Ендеше  $\{|e_i\rangle\}$  ортонормаланған базис болсын және ол матрицаны

$$A|e_i\rangle = \sum_{j=1}^N A_{ji} e_j \quad (7.23)$$

анықтайды. (7.22) теңдеуінен бірден табамыз

$$A_{ij} = A_{ji}^* eA\left(\sum_i c_i |e_i\rangle\right) = \left(\sum_{ij} A_{ij} c_j\right) |e_i\rangle.$$

Осы орайда маңызды теореманы (Хеллинггер-Тёплицтің теоремасын) пайдаланайық: егер оператор  $\mathcal{H}$  кеңістігінде анықталған болып және келесі қасиетке

$$\langle A\phi | \psi \rangle = \langle \phi | A\psi \rangle$$

ие болса, онда ол оператор байланысқан. Бұдан келесі қорытынды жасауымызға болады: шектелмеген оператор үшін «нақтылық» анықтамасын ерекше мұқият зерттеу қажет.

### 7.3.1 Өзіне түйіндес операторлар

Егер кез келген берілген  $\psi \in \mathcal{H}$  векторы үшін басқа  $\eta \in \mathcal{H}$  векторы табылса және ол үшін

$$\langle A\phi | \psi \rangle = \langle \phi | \eta \rangle, \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(A)$$

теңдігі орындалатын болса, онда олар өзара төмендегідей байланысқан

$$A^\dagger |\psi\rangle = |\eta\rangle.$$

Мұндай  $\eta$  вектордың табылуын  $\mathcal{D}(A^\dagger)$  анықтайды.  $A^\dagger$  операторы  $A$  операторының *түйіндесі* деп аталады. Осы анықтаманың мағынасы егер  $A$  тек қана тығыз анықталған, яғни  $\overline{\mathcal{D}(A)} = \mathcal{H}$  болғанда ғана мағынасы бар. Кері жағдайда,  $v$  айнымалысы  $\overline{\mathcal{D}(A)}$  элементіне ортогональді болсын. Онда  $\langle \phi | \eta \rangle = \langle \phi | \eta + v \rangle$  өрнегін алар едік, сондықтан  $\eta$  векторының анықтамасы дәл болмайды.

Атап өтейік

$$\langle A\phi | \psi \rangle = \langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle,$$

онда скалярлық көбейтіндінің анықтамасынан келесі теңдікті аламыз

$$\langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle = (\langle \psi | A | \phi \rangle)^*.$$

Дербес жағдайда, егер  $A$  үшін матрицаның көрінісі табылатын болса, онда  $(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$  эрмиттік түйіндесі болатындығын көреміз. Яғни эрмиттік түйіндесі, бұл шекті өлшемді кеңістіктегі сызықтық алгебрадан белгілі. Симметриялы оператор үшін

$$\langle A\phi | \psi \rangle = \langle \phi | A\psi \rangle \text{ орынды, егер кез келген екі вектор } \phi, \psi \in \mathcal{D}(A).$$

Демек, егер  $\phi \in \mathcal{D}(A)$  орындалса, онда  $\phi \in \mathcal{D}(A^\dagger)$  болады. Өзге сөзбен айтатын болсақ, оператор симметриялы, егер

$$A^\dagger \psi = A\psi, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(A), \quad \mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^\dagger). \quad (7.24)$$

Егер одан әрі де

$$\mathcal{D}(A^\dagger) \subset \mathcal{D}(A) \quad (7.25)$$

шартын қанағаттандыратын болса, онда оператор *өзіне түйіндес* деп аталады.

Кез келген өзіне түйіндес операторы үшін

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle^*, \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(A) \quad (7.26)$$

қатынасы орындалады, яғни кез келген күй (оның өзіндік

мәндерінің кез келгені) үшін оның орташа мәні нақты болады. Осы айтылғандар келесі постулатқа саяды:

*Кез келген динамикалық айнымалыға өзіне түйіндес операторы сәйкес келеді.*

Бір көргенде осы талап кездейсоқ болып көрінеді. Өйткені эрмиттік және өзіне түйіндес операторларының айырмашылығы физикалық орынсыз болатын математикалық айлақорлық па? Шындығында математикалық талаптардың тізбегінен бөлек осы нақтырақ физикалық негізделген. Мысалы  $A$  бақыланатын  $A$  операторына сәйкес келсін. Өте зерделі физикалық талаптың мағынасы: екеуінің арасындағы қатынасқа тәуелсіз  $A$  бақыланатынның  $f(A)$  функциясы  $f(A)$  операторымен байланысты болуында. Бұл осы талапты қанағаттандыратын симметриялы операторлардың ішіндегі тек өзіне түйіндес операторлары.

Осы оқулықтың көптеген жағдайларында біз автоматты түрде өзіне түйіндес болатын симметриялы операторларын пайдаланамыз. Әдетте  $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^\dagger)$  анықталу облысы жөніндегі сұрақ тривиалдық емес мәселелерде туындайды. Мұндай жағдайларда симметриялы операторды өзіне түйіндес операторына дейін кеңейту кезінде өте мұқият болған абзал. Кейде кеңею жалғыз емес: берілген классикалық операторға біреуден артық физикалық әртүрлі кванттық оператор сәйкес келуі мүмкіндігін көре аламыз. Қосымшада гильберттік кеңістік үшін талданған кейбір мысалдарды қараңыздар.

Өзіне түйіндес операторлардың маңыздылығын дәлелдеусіз келтірілген келесі екі теоремадан бағалауға болады. Унитарлық операторлардың анықтамасымен 7.4-бөлімінде танысасыздар.

**7.1-теорема.**  $A$  операторы өзіне түйіндес және

$$U(t) \equiv e^{itA} \quad (7.27)$$

үздіксіз параметрі үшін  $t \in \mathbb{R}$  орынды деп болжайық. Онда келесі жағдайлар осының салдары болады:

- (а)  $t, s$  нақты үшін  $U^\dagger(t)U(t) = \mathbf{1}$ ,  $U(t+s) = U(t)U(s)$  орындалады.
- (ә) кез келген  $\phi \in \mathcal{H}$  және  $t \rightarrow t_0$  үшін  $U(t)\phi \rightarrow U(t_0)\phi$  орындалады.

(б) кез келген  $\psi \in \mathcal{D}(A)$  үшін  $\frac{U(t)\psi - \psi}{t} \xrightarrow{t \rightarrow 0} iA\psi$  орындалады.

(в) егер  $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)\psi - \psi}{t}$  табылса, онда  $\psi \in \mathcal{D}(A)$ .

**7.2-теорема (Стоун теоремасы)** Егер  $\mathcal{H}$  кеңістігіндегі  $U(t)$  операторы унитарлық және  $t$ -да қатал үздіксіз (яғни, жоғарыда келтірілген (а) және (ә) қасиеттерін қанағаттандыратын) болса, онда  $\mathcal{H}$  кеңістігінде  $A$  өзіне түйіндес операторы табылады және оның түрі төмендегідей болады

$$U(t) = e^{itA}. \quad (7.28)$$

Жоғарыда сипатталған  $U(t)$  операторлары унитарлық және  $t$ -ның өзгерісінде табылған операторлардың семьясы бір параметрлік унитарлық операторлар группасы болып табылады. Стоун теоремасы бір параметрлік унитарлық операторлар группасы мен өзіне түйіндес операторларының тығыз байланысын көрсетеді. Стоун теоремасындағы  $A$  операторын әдетте түрлендірудің шексіз кіші генераторы деп атайды. Оқырман осы бекінімдерден шекті өлшемді кеңістіктердегі аналогиялық қасиеттердің табиғи жалпылануын көреді; сондықтан, енді өзіне түйіндес операторлары эрмиттік матрицалардың көптеген қасиеттерін сіңірген деп айтуға болады. Өзіне түйіндес операторлардың қарапайым, бірақ маңызды қасиеті – ол егер  $B$  операторы өзіне түйіндес және  $A = B^\dagger B$  болса, онда  $A$  жартылай оң анықталған шама болады:

$$\langle \psi | B^\dagger B | \psi \rangle \geq 0 \quad (7.29)$$

және теңдік орындалады, егер және тек қана егер  $B|\psi\rangle = 0$  болса.

Шредингер теңдеуін талдауды оның өзіндік мәндерін зерделеумен бастадық; ал олар (өзіндік мәндері) энергияның мүмкін болатын өлшеулерінен анықталады. Мұннан өзіне түйіндес операторларының маңыздылығын көреміз.

---

Шекті өлшемді кеңістіктердегі эрмиттік матрицаны унитарлық түрлендірулермен диагональдік түрге келтіруге болатыны кеңінен белгілі. Мұндай базисте матрицаның түрі

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & \lambda_k \end{pmatrix} \quad (7.30)$$

болады. Әрбір  $\lambda_i$  өзіндік мәні анықталған  $n_i$  жиыны пайда болуы мүмкін. Маңызды момент болып (7.30) теңдеуінің базиске тәуелсіз түрінде жазылуы мүмкіндігі табылады. Расында, әрбір блоктағы  $n_i \times n_i$ - матрицасының өлшемі мультиплеттің тектестігіне еселі, бұл  $\lambda_i$  өзіндік мәнімен байланысты субкеңістікке проекциясын білдіреді. Егер бірінші  $\lambda_1$  өзіндік мәнге сәйкес келетін өзіндік векторлар  $e_1^{(a)}, e_1^{(b)}, \dots$ , болып табылса, онда жоғарыда көрсетілген матрицаның бірінші бөлігі мынадай болады:

$$\lambda_1 \left( |e_1^{(a)}\rangle \langle e_1^{(a)}| + |e_1^{(b)}\rangle \langle e_1^{(b)}| + \dots \right) = \lambda_1 \Pi_1,$$

мұндағы  $\Pi_1 - e_1^{(a)}, e_1^{(b)}, \dots$  векторларынан құралатын субкеңістігіндегі проекциялық операторы. Жалпы, келесі жіктеуді

$$A = \sum_i \lambda_i \Pi_i \quad (7.31)$$

матрицаның *спектрлік жіктеуі* деп атайды. Проекциялық операторлар өзара ортогональді екендігін және келесі тепе-теңдік

$$\mathbb{I}_{N \times N} = \sum_i \Pi_i$$

( $\mathbb{I}_{N \times N}$  – тепе-теңдік матрицасы) орындалатынын ескеру қажет. Бұл өзіндік векторлардың базисі толық екенін білдіреді.

### Өзіне түйіндес операторлар

(7.31) теңдеуінің аналогын өзіне түйіндес операторлар үшін де жазуға болады. А өзіне түйіндес операторының спектрі оның дұрыс өзіндік мәндері (дискретті өзіндік мәндері) мен бұрыс өзіндік мәндерінің (үздіксіз өзіндік мәндері) ансамблі. Біріншілері, яғни дискретті өзіндік мәндері  $\lambda$ -ның келесі талаптарды қанағаттандыратын

$$(A - \lambda_m) |\psi_m\rangle = 0; \quad \|\psi_m\| = 1, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (7.32)$$

мәндеріне сәйкес келетінін білеміз.

Алайда спектрлері үздіксіз болатын операторлар (және

жүйелер) үшін мәндері олардың спектріне жатуының анықтау критерийлері одан жалпы түрде өрнектелуі қажет. Енді  $A$  операторының **резольвенталар (қалықтар) жинағын** анықтайық, ол  $x \in \rho(A) \subset \mathbb{R}$  нүктелерінің ансамблінен құралсын:

$$R(x) = (A - x\mathbf{1})^{-1}, \quad \|R\| < \infty,$$

мұндағы  $A - x\mathbf{1}$  кері байланысты  $A$  операторының резольвентасы деп атайды. Физика тұрғысынан  $A$  операторының спектрі анықтамасына сәйкес барлық  $x \notin \rho(A)$  жиыны  $\rho(A)$  және  $\sigma(A)$ -дың толықтыруы болатыны түсінікті. Резольвенталардың жиыны ашық жиын болатыны айқын, демек  $\sigma(A)$  жабық жиынын құрайды.

Осы шарттар (7.32) теңдеуіне ұқсас өрнектелуі мүмкін және кеңінен танымал

### Вейль критерийі:

$\lambda$  мәні өзіне түйіндес  $A$  операторының спектріне жатады сол жағдайда, егер және тек қана егер  $\psi_N$  тізбегі төмендегідей шартты қанағаттандырса

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|A\psi_N - \lambda\psi_N\| = 0, \quad \|\psi_N\| = 1. \quad (7.33)$$

Басқа сөзбен айтатын болсақ, оператордың (үздіксіз немесе бұрыс) өзіндік мәндері болып: тіпті сол тізбектің шегі нормаланбайтын функция болса дағы, алайда *өзіндік функциялары түсінігіне мейлінше жақын*,  $\mathcal{H}$  кеңістігінде жататын функциялардың мәндері табылады. Әлбетте,  $\lambda_m$  дискреттік өзіндік мәндері  $\forall N$  үшін  $\psi_N = \psi_m$  функциялары Вейль критерийін тривиалдық түрде қанағаттандырады.

Мысалы, импульс операторы. Оның

$$\psi_N = \frac{1}{\pi^{1/4} N^{1/2}} e^{ipx/\hbar} e^{-x^2/2N^2}, \quad N = 1, 2, \dots \quad (7.34)$$

тізбегінің бар болуы нақты мәндерінің барлығы  $p = -i\hbar(d/dx)$  спектріне жататынын көрсетеді. Аналогиялық түрде координаталар операторы үшін де

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|(x - x_0)\psi_N\| = 0, \quad (7.35)$$

ал оның тізбегі төмендегідей<sup>3</sup>

$$\psi_N = \left( \frac{2N}{\pi} \right)^{1/4} e^{-N(x-x_0)^2}, \quad N=1,2,\dots \quad (7.36)$$

А операторының өзіне түйіндістігі талабының салдары: нақты (дұрыс және бұрыс) өзіндік мәндері жинағының  $\{\lambda_n, \lambda\}$  болуы және проекциялық операторлар семьясының (әрине, үздіксіз спектрі  $[\lambda_0, \infty)$  ұйғарылады):

$$\mathcal{P}_c(\lambda) = \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda' \sum_{\alpha} |\lambda', \alpha\rangle \langle \lambda', \alpha|, \quad \mathcal{P}_n = \sum_{\alpha} |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha| \quad (7.37)$$

болуын аламыз. Мұндағы  $\alpha$  индексі барлық мүмкін болатын сетінеген жиындар бойынша жүргізіледі. Қарапайымдық мақсатында біз Дирактың белгілеуін пайдаланайық, ал оның нормалануы төмендегідей болады:

$$\langle \lambda, \alpha | \lambda', \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta(\lambda - \lambda').$$

Егер сетінеу үздіксіз спектрінде табылса, онда белгілеулердің айқын өзгерісі  $\alpha$  бойынша қосындылауға қатысты болады. Проекциялық операторлардың бар болуы таңдалған базиске тәуелді емес. Бұдан әрі формулалар проекциялық операторларда да, бұрыс өзіндік векторлар негізінде де берілетін болады.

(7.37) теңдеуіндегі екі мүшені біріктіру ыңғайлы, ол үшін

$$\mathcal{P}(\lambda) = \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\lambda' \left[ \sum_{\alpha} |\lambda', \alpha\rangle \langle \lambda', \alpha| + \sum_{\alpha} \delta\left(\lambda' - \lambda_n \sum_{\alpha} |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha|\right) \right] = \int_{\lambda_0}^{\lambda} d\mathcal{P}(\lambda')$$

өрнегін пайдаланамыз. Мұнда  $\mathcal{P}(\lambda)$  функциясы дискреттік спектрлерге қатысты нүктелерде үздікті, яғни сол нүктелерде үзіледі және сол нүктенің оң жағынан бастап үздіксіз болады:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_n^+} \mathcal{P}(\lambda) = \mathcal{P}(\lambda_n) = \int_{\lambda}^{\lambda_n} d\lambda' \sum_{\alpha} |\lambda', \alpha\rangle \langle \lambda', \alpha| + \sum_{\lambda_k \leq \lambda_n} \sum_{\alpha} |k, \alpha\rangle \langle k, \alpha|;$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_n^-} \mathcal{P}(\lambda) = \mathcal{P}(\lambda_n) = \int_{\lambda}^{\lambda_n} d\lambda' \sum_{\alpha} |\lambda', \alpha\rangle \langle \lambda', \alpha| + \sum_{\lambda_k < \lambda_n} \sum_{\alpha} |k, \alpha\rangle \langle k, \alpha|.$$

<sup>3</sup> Есеп. Тізбегі (7.34) және  $\lambda = p$  болатын  $\hat{p} = -i\hbar(d/dx)$  операторы (7.33) теңдеуін қанағаттандыратынын көрсетіңіздер. (7.35) өрнегін дәлілдеңіздер.

$\mathcal{P}$  операторлары ортогоналдық проекциялық операторлардың қосындысы болады және келесі шартты қанағаттандырады

$$\lambda_1 < \lambda_2 \Rightarrow \mathcal{P}(\lambda_1)\mathcal{P}(\lambda_2) = \mathcal{P}(\lambda_1), \quad (7.38)$$

ал бұл бізге таныс проекциялық операторларының дискретті жағдайындағы қасиеттерінің

$$\mathcal{P}_n^2 = \mathcal{P}_n, \quad \mathcal{P}_n\mathcal{P}_m = 0, \quad m \neq n$$

табиғи жалпылауы болып табылады

$\mathcal{P}$  операторлары келесі шарттарды қанағаттандырады (*спектрлік теорема*):

$$\mathbf{1} = \int d\mathcal{P}(\lambda) = \int d\mathcal{P}_c(\lambda) + \sum_n \mathcal{P}_n; \quad (7.39a)$$

$$|\psi\rangle = \int d\mathcal{P}(\lambda)|\psi\rangle = \int d\mathcal{P}_c(\lambda)|\psi\rangle + \sum_n \mathcal{P}_n|\psi\rangle, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}; \quad (7.39\theta)$$

$$A = \int \lambda d\mathcal{P}(\lambda) = \int \lambda d\mathcal{P}_c(\lambda) + \sum_n \lambda_n \mathcal{P}_n. \quad (7.39\delta)$$

Дербес жағдайда,  $A|\psi\rangle$  гильберттік кеңістікте жатуы керек болғандықтан:

$$\langle A\psi | A\psi \rangle = \langle \psi | A^2\psi \rangle < \infty \quad (7.40)$$

және сондықтан  $A$  дисперсиясы шекті. Айқын түрінде жазатын болсақ:

$$\begin{aligned} \langle \psi | A^2\psi \rangle &= \int \lambda^2 d\|\mathcal{P}(\lambda)\psi\|^2 = \int \lambda^2 d\|\mathcal{P}_c(\lambda)\psi\|^2 + \sum_n \lambda_n^2 \|\mathcal{P}_n\psi\|^2 \equiv \\ &\equiv \int d\lambda \lambda^2 \sum_\alpha |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2 + \sum_n \lambda_n^2 \sum_\alpha |\langle n, \alpha | \psi \rangle|^2. \end{aligned}$$

Спектрлік теорема  $A$  бақыланатын көріністе берілген  $f(A)$  операторын анықтауға рұқсат береді:

$$f(A) = \int f(\lambda) d\mathcal{P}(\lambda) = \int f(\lambda) d\mathcal{P}_c(\lambda) + \sum_n f(\lambda_n) \mathcal{P}_n, \quad (7.41)$$

мұндағы  $f(x)$  –  $x$ -тің кез келген функциясы. Мысалы, оның орташа мәні келесідей анықталады.

$$\begin{aligned} \langle \psi | f(A) | \psi \rangle &= \int f(\lambda) d\|P(\lambda)\psi\|^2 = \int f(\lambda) d\|P_c(\lambda)\psi\|^2 + \sum_n f(\lambda_n) \|P_n\psi\|^2 \equiv \\ &\equiv \int d\lambda f(\lambda) \sum_\alpha |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2 + \sum_n f(\lambda_n) \sum_\alpha |\langle \lambda_n, \alpha | \psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (7.42)$$

Біз (7.39а, ө) теңдеулерінен толықтық қатынасын көреміз. Шындығында осы қатынастар кванттық механика ережелерінің дербес жағдайда Р3, Р4 постулаттарының тұрақтылығына кепіл болады. Егер  $\mathcal{A}$  бақыланатынның орташа мәндері  $A$  операторының күтілетін мәндерімен берілетін болса, онда

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \int \lambda d\|P(\lambda)\psi\|^2 = \int \lambda d\|P_c(\lambda)\psi\|^2 + \sum_n \lambda_n \|P_n\psi\|^2 \equiv \\ &\equiv \int d\lambda \lambda \sum_\alpha |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2 + \sum_n \lambda_n \sum_\alpha |\langle \lambda_n, \alpha | \psi \rangle|^2 \end{aligned} \quad (7.43)$$

болатынын көреміз. (7.43) өрнегін жазғанымызда, біз  $P(\lambda)$  операторының проекциялық екендігін пайдаландық, яғни

$$\langle \psi | dP(\lambda) | \psi \rangle = d\langle \psi | P(\lambda) | \psi \rangle = d\langle P(\lambda)\psi | P(\lambda)\psi \rangle = d\|P(\lambda)\psi\|^2.$$

(7.43) теңдеуі бізге

$$\rho(\lambda)d\lambda = \int \sum_\alpha |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2 d\lambda; \quad P_n = \sum_\alpha |\langle \lambda_n, \alpha | \psi \rangle|^2 \quad (7.44)$$

өрнектерін сәйкесінше  $\mathcal{A}$  бақыланатыны ( $\rho$  – ықтималдылық тығыздығы) үшін  $[\lambda, \lambda + d\lambda]$  диапазонында сақталатын мәндерінің бақылану ықтималдылығы немесе  $\mathcal{A}$ -ның  $\lambda_n$  мәндерін қабылдаудың ықтималдылығы ретінде интерпретациялауға рұқсат береді. Дербес жағдайда, толық ықтималдылық келесі теңдеумен беріледі:

$$\int \rho(\lambda)d\lambda + \sum_n P_n = \langle \psi | \left\{ \int dP_c(\lambda) + \sum_n P_n \right\} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (7.45)$$

### Өзіне түйіндес операторлардың орташа мәндері

Өзіне түйіндес операторлардың орташа мәндері кез келген күй үшін нақты болатынын біз көргенбіз. Өзіне түйіндес оператордың елеулі қасиеті болып оператордың өзінің орташа мәндерінен қайта

құрастыруға болатындығында;<sup>4</sup> мысалы, екі оператордың барлық күйлердегі орташа мәндері тең болса, онда олар бір-біріне тең.

**7.3-теорема.** *Егер екі (максималды кеңейтілген) өзіне түйіндес  $A$ ,  $B$  операторлары төмендегідей шартты қанағаттандырса*

$$\forall \psi \text{ үшін } \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle,$$

онда  $A=B$ .

### Коммутациялайтын операторлар

Екі  $A, B$  бақыланатындарды бір мезгілде өлшеу үшін сәйкес келетін  $A, B$  операторлары коммутациялайтын болулары қажеттігін көрсеткенбіз (42 бетті қараңыз). Осы орайда пайдалы теореманы келтірейік:

**7.4-теоремасы. (фон Нейман теоремасы)** *Екі (максималды кеңейтілген) өзіне түйіндес және коммутациялайтын  $A$  және  $B$  операторлары берілсін. Онда  $A$  және  $B$  операторларының аргументі болатын  $R$  операторы табылады, яғни  $A = F(R)$ ,  $B = G(R)$ .*

Дискреттік спектрлерге ие болатын операторлар үшін дәлелдеуінің идеясын берейік. Алдында көрсеткеніміздей, егер екі  $A$  және  $B$  операторлары коммутациялайтын болса, онда негіздері ортақ өзіндік векторларын таңдауға болады

$$A|n\rangle = \lambda_n |n\rangle, \quad B|n\rangle = \mu_n |n\rangle.$$

Енді қандай да  $x_n$  тізбегін қарастырайық және өзіне түйіндес  $R$  операторын құрастырайық; оны келесідей анықтайық:

$$R = \sum_n x_n |n\rangle \langle n|, \quad R|n\rangle = x_n |n\rangle.$$

Өрқашан екі  $F$ ,  $G$  функцияларын кез келген берілген  $n$  үшін  $F(x_n) = \lambda_n$  және  $G(x_n) = \mu_n$  болатындай етіп таңдай аламыз. Ендеше спектрлік жіктеуді пайдаланып, табамыз

<sup>4</sup> Екі  $f + g$  және  $f + ig$  күйлерінің векторларын қарастырайық, онда:

$$\langle f + g | A | f + g \rangle = \langle f | A | f \rangle + \langle g | A | g \rangle + 2\text{Re}[\langle g | A | f \rangle];$$

Демек,  $\text{Re}[\langle g | A | f \rangle]$  және  $\text{Im}[\langle g | A | f \rangle]$   $A$ -ның орташа мәнімен анықталады.

$$F(R) = \sum_n F(x_n) |n\rangle \langle n| = \sum_n \lambda_n |n\rangle \langle n| = A,$$

$$G(R) = \sum_n G(x_n) |n\rangle \langle n| = \sum_n \mu_n |n\rangle \langle n| = B.$$

## 7.4 Унитарлық түрлендірулер

Кванттық механикадағы физикалық шамалар әртүрлі операторлардың матрицалық элементтерімен байланысқан

$$\langle \phi | O | \psi \rangle \quad (7.46)$$

немесе  $O | \psi \rangle$  вектор бола отырып, әртүрлі скалярлық көбейтінділерге қатысады

$$\langle f | g \rangle. \quad (7.47)$$

Әрине орынды сұрақ туады:  $\forall f$  үшін базисті өзгертудің қандай түрлерінде  $f \rightarrow Uf$  физикасы сақталып қала береді? Басқаша айтсақ,  $U$  операторының қандай түрлерінде келесі қатынас

$$\langle Uf | Ug \rangle = \langle f | g \rangle \quad (7.48)$$

барлық  $f, g$  үшін орындалады? «Базис өзгерісінің» осындай сорты күйдің, оператордың және т.б. әртүрлі сипатталатынына қарамастан, теорияның барлық физикалық болжамдарын инвариантты етіп қалдырады.<sup>5</sup> Егер осы сияқты түрлендірулер гамильтонианның *пішінін* сақтайтын болса, онда оның *симметриямен* байланыстылығы сөзсіз (5.1-бөлімін қараңыз); алайда біздің қарастырып отырған рұқсат етілген базалық түрлендірулерінің түсінігі жалпы сипатқа ие.

Сонымен, біз жүйенің әрбір векторы үшін осындай түрлендірулерін жасағымыз келеді, бірақ ол үшін  $D(U) = \mathcal{H}$  болуы қажет; оған қоса көрініс өзгертін болғандықтан, бастапқы және жаңа көріністердің

<sup>5</sup> Дәлірек айтсақ,  $\langle Vf | Vg \rangle = (\langle f | g \rangle)^*$  қатынасындағы түрлендіру барлық күйлер үшін орынды және олар уақыттың кері бұрылу симметриясымен рұқсат етілгенін 5.1-бөлімінде көрсетілген болатын. Оларды антиунитарлық түрлендірулер деп атайды.

рөлі бірін-бірі алмастыра алуы керек:  $U$  бейнесі  $\mathcal{H}$  кеңістігі бола алады. Сонымен, келесі

**Анықтама.** Анықталу облысы  $\mathcal{H}$  және бейнесі  $\mathcal{H}$  болатын  $U$  операторын *унитарлық* деп атайды, егер

$$\boxed{\forall x, y \in \mathcal{H}: (Ux, Uy) = (x, y)} \quad (7.49)$$

болса. Назар аударыңыздар: ешқандай да сызықтық жөнінде талап жоқ; тек барлық гильберттік кеңістікте анықталғандығы және  $\mathcal{H}$  кеңістігіне әсері сюррективтік болуы талап етіледі. Бірден  $U$ -дың кері шамасы бар екендігін көрсетуге болады, яғни егер  $f = g$  болса, онда  $f = g$ :

$$\begin{aligned} 0 &= (Uf - Ug, Uf - Ug) = (Uf, Uf) - (Uf, Ug) - (Ug, Uf) + (Ug, Ug) = \\ &= (f, f) - (f, g) - (g, f) + (g, g) = (f - g, f - g) \Rightarrow f = g \end{aligned}$$

$U^{-1}$  унитарлық болатынына күмән жоқ. Алдымен  $f = \alpha_1 x + \alpha_2 y$  болсын және кері шамасының бар болатынын пайдаланып

$$\begin{aligned} (g, Uf) &= (U^{-1}g, f) = (U^{-1}g, \alpha_1 x + \alpha_2 y) = \alpha_1 (U^{-1}g, x) + \alpha_2 (U^{-1}g, y) = \\ &= \alpha_1 (g, Ux) + \alpha_2 (g, Uy); \end{aligned}$$

$$g - \text{кез келген} \Rightarrow U(\alpha_1 x + \alpha_2 y) = \alpha_1 Ux + \alpha_2 Uy.$$

Демек, унитарлық оператор да *сызықтық* болып табылады. Жоғарыда көрсетілген қатынастардан  $U^\dagger = U^{-1}$  болатынын көреміз. Ал  $(Uf, Uf) = |Uf|^2 = |f|^2$  қатынасынан  $\|U\| = 1$  шығады, демек,  $U$  байланысқан оператор және сол себепті үздіксіз.

Қайта жазайық

$$\boxed{U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbf{1}; \quad U^\dagger = U^{-1}.} \quad (7.50)$$

Унитарлық түрлендіру кезіндегі *операторларды* түрлендіру заңы (7.50) теңдеуінен шығады: бірлік операторын  $\mathbf{1} = U^\dagger U$  енгізіп, (7.46) теңдеуін екі рет қайта жазайық:

$$\langle \phi | O | \psi \rangle = \langle \phi | U^\dagger U O U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \tilde{\phi} | \tilde{O} | \tilde{\psi} \rangle, \quad (7.51)$$

мұндағы

$$\boxed{|\tilde{\psi}\rangle \equiv U|\psi\rangle; \quad |\tilde{\phi}\rangle \equiv U|\phi\rangle; \quad \tilde{O} \equiv UOU^\dagger.} \quad (7.52)$$

Назар аударыңыздар: күйлердің нормасы инвариантты болып қала береді

$$\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle.$$

(7.51) және (7.52) теңдеулерімен берілген күйлердің векторлары мен операторлардың *түрлендірулерін унитарлық* деп атайды. Кванттық механикада қарастырылатын барлық шамалар (7.47) түріндегідей матрицалық элементтердің қандай да комбинациясына әкелетін болғандықтан, одан келесі салдар шығады: унитарлық түрлендірулер кезінде теория инвариантты болады. Сонымен қатар, бұл төмендегіні білдіреді:

**кванттық механикадағы күйлер мен операторлар унитарлық түрлендірулерге дейінгі дәлдікпен анықталады.**

$U$  унитарлық операторының өзіндік мәндері үшін біз келесі айқын қасиеттерін жазайық:

1. Унитарлық оператордың өзіндік мәндерінің нормасы  $|\lambda|=1$ .
2. Екі түрлі өзіндік мәндеріне сәйкес келетін өзіндік векторлар ортогоналды.

Расында,  $\langle \psi | \psi \rangle = \langle U\psi | U\psi \rangle = |\lambda|^2 \langle \psi | \psi \rangle$ . Екі түрлі өзіндік мәндеріне сәйкес келетін өзіндік векторлар үшін

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle U\psi_1 | U\psi_2 \rangle = \lambda_1^* \lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle.$$

Ал  $\lambda_1^* \lambda_2 \neq 1$  болғандықтан ( $\lambda_1 \neq \lambda_2$  және олардың абсолюттік мәндері 1-ге тең), одан  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$  болатынын көреміз.

(7.39) теңдеуінің пішініне аналогиялық түрде унитарлық операторлары үшін де спектрлік көріністе жазуға болады:

$$\mathbf{1} = \int_0^{2\pi} d\mathcal{P}(\lambda) = \int_0^{2\pi} d\mathcal{P}_c(\lambda) + \sum_n \mathcal{P}_n; \quad (7.53a)$$

$$|\psi\rangle = \int_0^{2\pi} d\mathcal{P}(\lambda) |\psi\rangle = \int_0^{2\pi} d\mathcal{P}_c(\lambda) |\psi\rangle + \sum_n \mathcal{P}_n |\psi\rangle, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}; \quad (7.53b)$$

$$U = \int_0^{2\pi} e^{i\lambda} d\mathcal{P}(\lambda) = \int_0^{2\pi} e^{i\lambda} d\mathcal{P}_c(\lambda) + \sum_n e^{i\lambda_n} \mathcal{P}_n. \quad (7.53b)$$

**Ескерту.** (7.48) өрнегі жалпы түрінде жазылуы мүмкін: кейбір жағдайлар үшін  $U$  операторы гильберттік кеңістіктегі күйлерді

$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$  басқа гильберттік күйлеріне түрлендіру кейде пайдалы да; мұндай түрлендірулерді *изометриялар* деп атайды.

## 7.5 Гейзенберг көрінісі

Классикалық физиканың елеулі нәтижесінің бірі – ол (20.1-қосымшаны қараңыз) уақыт бойынша эволюция  $q(t), p(t) \rightarrow q(t+dt), p(t+dt)$  генераторының рөлін атқаратын гамильтонианның шексіз кіші канондық түрлендірулерінің тізбегі болуында. Аналогиялы, кванттық механикада жүйенің уақыт бойынша эволюциясы унитарлық түрлендірумен өрнектеледі

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (7.54)$$

уақыт бойынша эволюциясының шексіз кіші генераторының рөлін гамильтониан операторы атқарады. Расында, (7.54) теңдеуі Шредингер теңдеуінің формальдық шешімі

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad |\psi(t)\rangle_{t=0} = |\psi(0)\rangle,$$

ал  $H$  өзіне түйіндес (осы жағдай үшін әрқашан орынды) операторы болғандықтан, онда  $\exp(-iHt/\hbar)$  унитарлық операторы (230 беттегі 7.2-теоремасын қараңыз).

Өткен бөлімдегі талқылаулар кванттық механикадағы уақыт бойынша эволюцияны жаңа көзқараспен қарауға мүмкіндік береді. Дербес жағдайда уақытқа тәуелді унитарлық түрлендіруін қарастырайық

$$U(t) = e^{iHt/\hbar}.$$

Жүйенің күйлері мен жалпы операторлары (7.52) теңдеуіне сәйкес түрлендіріледі:

$$|\psi_H\rangle = U(t) |\psi(t)\rangle = e^{iHt/\hbar} |\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle; \quad (7.55)$$

$$O_H(t) = U(t) O U(t)^\dagger = e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar}. \quad (7.56)$$

Мұндай түрлендірулерде барлық матрицалық элементтер инвариантты

$$\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \langle \psi_H | O_H(t) | \psi_H \rangle,$$

бірақ енді уақыт бойынша эволюция Шредингер теңдеуімен сипатталмайды, ол (эволюция) операторлардың уақытқа тривиалдық емес тәуелділігінде болады!

$O$  жалпы операторының қозғалыс теңдеуі (7.56) теңдігінен шығады; оның түрі<sup>6</sup>

$$i\hbar \frac{dO_H}{dt} = i\hbar \frac{\partial O_H}{\partial t} + [O_H, H], \quad (7.57)$$

мұнда, егер оператор уақытқа айқын түрде тәуелді болса, онда теңдіктің оң жағындағы бірінші мүше нөлге тең емес. Осы (7.57) теңдеуін *Гейзенбергі теңдеуі* деп атайды.

Кванттық механикадағы уақыт бойынша эволюцияны (7.55), (7.56), (7.57) теңдеулері арқылы сипаттауды **Гейзенберг бейнелеуі** немесе Гейзенберг көрінісі деп атайды. Ал **Шредингер бейнелеуінде** немесе Шредингер көрінісінде күйлердің векторлары уақыт бойынша дамиды. Уақыттың бір сәтінде (мысалы,  $t=0$  үшін) екі суреттеме бірдей болады:

$$O_H(0) = O; \quad |\psi_H\rangle = |\psi(0)\rangle$$

Іргелі коммутаторлардың гамильтонианға тәуелсіз кез келген моментте *теңдей уақытта* пішіндерінің бірдей болуы шешуші маңызға ие:

$$[q_{iH}(t), p_{jH}(t)] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [q_{iH}(t), q_{jH}(t)] = [p_{iH}(t), p_{jH}(t)] = 0. \quad (7.58)$$

Мысалы,

$$[q_{iH}(t), p_{jH}(t)] = [e^{iHt/\hbar} q_i e^{-iHt/\hbar}, e^{-iHt/\hbar} p_j e^{-iHt/\hbar}] = e^{iHt/\hbar} [q_i, p_j] e^{-iHt/\hbar} = i\hbar \delta_{ij}.$$

Шындығында Шредингер бейнелеуіндегі қарапайым операторларды (7.58) жалпы нәтижесінің дербес жағдайы ( $t = 0$  үшін) ретінде көрсетуге болады. Іргелі коммутаторлардың кез келген уақытта

<sup>6</sup> Осы формуланың Пуассон жақшалары арқылы өрнектелген қозғалыстың классикалық теңдеуімен ұқсастығын еске саламыз:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{H, f\}.$$

пішіндері бірдей және гамильтонианның ерекшелігіне (динамикасының егжей-тегжейіне) тәуелсіз болу фактісі кванттық физиканың барлық құрылымының тұрақтылығы үшін маңызды, себебі уақыттың ешқандай да ерекшеленген моменті болмайды.<sup>7</sup>

Және керісінше, екі түрлі уақыттың коммутаторлары

$$[q_{iH}(t), p_{jH}(t')], [q_{iH}(t), q_{jH}(t')], [p_{iH}(t), p_{jH}(t')]$$

динамикалық ақпаратты сақтайды және қарастырып отырылған жүйеге тәуелді.

Назар салыңыздар: Шредингер бейнелеуіндегі әрбір  $f(q, p)$  операторы Гейзенбергтің бейнелеуінде  $f(q_H, p_H)$  операторы болады. Мұны  $q$  және  $p$  дәрежелері кеңеюі мен әрбір мономүшесі үшін  $U^{-1}U$  енгізіп, дәлелдеу жеңіл, мысалы:

$$\begin{aligned} Uq^k p^n U^{-1} &= Uq \dots qp \dots p U^{-1} = Uq U^{-1} Uq U^{-1} U \dots U p U^{-1} \dots \\ &= (Uq U^{-1})^k (U p U^{-1})^n = q_H^k p_H^n. \end{aligned}$$

Сондықтан уақыт бойынша эволюция мәселесі  $q_H$ ,  $p_H$  үшін Гейзенберг теңдеулерінің шешуіне әкеледі:<sup>8</sup>

$$\frac{d}{dt} q_H = -\frac{i}{\hbar} [q_H, H]; \quad \frac{d}{dt} p_H = -\frac{i}{\hbar} [p_H, H]. \quad (7.59)$$

Жоғарыда көрсетілген есептің шешімдері болатын уақытқа тәуелді операторлар (7.58) шектеуін қанағаттандырулары тиіс. Уақыт бойынша эволюциясының мерзімінде соңғысының инвариантты болуы, егер бастапқы уақытта аталған шектеу орындалатын болса, онда уақыттың келесі моменттерінде де қанағаттандыратынының кепілі болады.

<sup>7</sup> Біз мұнда физикалық әлемнің стандарттық қасиеттерін қарастырамыз, яғни уақыт біртекті және толық энергияның сақталуы өте жоғары дәлдікпен орындалады. Үлкен Жарылыстың бастапқы сингулярлығының маңайында – Ғаламның кеңеюінде – кванттық гравитацияның эффектілері өте маңызды және кеңістік пен уақыттың қатты қисаюы кезінде кванттық механиканың барлық тұжырымдамасына түбегейлі өзгерістер енгізілуі мүмкін.

<sup>8</sup> Есеп. Бірөлшемді кеңістікте қозғалатын масасы  $m$  болатын еркін бөлшек үшін Гейзенберг теңдеуін шешіңіздер. Уақыттың  $t \neq 0$  моментінде  $[q_H(t), q_H(0)]$  коммутаторын есептеңіздер. (Жауабы:  $[q_H(t), q_H(0)] = -i\hbar t / m$ .)

### 7.5.1 Гейзенберг бейнелеуіндегі гармоникалық осциллятор

Сызықтық осцилляторды қарастырайық:

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

Гейзенберг бейнелеуіндегі гамильтонианның түрі

$$H_H = UH(x, p)U^\dagger = H(UxU^\dagger, UpU^\dagger) = \frac{p_H^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x_H^2.$$

Енді Гейзенберг теңдеулерін жазайық:

$$m\dot{x}_H = p_H; \quad \dot{p}_H = -m\omega^2x_H.$$

Шешімінің түрі классикалық механикадағымен бірдей

$$x_H(t) = x \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} p \sin \omega t; \quad (7.60)$$

$$p_H(t) = p \cos \omega t - m\omega x \sin \omega t. \quad (7.61)$$

Жарату (3.35) және жою (3.34) операторларының тұрғысынан

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + i\frac{p}{m\omega}\right),$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - i\frac{p}{m\omega}\right),$$

ал (7.61) теңдеуінен келесі өрнекті аламыз:

$$a_H(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[x \cos \omega t + \frac{p}{m\omega} \sin \omega t + i\frac{p}{m\omega} \cos \omega t - ix \sin \omega t\right] = a_H(0)e^{-i\omega t}$$

және аналогиялық түрде табамыз:

$$a_H^\dagger(t) = a_H^\dagger(0)e^{i\omega t}.$$

Демек,

$$a_H(t) = ae^{-i\omega t}; \quad a_H^\dagger(t) = a^\dagger e^{i\omega t} \Rightarrow \quad \dot{a}_H(t) = -i\omega a_H; \quad \dot{a}_H^\dagger(t) = +i\omega a_H$$

Гамильтонианның гейзенбергтік пішінін жарату және жою операторларының көмегімен жазатын болсақ, шешімдері табиғи жолмен табылады

$$H = \frac{\omega \hbar}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a) = \omega \hbar \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right),$$

мұнда келесі коммутациялық қатынасын пайдаландық

$$[a, a^\dagger] = 1.$$

Гейзенберг бейнелеуін пайдаланудың мысалы ретінде  $t = 0$  моментіндегі нақты  $\psi_0(x)$  толқындық пакетпен сипатталатын сызықтық осцилляторды қарастарайық. Ол үшін орташа мәндері және  $\langle \psi_0 | x^2 | \psi_0 \rangle \equiv x_0^2$  белгілі деп болжап,  $\langle \psi(t) | p^2 | \psi(t) \rangle$  анықтайық. Шредингер бейнелеуіндегі  $|\psi(t)\rangle$ -ны табу үшін, алдымен Шредингер теңдеуін шешу қажет, содан соң  $p^2$ -тың орташа мәні анықталады. Ал Гейзенбергтің бейнелеуінде мәселе жеңіл шешіледі:

$$\langle \psi(t) | p^2 | \psi(t) \rangle = \langle \psi_0 | U(t) p^2 U^{-1} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | p_H(t)^2 | \psi_0 \rangle.$$

Бірақ,

$$p_H(t)^2 = p^2 \cos^2 \omega t + m^2 \omega^2 x^2 \sin^2 \omega t - m\omega(xp + px) \cos \omega t \sin \omega t$$

Мұнда (7.61) теңдеуі пайдаланылды; одан әрі байқайтынымыз

$$\langle \psi_0 | xp + px | \psi_0 \rangle = 0$$

(теңдіктің сол жағы эрмиттік оператордың орташа мәні болғандықтан, нақты болады, алайда ол кез келген нақты толқындық функция үшін толық жормал сан болады). Бұдан келесі өрнек шығады

$$\langle \psi(t) | p^2 | \psi(t) \rangle = p_0^2 \cos^2 \omega t + m^2 \omega^2 x_0^2 \sin^2 \omega t.$$

Аналогиялық түрде

$$\langle \psi(t) | x^2 | \psi(t) \rangle = x_0^2 \cos^2 \omega t + \frac{1}{m^2 \omega^2} p_0^2 \sin^2 \omega t.$$

Нақты емес бастапқы толқындық функциялар (қозғалатын толқындық пакеттер) үшін моментінде  $xp + px$  операторының орташа мәнін де ескеруіміз қажет.

## 7.6 Анықталмағандық принципі

Абстрактылық гильберттік кеңістігінің математикалық құрылымы мен физика арасындағы байланыс Шредингер бейнелеуіндегі динамикалық  $q, p$  айнымалылары мен  $Q, P$  операторлары арасындағыдай жүргізіледі:

$$q \rightarrow Q, \quad Q\psi(x) = x\psi(x); \quad p \rightarrow P, \quad P\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x),$$

бұл – де Бройль гипотезасының математикалық жүзеге асырылуы. Өз кезегінде ол келесі коммутаторға әкеледі

$$\boxed{[Q, P] = i\hbar}, \quad (7.62)$$

ал осы коммутатор постулаттардың бірі (P5) ретінде көрсетілген болатын.

Ол унитарлық түрлендірулер кезінде инвариантты: расында, егер  $\tilde{Q} = UQU^{-1}$  және  $\tilde{P} = UPU^{-1}$  болсын, онда

$$[\tilde{Q}, \tilde{P}] = UQU^{-1}UPU^{-1} - UPU^{-1}UQU^{-1} = U[Q, P]U^{-1} = i\hbar.$$

Яғни, ол абстрактылық гильберттік кеңістікте әсер етеді.

Енді (7.20) теңдеуінің ыңғайлы жалпы шешімін жазайық

$$Pf(Q) - f(Q)P = -i\hbar f'(Q).$$

Шындығында,

$$\begin{aligned} Pf(Q)\psi(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (f(x)\psi(x)) = -i\hbar [f'(x)\psi(x) + f(x)\psi'(x)] = \\ &= -i\hbar f'(Q)\psi(x) + f(Q)(P\psi(x)). \end{aligned}$$

Қайта анықталмағандық принципіне оралайық.  $A$  бақыланатыны  $A$  операторымен байланысқан болсын. Оның  $\psi$  күйіндегі орташа мәнінің  $\bar{A}_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle$  өрнегін жазамыз. Енді оның дисперсиясын анықтайық:

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2 \equiv \langle \psi | (A - \bar{A}_\psi)^2 | \psi \rangle.$$

Екі  $A$  және  $B$  өзіне түйіндес операторлары коммутацияланбайтын болсын

$$[A, B] = AB - BA = i\hbar C, \quad (7.63)$$

мұндағы  $C$  – эрмиттік оператор. (7.63) теңдігінің екі жағының да орташа мәндерін анықтауға болатын әр күй үшін анықталмағандық қатынасын таба аламыз:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | C | \psi \rangle|. \quad (7.64)$$

Бұл 2.3.4-бөлімінде келтірілген дәлелдеменің қайталануы. Келесі операторларды анықтайық

$$\tilde{A} = A - \bar{A}_\psi; \quad ; \quad [\tilde{A}, \tilde{B}] = i\hbar C; \quad O = \tilde{A} + i\alpha \tilde{B}.$$

Бұл  $\langle O\psi | O\psi \rangle \geq 0$  оң болатынының салдары:

$$\begin{aligned} 0 \leq \langle O\psi | O\psi \rangle &= \langle \tilde{A}\psi | \tilde{A}\psi \rangle + \alpha^2 \langle \tilde{B}\psi | \tilde{B}\psi \rangle + i\alpha \langle \psi | (\tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A}) | \psi \rangle = \\ &= \langle \tilde{A}\psi | \tilde{A}\psi \rangle + \alpha^2 \langle \tilde{B}\psi | \tilde{B}\psi \rangle - \alpha \hbar \psi C | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Ендеше,  $\alpha$  бойынша квадраттық теңдеуінің дискриминанты теріс болуы шартынан, (7.64) теңдеуіне келеміз.

Дербес жағдайда, жоғарыда көрсетілгенді канондық коммутациялық қатынас үшін қолданып, Гейзенбергтің теңсіздігін аламыз

$$\Delta P \cdot \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2}.$$

## 7.7 Аралас күйлер мен тығыздық матрицасы

Физикалық күйлерді гильберттік кеңістіктегі күйлердің векторы (толқындық функция) арқылы сипаттау кванттық механикадағы ең жете сипаттау болып есептеледі.<sup>9</sup> Алайда көптеген жағдайларда (шындықты айтатын болсақ, іс жүзінде әрқашан) мұндай «толық» сипаттау не мүмкін емес, не қажет емес. Келесі жабық жүйенің

<sup>9</sup> Кванттық механиканың кейбір қол жетпейтін классикалық айнымалыларының белгісіз таралуына жататын ықтималдылық интерпретациясының идеясы «жасырынды айнымалылар теориясы» атты жалпы атауымен аталады. Эйнштейн кванттық механиканың толықсыздығын айтып, сондай баламалы теориялардың жақтасы болған. Ал ондай теориялардың кванттық механиканың мазмұнын толық жаңғыртуы мүмкін емес, демек эксперимент нәтижелерінің олардан айыра алмады (және расында қабылданбады). Бұл 1960 жылы Д.С.Беллдің серпінді еңбегінде көрсетілді. Осы сұрақтар 18- және 19-тарауларда талқыланады.

үлкен бөлігі болатын субжүйе жағдайын қарастырайық; субжүйенің айнымалыларымен ғана жұмыс жасай алатындықтан, жүйені толқындық функция арқылы сипаттауға үмітіміз де болмайды. Басқа жағдайлардың маңызды классы – ол еркіндік дәрежелері көп болатын жүйелер (макроскопиялық жүйелер, қатты дене, газ және т.б.). Мұндай жағдайларда толық толқындық функцияны білу мүмкін емес болады, мысалы  $1 \text{ см}^3$  көлемінде табылатын  $10^{23}$  молекулалардың: біз әртүрлі жолдармен анықталатын шамалардың орташа мәндерімен жұмыс жасауымыз қажет. Сол сияқты шашырау есептері көптеген жағдайларда не поляризацияланбаған, не бөлігі ғана поляризацияланған шоғырлармен байланысты. Оған қоса, шоғырдағы спиндік күйлерді де толық білмегендіктен, оны (шоғырды) толқындық функциямен сипаттау мүмкін емес.

Жоғарыда айтылған барлық жағдайларындағы күйлерді толқындық функциялармен өрнектейтін **таза күйлермен** сипаттау мүмкін болмайды, сондықтан олар **аралас күйлермен** байланысты. Аралас күйі жағдайында толқындық функцияның рөлін **тығыздық матрицасы** атқарады. Аралас күйдің өзіне тән ерекшелігі: ақпараттың толық еместігінің (немесе жоқтың қасы болуының) түрлі дәрежелі болуында.

Түсінікті болу үшін бірінші жағдайды қарастырайық:  $S$  субжүйесі  $\Sigma$  жабық жүйесінен үлкен болсын. Пайымдауымызға сәйкес бізде тек  $S$  субжүйесінің  $(\{x\})$  айнымалыларымен ғана жұмыс істеуге мүмкіндігіміз бар. Тіпті егер  $\Sigma$  жүйесінің  $\psi(q, x)$  толқындық функциясы бар болған күннің өзінде жалпы жағдайда оны көбейтінді түрінде жаза алмаймыз:

$$\Psi(q, x) \neq \psi_S(x) \psi_{\Sigma/S}(q),$$

яғни субжүйенің өзінің толқындық функциясы болмайды. Онда субжүйенің айнымалыларына әсер ететін  $\hat{f}_x$  операторының орташа мәнін қалай есептеп табуға болады?

Әрбір жүйе үшін таңдап алынған ортонормаланған базисті сәйкесінше  $S$ ,  $\Sigma/S$ ,  $|j\rangle$  және  $|\alpha\rangle$  деп белгілеп, жалпы күйді жазайық:

$$(7.65)$$

Осы күйдегі орташа мән тең болады:

$$\langle \Psi | \hat{f} | \Psi \rangle = \sum_{j,k} \sum_{\alpha} c_{k,\alpha} c_{j,\alpha}^* \langle j | \hat{f} | k \rangle = \text{Tr}(\mathbf{f}\rho),$$

мұндағы

$$\rho_{jk} \equiv \sum_{\alpha} c_{j,\alpha} c_{k,\alpha}^*, \quad \mathbf{f}_{jk} = \langle j | \hat{f} | k \rangle.$$

Енді  $\rho$ -тығыздық матрицасының келесі жалпы қасиеттерін жазайық:

$$\text{Tr} \rho = 1; \quad (7.66a)$$

$$\rho^\dagger = \rho; \quad (\text{Эрмиттілігі}) \quad (7.66\text{ә})$$

$$0 \leq \rho_{jj} \leq 1; \quad (7.66\text{б})$$

$$|\rho_{jk}|^2 \leq \rho_{jj} \rho_{kk}. \quad (7.66\text{в})$$

(7.66a)-(7.66б) теңдеулері шүбәсіз. Ал соңғысын тікелей көрсетуге болады:

$$\begin{aligned} & \rho_{jj} \rho_{kk} - \rho_{jk} \rho_{kj} = \\ & = \sum_{\alpha, \beta} \left[ c_{j,\alpha} c_{j,\alpha}^* c_{k,\beta} c_{k,\beta}^* - c_{j,\alpha} c_{k,\alpha}^* c_{k,\beta} c_{j,\beta}^* \right] \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left[ c_{j,\alpha} c_{k,\beta} - c_{k,\alpha} c_{j,\beta} \right] \left[ c_{j,\alpha} c_{k,\beta} - c_{k,\alpha} c_{j,\beta} \right]^* \geq 0. \end{aligned}$$

Таза күй жағдайында ( $\alpha$  бойынша қосындылау жоқ) толқындық функциясының

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j |j\rangle,$$

және тығыздық матрицасының

$$\rho_{jk} = c_j c_k^*$$

түрлері қарапайым болады. Таза күй тығыздығының матрицасы өзіне тән қасиетін қанағаттандырады

$$\rho^2 = \rho$$

мұны  $\sum_{\ell} c_{\ell}^* c_{\ell} = 1$  теңдігін пайдаланып дәлелдеу қиын емес.

Әлбетте, аралас күйдің тұжырымдамасы таза күйге қарағанда жалпырақ болатыны күмәнсіз. Таза күйді аралас күйдің ерекше түрі ретінде қабылдауға болады, ал барлық аралас күйлердің таза бола беруі міндетті емес.

Матрица тығыздығының қосымшалар формализмінің маңызды классы статистикалық физикаға қатысты. Еркіндік дәрежелерінің үлкен саны бізді (Больцманның) статистикалық өңдеуді қолдануға мәжбүрлейді. Мұндай жағдайларда тығыздық матрицасын  $\rho_{jk} = \omega_{jk}$  статистикалық матрица деп атайды. Енді  $W_n$  – энергиясы  $n$ -ші өзіндік күйдің микроскопиялық жүйелер (мысалы, атомның)

энергиясының  $n$ -ші өзіндік күйінің бірінде табылуының ықтималдығы болсын:

$$|\psi^{(n)}(t)\rangle = \sum_j a_j^n(t) |\psi_j\rangle,$$

мұндағы  $\{\psi_j\}$  – жалпы (қандай да оператордың өзіндік күйінің) ортонормаланған базисы. Мысалы, температурасы  $T$  болатын канондық ансамбльде энергияның таралуы Больцман формуласымен беріледі

$$W_n = e^{-E_n/kT} / \mathcal{N}, \quad \sum_n W_n = 1,$$

мұндағы  $\mathcal{N}$  – статистикалық қосынды:  $\mathcal{N} = \sum_n e^{-E_n/kT}$ . Алайда, төмендегі талқылау кез келген статистикалық ансамбльдің түрі үшін орынды.

Сондықтан  $\hat{f}$  операторының орташа мәні

$$\langle f \rangle = \sum_n W_n \langle \psi^{(n)} | f | \psi^{(n)} \rangle = \sum_n \sum_{j,k} W_n a_j^{(n)*} a_k^{(n)} f_{jk} = \text{Tr}(\rho \mathbf{f})$$

формуласымен беріледі, мұнда біз тығыздық матрицасын (немесе статистикалық матрицасын) енгіздік:

$$\rho_{jk} = \sum_n W_n a_k^{(n)*} a_j^{(n)}. \quad (7.67)$$

Назар аударыңыз: классикалық ықтималдылықтың  $W_n \geq 0$  оң болуының арқасында, мұнда анықталған тығыздық матрицасы да (7.66а)-(7.66г) негізгі қасиеттерін қанағаттандырады. Екі жағдайда да тығыздық матрицасы біздің жүйе туралы білмейтіндігіміздің дәрежесін көрсетеді.

Тығыздық матрицасының уақыт бойынша эволюциясын келесі фактіден, яғни  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  Шредингер теңдеуіне бағынатындығынан табамыз:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(i)}(t)\rangle = H |\psi^{(i)}(t)\rangle.$$

Бұдан

$$a_n^{(i)}(t) = \langle \psi_n | \psi^{(i)}(t) \rangle$$

болғандықтан, келесі теңдеуді аламыз

$$i\hbar \dot{a}_n^{(i)}(t) = \langle \psi_n | H | \psi^{(i)}(t) \rangle = \sum_k a_k^{(i)} H_{nk}.$$

Аналогиялық түрде

$$-i\hbar\dot{a}_n^{(i)*}(t) = \langle \psi^{(i)}(t) | H | \psi_m \rangle = \sum_k a_k^{(i)*} H_{km}.$$

Сондықтан,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{nm} &= \sum_i W_i \sum_k \left( a_m^{(i)*} H_{nk} a_k^{(i)} - a_k^{(i)*} H_{km} a_n^{(i)} \right) \\ &= \sum_k (H_{nk} \rho_{km} - \rho_{nk} H_{km}) = [\mathbf{H}, \rho]_{nm}. \end{aligned} \quad (7.68)$$

Осы теңдеу аралас күйі үшін Шредингер теңдеуін немесе таза күйі үшін Гейзенберг теңдеуін алмастырады.<sup>10</sup>

### 7.7.1 Фотон поляризациясы

Енді мысал ретінде фотонның поляризациясын қарастырып, тығыздық матрицасын қолдануды көрсетейік. 2.1.2-бөлімінде талдағанымыздай, фотонның күйі базалары  $|1\rangle$  және  $|2\rangle$  болатын екі деңгейлі (немесе *q-bit*) қарапайым жүйе ретінде өрнектеледі. Ал қалған энергия, импульс (толқын ұзындығы және таралу бағыты) төрізді атрибуттарын ескермеуге болады.  $|1\rangle$  және  $|2\rangle$  күйлерін сызықтық (немес ортогоналдық) поляризацияланған күйлері, сол сияқты екі тәуелсіз шеңберлік поляризацияланған күйлері және т.б. ретінде қабылдауға болады. Таза күй келесі толқындық функциясымен сипатталады:

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (7.69)$$

мұндағы

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \langle 1| = (1, 0); \quad \langle 2| = (0, 1), \quad (7.70)$$

ал  $c_1, c_2$  – кез келген комплекстік сандар, олар төмендегі теңдікті қанағаттандырады

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Екі базалық күйі ортонормаланған болып есептеледі:

$$\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1; \quad \langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0,$$

<sup>10</sup> (7.68) теңдеуі формальді Гейзенберг теңдеуін еске салады, бірақ екі теңдеудегі ерекше (алайда, жақсы таныс) таңбаларының айырмашылығын байқамыз.

1 және 2 поляризацияланған фотондарын өлшеуге сәйкес келетін операторлары келесідей әсер етеді

$$P_1|1\rangle=|1\rangle; \quad P_1|2\rangle=|0\rangle; \quad P_2|2\rangle=|2\rangle; \quad P_2|1\rangle=|0\rangle,$$

яғни

$$P_1=|1\rangle\langle 1|=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad P_2=|2\rangle\langle 2|=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.71)$$

сәйкесінше  $|1\rangle$  және  $|2\rangle$  күйлеріне проекциялайтын операторлар болып табылады. (7.69) таза күйі үшін оның тығыздық матрицасының түрі қарапайым болады:

$$\rho=\begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1c_2^* \\ c_1^*c_2 & |c_2|^2 \end{pmatrix}.$$

Ал бөлігі поляризацияланған немесе поляризацияланбаған жарық ағыны аралас күйімен сипатталады. Поляризацияланбаған сәулдегі фотон

$$\rho=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.72)$$

тығыздық матрицасымен сипатталады, ал шындығында 1 немесе 2 бағыттарындағы поляризацияның орташа мәндері сәйкесінше

$$\langle P_1 \rangle = \text{Tr}(P_1\rho) = \frac{1}{2}; \quad \langle P_2 \rangle = \text{Tr}(P_2\rho) = \frac{1}{2}. \quad (7.73)$$

Кез келген поляризациялық (7.72) күйдің орташа поляризациялық мәні  $1/2$  болатынын тексеру қиын емес.

Бөлігі поляризацияланған күйдің жалпы көрінісінің түрі

$$\rho=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\xi_3 & \xi_1-i\xi_2 \\ \xi_1+i\xi_2 & 1-\xi_3 \end{pmatrix}=\frac{1}{2}(\mathbf{1}+\sigma_i\xi_i),$$

мұндағы

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 \leq 1,$$

және мұндағы Паули матрицалары:

$$\sigma_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Үш  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  (нақты) санын Стокс параметрлері деп атайды. Бұдан

$$\rho^2 = \rho$$

болады, егер

$$\xi^2 \equiv \xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 = 1$$

орындалса және тек осы жағдайда жүйенің күйі таза болады. Демек,  $1 - \xi^2$  шамасын біздің поляризация күйі жөнінде білмеуіміздің мөлшері ретінде қабылдауымыз керек. Ал  $\xi_3$  саны 1 немесе 2 бағыттарындағы поляризациялану дәрежесін сипаттайды, мысалы

$$\langle P_1 \rangle = \text{Tr} (P_1 \rho) = \frac{1 + \xi_3}{2} = \begin{cases} 1, & \text{егер } \xi_3 = 1, \\ 0, & \text{егер } \xi_3 = -1. \end{cases}$$

Аналогиялы  $\xi_1$  саны 1 немесе 2 бағыттарымен  $\pm \frac{\pi}{4}$  бұрышын құратын  $n$ -нің бағытындағы сызықтық поляризациясының өлшемі болып табылады. Оны дәлелдеу үшін келесі проекциялық операторларды құрастырайық:

$$P'_1 = |1'\rangle\langle 1'|, \quad P'_2 = |2'\rangle\langle 2'|, \quad |1'\rangle = \frac{|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |2'\rangle = \frac{|1\rangle - |2\rangle}{\sqrt{2}},$$

одан соң  $\langle P'_1 \rangle$  және т.б. есептеп табуға болады. Қорыта келе,  $\xi_2$  шеңберлік поляризацияны өлшеуіне сәйкес келетінін байқаймыз:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i|2\rangle); \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|2\rangle).$$

## 7.8 Жалпыланған координаталардағы кванттау

(2.29)-(2.30) теңдеулерінде енгізілген гамильтонианды кванттау ережесі

$$\hat{H}(\{\hat{q}_i\}, \{\hat{p}_i\}; t) = H_{\text{класс}}(\{q_i\}, \{p_i\}; t) \Big|_{q_i \rightarrow \hat{q}_i; p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}} \quad (7.74)$$

қарапайым болып көрінгенмен, кішігірім ойланған соң ол тривиалдылықтан әлдеқайда алыс екенін байқаймыз. Енді осы аталған мәселені қосып, олардың бірнешеуін талқылайық.

Физикалық өртүрлі проблемаларды шатастырып алмас үшін, келесі екі сұрақтың басын ашып алайық:

- (i) жүйелердің «қарапайым» класын кванттау, яғни түзу сызықты кеңістікте кинетикалық мүшесі декарттық координаталарында стандартты квадраттық

$$\sum_i \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{p_{i,\alpha}^2}{2m_i}$$

түрінде және  $V$  потенциалы тек  $\{q_{i,\alpha}\}$  тәуелді болады.

- (ii) түрі жалпы болатын физикалық жүйелерді кванттау, яғни қисықсызықты кеңістікте немесе топологиялық тривиалдық емес кеңістіктегі бөлшектердің қозғалысын. Мысалы, периодтары тривиалдық емес (дефектілер) немесе импульсіне тәуелді потенциалындағы қозғалатын бөлшек (әсерлесулері минималды болатын  $A_i$  сыртқы электромагниттік өрісінде қозғалатын зарядталған бөлшек).

Алдымен жүйелердің бірінші класын қарастырайық. Кванттау процедурасы (7.74) қисықсызықты координаталарында орындалады ма? Кез келген жалпыланған координаталарды қарастырамыз,

$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial q_i}$  канондық түйіндес импульсті құрастыруға болады, одан соң

$$p_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \quad (7.75)$$

$(q_i, p_i)$  координаталарындағы өрнектелген гамильтонианға апарып қоямыз. Демек, осы рәсім кванттық гамильтониандық операторға әкеледі, ал ол декарттық координаталардағыдан өзгеше болады. Мысалы,  $q_i = (r, \theta, \phi)$  сфералық координаталар жүйесінде кинетикалық мүше келесі түрде беріледі

$$L = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2),$$

ал канондық импульстер

$$p_r = m\dot{r}; \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta};$$

Гамильтонианның кинетикалық мүшесінің түрі

$$H_{кин} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2 \sin^2 \theta}.$$

Енді (7.75) алмастыру ережесінен жаңа операторды аламыз

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right).$$

Бұдан осы рәсімнен соң кейбір мүшелерінің жетіспейтінін көреміз

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right),$$

әдетте, бұлар сфералық координаталарда жазылған стандарттық кванттық гамильтонианда бар ((4.1) және (4.2) теңдеулерін қараңыз).

Аналогиялық түрде, жазықтықта қозғалатын еркін бөлшек үшін

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2)$$

полярылық координаталардағы түрі

$$H = \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\phi^2 \right).$$

Төмендегі алмастыруларды енгізген соң

$$p_r \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}, \quad p_\phi \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

табылатын екінші гамильтонианда декарттық координаталарындағы стандарттық гамильтонианынан өзгеше, яғни артық келесі мүшені [Messiah 2000] көреміз

$$-\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{\partial}{\partial r}.$$

Шындығында, егер жалпыланған қисықсызықтық координаталарда (7.74) рәсімі аяғына дейін анықталмағанын ескеретін болсақ, онда мәселе әлдеқайда күрделірек болатынын түсінеміз. Мұны «операторды анықтау мәселесі» деп атайды. Расында, егер  $g_{ij}$  метрикалық тензоры болса, онда лагранжиандағы кинетикалық мүшенің түрі  $L_{(кин)} = (m/2) g_{ij}(q) \dot{q}^i \dot{q}^j$  болады. Енді  $g^{ij}$  тензорын  $g_{ij}$  метрикалық тензорына кері деп анықтайық және  $g \equiv \det g = \det g_{ij}$  болсын. Классикалықтан кванттық механикаға ауысуы кезінде кинетикалық мүшені төмендегідей жазудың

$$\frac{1}{2m} g^{ij}(q) p_i p_j, \quad \frac{1}{2m} p_i g^{ij}(q) p_j, \quad \frac{1}{2m} \sqrt{g} p_j (\sqrt{g} g^{jk}(q) p_k)$$

фатальдік еркіндігі бар. Бұл кванттық гамильтонианның жалғыздығын жоққа шығарғандай болады. Назар аударыңыз: эрмиттілікті талап ету көпмәнділікті жоя алмайды.

Бірінші түрдегі (i) жүйелерде мүлдем ешқандай екі мағыналық жоқ. Жалғыз кванттық оператор классикалық гамильтонианға сәйкес келеді. *Декарттық координаталарда* жұмыс жасайтын дұрыс кванттық гамильтониан (7.74) ережесімен анықталатыны – эмпирикалық заң.<sup>11</sup> Ал (7.75) алмастыру ережесі декарттық координаталарда жазылған классикалық гамильтониан үшін және аналогиялы бір бөлшектен артық жүйелер үшін де орынды. Декарттық координаталар пайдаланылатын кезде, нәтиже нақтылы таңдалған координаталар жүйесіне тәуелді емес.

Әрине, кванттық гамильтониан дұрыс теңдестірілген соң, кез келген басқа координаттар жүйесінде *айнымалыларды қарапайым алмастыру* әдісін пайдалануға болады дегенді жоққа шығармайды. Ақыр аяғында кванттау ережесі осы бөлімнің соңындағы осы ұйғарымға қайтып әкеледі. ([Brillouin (1938)], [Kemble (1937)] кітаптарын қараңыз.)

Жалпы түрдегі жүйелер үшін (ii) өте ерекше жағдай. Минималдық әсерлесуді қолданып: зарядталған бөлшектердің электромагниттік потенциалымен әсерлесуін өрнектеу үшін

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m\dot{q}_i + \frac{e}{c} A_i(q), \quad p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$$

рәсімін қолданамыз. Ол (декарттық координаталарында) дұрыс нәтиже береді: [(14.8) және (14.12) теңдеулерін қараңыз].

Жалпы, кванттық гамильтонианның бірімәнді етіп анықтау үшін кванттық гамильтонианныңөзіне түйіндес болуы (қажеттілік болғанымен) жеткілікті емес. Шеңбер бойымен (немесе периодтық тор бойынша қозғалатын бөлшек) қозғалатын бөлшек үшін жағдайында жеке кванттық жүйелердің шексіз саны ретінде анықтауға болады.

Маңызды моментті есте сақталық: кейбір физикалық параметрлердің жүйелері әрбір кванттық жүйелердің сипаттамаушысы болып табылатындықтан, кейде математикалық сауыттың арқасында оларды қарастырмай қалу қатері де табылады. Осы параметрлердің физикалық маңыздылығы көбінесе түсінікті, яғни кванттық жүйелерді сипаттау әдісі есте қаларлықтай болғанымен, ал классикалық тұрғыдан жат болады. Мысалы,

<sup>11</sup> Мінекей, осылайша нақтылы координаталардың жиыны – негізгі кванттық заңының айрықша артықшылығына басым болады. Мұның терең мағынасы, егер ол бар болса, әзірге белгісіз.

шеңбер бойымен қозғалатын бөлшекті сипаттайтын  $\theta$  параметрі (3.2.2-бөлімі) қоршап тұрған аудан арқылы өтетін магниттік ағынмен (физикалық мысалы – тороидальдық асқынөткізгіштік) немесе тордың импульсімен, яғни периодтық потенциалда қозғалатын бөлшек жағдайымен (3.6.1-бөлімін қараңыз) байланысқан болуы мүмкін.

Жалпы қисайған кеңістікте қозғалатын бөлшек үшін классикалық гамильтониан

$$H = \frac{1}{2m} g^{ij}(q) p_i p_j$$

кванттық гамильтонианға сәйкес келеді [DeWitt (1957)]

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} g^{-1/4} \hat{p}_i g^{1/2} g^{ij} \hat{p}_j g^{-1/4} + C \hbar^2 R,$$

$$g^{1/4} \hat{p}_j g^{-1/4} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^j},$$

мұндағы реті  $\hbar^2$  болатын және кеңістіктің скалярлық  $R$  қисықтығына пропорционалды коэффициенттерінің алдында тұрған көбейткіш –  $C$  тұрақтысы анықталмаған болып қала береді. Екінші жағынан, классикалық жүйе ( $\hbar=0$  болғандықтан, демек  $C$  мағынасы жоқ) үшін *априори* бір нақтылы мәннің немесе басқа  $C$ -ның артықшылығы бола алмайды. Бұл негізсіздікті ДеВиттің анықталмағандығы деп атайды. Мұны сәйкес келмеушілік немесе нағыз анықталмағандық демей, атауына қарамастан, осы тектес (эксперименттен анықталуы керек) кванттық жүйені сипаттайтын физикалық параметрдің табылуының белгісі ретінде қарастыру қажет.

Енді бірінші тектес жүйеге, түзусызықты  $R=0$  кеңістіктегі бөлшектердің қозғалысына қайта оралайық. Жоғарыда айтылғандардан жалпы қисықсызықты координаталар жүйесіндегі кванттау процедурасы төмендегідей

$$H \rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2m} g^{-1/4} \hat{p}_i g^{ij} \hat{p}_j g^{-1/4} + V(q), \quad (7.76)$$

$$\hat{p}_i = g^{-1/4} \cdot \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial q^i} \right) \cdot g^{1/4} \quad (7.77)$$

болатыны шығады. (7.77) ережесін коварианттық көбейтінді ретінде қайта жазуға болады. Осы рәсімнің дұрыстығына (7.76) және (7.77) теңдеулерінен шығатын дифференциалдық операторының Лаплас-

Бельтрами операторы екендігінің кепілі болады:

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^i} \left( \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j} \right),$$

бұл жалпыланған координаталардың түрленуіне қатысты *инвариантты* және декарттық координаталарында (7.74) эмпирикалық дұрыс ұйғарымына әкеледі. Демек, жалпыланған координаталарда  $p_i \rightarrow \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$  ауыстыруы да,  $[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$

канондық коммутациялау ережелері де жарамсыз. Оларды (7.77) теңдеуімен және содан шығатын коммутациялық қатынастармен алмастыру қажет.

### Тереңдетіп оқу үшін

Теорияның математикалық аспектілері қызықтыратын оқырман [von Neumann (1932)] кітабын оқуына болады. Стоун және фон Нейман теоремаларының дәлелдемесін [Reed and Simon (1980a)] кітабы 1-томының 8-тарауынан таба алады. Өзіне түйіндес кеңеюлерге педагогикалық кіріспесін [Bonneau, Faraut, and Valent (2001)] кітабынан табасыздар.

### Қосымшаларға нұсқаулық

Кванттық механиканың негізгі постулаттарының бірінде: әрбір физикалық күй гильберттік кеңістіктегі сәулеленуге сәйкес келетіні айтылған (P1) (7.1-бөлімді қараңыз). Оның «гильберттік кеңістігіндегі әрбір вектор физикалық күйді сипаттайды» деген кері бекінім бар ма және ол шындықпен жанасады ма? Сұрақ суперпозиция принципіне мұқият көңіл бөледі: екі  $|\alpha\rangle$ ,  $|\beta\rangle$  физикалық күйлері берілсін, онда  $|\alpha\rangle$  және  $|\beta\rangle$  таңдауына тәуелсіз  $|\alpha\rangle + |\beta\rangle$  күйі физикалық бола ма? 20.14-қосымшасы осы нәзік сұрақты талқылауға арналған. Қорытындысы болып, шындығында суперпозиция принципі кейде орындала бермейтіндігі шығады. Кеңінен танымал мысал электр зарядының дәл сақталуымен байланысқан. Суперпозиция тек электр зарядтары бірдей күйлер үшін рұқсат етіледі. Аналогиялық шектеу фермиондық сан үшін де орынды. Фермиондық сандары әртүрлі күйлердің суперпозициясы

физикалық болмайды. Осы шектеулерді *супертаңдау ережелері* деп атайды.

Екінші қосымшада фон Нейман теоремасының кейбір детальдары берілген. Теорема Гейзенбергтің коммутациялық қатынастары үшін Шредингер теңдеуінің жалғыздығын қамтамасыз етеді. Кванттық механикадағы канондық түрлендірулердің өзектілігі және операторлардың өзіне түйіндес кеңеюінің мәселелері қысқаша атап өтілген.

---

## Есептер

- (7.1) Еркін бөлшек және сыртқы біртекті өрістегі бөлшек үшін Гейзенбергтің қозғалыс теңдеулерін шешіңіздер.
- (7.2) Сыртқы біртекті тұрақты өрісіндегі гармоникалық осциллятор үшін Гейзенбергтің қозғалыс теңдеуін шешіңіздер. Біртекті уақытқа тәуелді  $F(t)$  үшін жалпы шешімін жазыңыздар.
- (7.3) Толқындық  $\psi_S(x)$  функциясымен сипатталатын жүйе  $t=0$  моментінде  $f$  операторының  $f_0$  өзіндік мәніне сәйкес келетін өзіндік күйі болсын деп ұйғарайық. Уақыттың  $t$  моментіндегі толқындық функция  $\hat{f}_H(-t)$  Гейзенберг операторының сол өзіндік мәніне сәйкес келетін өзіндік күйі болатынын көрсетіңіздер. (Осы техника бірнеше қарапайым модельдеріндегі Грин функциясын есептеу үшін қолданылған [Kogan and Galitsky (1963)].)

# Траекториялар бойынша интегралдар

## 8

### 8.1 Грин функциясы

### 8.2 Траекториялар бойынша интегралдар

Тараудың қорытындысы

Тереңдетіп оқу үшін

Сандық талдау

1948 жылы Р.Ф.Фейнман кванттық механиканың әсем баламалы формализмін ұсынды. Осы формализмнің (траекториялар бойынша интегралдар, функционалдық интегралдар және т.б. атауларымен танымал) маңыздылығы – бұл кванттық флуктуацияларды көрнекті сипаттайтын тәсілдеме. Сонымен қатар ол бізге ұйтқыған (Фейнман диаграммалары) және ұйтқымайтын (мысалы, туннельдік эффект, инстантондар) эффектiлерiн есептеу үшін қажарлы құралды береді.

### 8.1 Грин функциясы

Кванттық механикадағы маңызды түсініктердің бірі: екі тізбектік оқиғалардың амплитудасы (ықтималдылығы), дербес жағдайда бөлшектің  $t$  уақыт моментінің  $x$  нүктесінде табылуының амплитудасы (ықтималдылығы) болып табылады. Осы амплитуданы *Грин функциясы* деп атайды және аталған функцияның траекториялар бойынша интегралымен байланысы қарастырып отырған тарауда көрсетіледі. Сондықтан траекториялар бойынша интегралдауды талқылаудың алдында Грин функциясының бірнеше элементарлық аспектілерін қарастырайық. Гамильтониан уақыттан тәуелсіз жағдайы үшін Грин функциясының түрі төмендегідей болады:

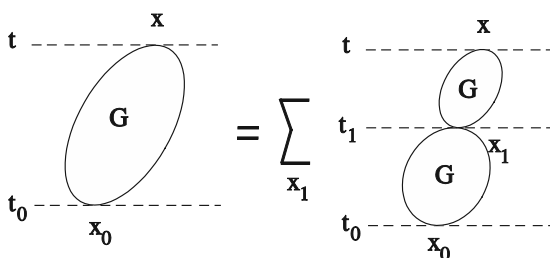
$$G(x, x_0; t, t_0) = \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle. \quad (8.1)$$

Басқа сөзбен айтқанда, Грин функциясы  $x$ -көрінісіндегі уақыт бойынша эволюциясының операторы болады.

Анықтаманың өзінен Грин функциясы іргелі қасиетке, яғни ықшамдалу қасиетіне ие болатыны бірден көрінеді:

$$G(x, x_0; t, t_0) = \int dx_1 G(x, x_1; t, t_1) G(x_1, x_0; t_1, t_0) \quad (8.2)$$

мұндағы  $x_1$  – бөлшектің кез келген бекітілген  $t_1$  уақыт аралығындағы координатасы (8.1-сурет). Екі тізбектік оқиғалардың амплитудасын  $G$  функциясы өрнектейтін болғандықтан,  $(x_0, t_0) \rightarrow (x_1, t_1)$  ықтималдылығы  $G(x, x_0, t, t_0)$ -дің квадраты болады. (8.2) теңдеуінен көретініміз: ол барлық мүмкін болатын  $x_1$  аралықтық координаталардың  $x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x$  әртүрлі «жолдарының» үлесіне негізделіп, әртүрлі интерференциялық мүшелерді қамтиды.



8.1-сурет

Грин функциясының түсінігі толқындық функциямен тығыз байланысқан.  $G$  функциясын ерекше бастапқы шарттары орнатылған толқындық функциясы ретінде интерпретациялауға болады: бөлшек бастапқы уақыт моментінде  $x_0$  нүктесінде орналассын, яғни оның өзіндік күйі  $\psi(x, t_0) = \delta(x - x_0)$  функциясымен өрнектеледі. Расында,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G(x, x_0; t, t_0) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle = \langle x | H e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle = \\ &= H_{\text{шред}} \langle x | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | x_0 \rangle = H_{\text{шред}} G(x, x_0; t, t_0) \end{aligned}$$

бөлшектің  $t$  уақыт моментіндегі  $(x, x + dx)$  интервалында табылуының ықтималдылығы  $|G(x, x_0; t, t_0)|^2 dx$ -ке тең болады.

Ыңғайлы болуы үшін біз Грин функциясының қасиеттерін бірөлшемді жүйелер үшін қысқаша қарастырайық. Анықтамасына сәйкес Грин функциясы қарастырылып отырған жүйенің уақыттық эволюциясының жалпы мәселелерін шешеді, яғни Шредингер теңдеуінің кез келген бастапқы шарты

$$\psi(x, t) \Big|_{t=t_0} = \psi_0(x, t_0)$$

үшін Грин функциясының тұрғысынан<sup>1</sup> шешімі:

$$\psi(x, t) = \int dx' G(x, x'; t, t_0) \psi_0(x', t_0) \quad (8.3)$$

болып табылады.

Энергияның өзіндік мәндерінің жиыны арқылы толықтық қатынасын жазып,

$$\mathbb{1} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

(8.1) теңдеуіне апарып қоятын болсақ, онда Грин функциясының жаңа өрнегін аламыз:

$$G(x; x_0; t, t_0) = \sum_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \psi_n(x) \psi_n^*(x_0). \quad (8.4)$$

Грин функциясының айқын түрін кейбір қарапайым жағдайлар үшін жаза аламыз. Мысалы, еркін бөлшек үшін:

$$E_n \rightarrow \frac{p^2}{2m}; \quad \psi_n(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}; \quad \sum_n \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dp.$$

(8.4) өрнегінде көрсетілген алмастыруларын жасап, табамыз:<sup>2,3</sup>

$$\begin{aligned} G(x, x_0; t, t_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-ip^2(t-t_0)/2m\hbar} e^{ip(x-x_0)/\hbar} = \\ &= e^{im(x-x_0)^2/2\hbar(t-t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar} \left(p - \frac{m(x-x_0)}{t-t_0}\right)^2\right] = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m\hbar}{i(t-t_0)}} e^{im(x-x_0)^2/2\hbar(t-t_0)} \left(\int_C d\xi e^{-\xi^2}\right), \end{aligned} \quad (8.5)$$

<sup>1</sup> **Жаттығу.** (8.3) өрнегі Шредингер теңдеуі мен бастапқы шарттарды расында қанағаттандыратынын көрсетіңіздер.

<sup>2</sup> **Есеп.** Коши теоремасын пайдаланып, (8.5) интегралындағы соңғы көбейткішін нақты ось бойынша қарапайым гаустік интегралына әкелуге болатынын көрсетіңіздер

<sup>3</sup> **Есеп.** Егер бөлшек  $t_0$  моментінде  $\psi_0(x, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} e^{-x^2/4a^2}$  толқындық пакетімен өрнектелген болса, онда оның  $t > t_0$  моментіндегі толқындық функциясын жазыңыз.

мұндағы  $C - \xi$  бойынша  $(1+i)\alpha$  түзуінің бойымен интегралдау контуры,  $\alpha = -\infty \rightarrow \infty$ . Интегралымыз  $\sqrt{\pi}$ -ге тең. Сонымен, нәтижесінде аламыз:

$$G(x, x_0; t, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2i\hbar\pi(t-t_0)}} e^{im(x-x_0)^2/2\hbar(t-t_0)}. \quad (8.6)$$

### Гармоникалық осциллятор

Грин функциясының айқын түрін жазуға болатын жүйелердің бірі – ол гармоникалық осциллятор болып табылады:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 Q^2.$$

Бұны траекториялар бойынша интегралдау әдісінде дәл есептеп табуға болады. 7-тарауда есеп ретінде ұсынылған теореманы пайдаланып, сол нәтижені қайта аламыз. Сонымен, Грин функциясы  $G(q, q_0; t, 0) = \langle q | e^{-iHt/\hbar} | q_0 \rangle$  шекаралық шарттары нақтыланған  $\psi(q, t)$  толқындық функциясына тең болады:

$$\psi(q, 0) = \delta(q - q_0), \quad \therefore Q\psi(q, 0) = q_0\psi(q, 0). \quad (8.7)$$

Жоғарыда аталған теоремаға сәйкес,  $\psi(q, t)$  келесі шартты қанағаттандырады:

$$Q(-t)\psi(q, t) = \left( Q \cos \omega t - \frac{P}{m\omega} \sin \omega t \right) \psi(q, t) = q_0\psi(q, t),$$

мұндағы  $Q(t)$  – уақыттың  $t$  моментіндегі Гейзенбергтің координаталар операторы;  $Q = Q(0)$ ,  $P = P(0)$  – қарапайым Шредингер операторлары, сол сияқты  $Q(t)$  үшін Гейзенберг теңдеуінің белгілі шешімдері пайдаланылды. Осылайша,

$$\frac{i\hbar}{m\omega} \sin \omega t \frac{\partial}{\partial q} \psi(q, t) = (-q \cos \omega t + q_0) \psi(q, t).$$

Осы дифференциалдық теңдеуінің шешімі келесідей болады:

$$\psi(q, t) = \exp \left[ \frac{im\omega(q \cos \omega t - q_0)^2}{\hbar \sin 2\omega t} + c(t) \right],$$

мұндағы  $c(t)$  – айнымалы  $q$ -ға тәуелсіз интегралдау тұрақтысы. Оны анықтау үшін келесі шартты орнатайық:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi(q, t) = 0,$$

сонда  $\dot{c}(t)$  үшін дифференциалдық теңдеуін аламыз:

$$\dot{c}(t) = -\frac{\omega}{2} \operatorname{ctg} \omega t - \frac{im\omega^2}{2\hbar} \frac{q_0^2}{\cos^2 \omega t}.$$

Мұны интегралдап, келесі теңдікті аламыз:

$$c(t) = -\frac{1}{2} \log(\sin \omega t) - \frac{im\omega}{2\hbar} q_0^2 \operatorname{tg} \omega t + \operatorname{const.},$$

бұдан, константаның  $t$ -ға да,  $q$ -ға да тәуелсіз болатынын көреміз. Көбейткіштер мен бекітілген тұрақтыларды (8.7) шекаралық шарттарымен біріктіріп, табамыз:

$$\begin{aligned} G^{ro}(q, q_0; t, t_0) &= \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t-t_0)}} \exp \left[ \frac{im\omega (q^2 + q_0^2) \cos \omega(t-t_0) - 2q_0 q}{\hbar 2 \sin \omega(t-t_0)} \right]. \end{aligned} \quad (8.8)$$

## 8.2 Траекториялар бойынша интегралдар

Траекториялар бойынша интегралдарындағы Грин функциясы:

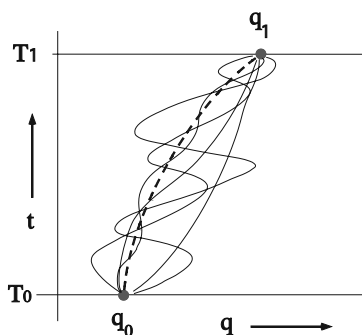
$$\left\langle q_1 \left| e^{-iH(T_1 - T_0)/\hbar} \right| q_0 \right\rangle$$

төмендегі өрнекпен анықталады:

$$\int_{q(T_0)=q_0}^{q(T_1)=q_1} [\mathcal{D}q] e^{\frac{i}{\hbar} S}, \quad S = \int_{T_0}^{T_1} dt L(q, \dot{q}), \quad (8.9)$$

мұндағы  $L(q, \dot{q})$  – лагранжиан ( $S$  – классикалық әсер).<sup>4</sup> Ал  $\int [Dq]$  символы келесі түрде анықталады (шындығында оның мағынасы жеткілікті түсінікті): әрқайсысының салмағы (үлесі)  $e^{iS/\hbar}$ -ке тең бастапқы  $q(T_0) = q_0$  және ақтық  $q(T_1) = q_1$  нүктелерін қосатын мүмкін болатын траекториялар бойынша қосындылауды білдіреді. Мұндағы  $S$  – әрбір траекторияға сәйкес келетін классикалық әсер (8.2-суретті қараңыз). Егжей-тегжейіне тоқталмай-ақ, оның бірнеше өзіне тән ерекшеліктерін атап өтейік:

- Классикалық механикадағы лагранждық формализмінің минималдық әсер принципімен енгізілген «виртуалдық жолдар» мұнда нақты траекторияларға айналады: кванттық механикадағы барлық траекториялар – олар расында классикалық қозғалыс теңдеулерін қанағаттандырады ма, жоқ па – әрқайсысы салмағы  $e^{iS/\hbar}$  болатын үлес қосады. Шындығында, электронның қос тесіктен бірмезгілде «өтуі» қисынсыз болғанымен (1-тарауды қараңыз), мұнда ол табиғи жолымен түсіндіріледі.
- Өртүрлі жолдардың қосындысы толық амплитуданы береді; ал өртүрлі жолдардың үлестері осы оқиғаның ықтималдылығына тривиалдық емес интерференцияланады. Бұл, әрине, кванттық механиканың белгілі өзіне тән аспектілері.
- $\hbar \rightarrow 0$  шегінде тек  $\delta S = 0$  болатын стационарлық жолдар ғана үлес қосады, ал стационарлық емес жолдардың үлестері фазалардың жылдам тербелуінің есебінен жойылып кетеді. Осылайша, қажеттілікке қарай  $\hbar \rightarrow 0$  шегінде классикалық механиканың минималдық принципіне ораламыз.



8.2-сурет

<sup>4</sup> Парижде өткен ТН 2002 конференциясының қорытынды талдауында К.Н.Янг 20-ғасырдағы теориялық физиканы үш «әуенмен» сипаттады: «Симметрия, кванттау және фазалық көбейткіш»

### 8.2.1 Туындылау

(8.9) өрнегін қорытып шығару үшін  $[T_1, T_0]$  уақыт интервалын кіші сегменттер жиынына бөлуден бастайық:

$$t_N = T_1 > t_{N-1} > t_{N-2} > \dots > t_2 > t_1 > t_0 = T_0,$$

$$t_i - t_{i-1} = \epsilon, \quad N_\epsilon = T_1 - T_0.$$

Эволюция операторын көбейтінділер ретінде өрнектеуге болады:

$$e^{-iH(T_1-T_0)/\hbar} = e^{-iH\epsilon/\hbar} e^{-iH\epsilon/\hbar} \dots e^{-iH\epsilon/\hbar}.$$

Толықтық қатынасын

$$\sum_{q_i} |q_i\rangle \langle q_i| = 1$$

уақыттың әрбір интервалына қойып, келесі теңдікті аламыз:

$$G(q, q_0; T_1, T_0) = \int \prod_i dq_i \prod_i G_{i+1,i}(q_{i+1}, q_i; t_{i+1}, t_i),$$

мұндағы

$$G_{i+1,i} = \langle q_{i+1} | e^{-iH\epsilon/\hbar} | q_i \rangle \approx \langle q_{i+1} | 1 - iH\epsilon/\hbar + \dots | q_i \rangle.$$

$H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$  гамильтонианы үшін төмендегі өрнекті аламыз:

$$\begin{aligned} \langle q_{i+1} | H | q_i \rangle &= \langle q_{i+1} | \left( \frac{p^2}{2m} + V(q) \right) | q_i \rangle = \int dp \langle q_{i+1} | p \rangle \langle p | \left( \frac{p^2}{2m} + V(q) \right) | q_i \rangle = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip(q_{i+1}-q_i)/\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} + V(q_i) \right) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip\Delta q/\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} + V(q_i) \right). \end{aligned}$$

Осылайша,

$$G_{i+1,i} \approx \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip\Delta q/\hbar} \left( 1 - i \frac{H(p, q_i)\epsilon}{\hbar} + \dots \right) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip\Delta q/\hbar} \left( \frac{p^2}{2m} + V(q_i) \right).$$

Барлық көбейткіштерді жинап,<sup>5</sup>

<sup>5</sup> Фейнманға ой салған Дирак болатын, ол бірнеше ескертулер жасады. Расында, траекториялар жөніндегі негізгі идеяларды Дирақтың сырлы кітабының §32-параграфынан табуға болады.

$$G(q, q_0; T_1, T_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod \frac{dq_i dq_i}{2\pi\hbar} e^{i \sum_i \left[ \frac{p_i(q_{i+1} - q_i)}{\hbar} - H(p_i, q_i) \right]}$$

теңдеуін табамыз.

Енді  $p_i$  бойынша интегралдаған соң,

$$\begin{aligned} G_{i+1,i} &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{ip\Delta q/\hbar - icp^2/2m\hbar - ieV(q_i)/\hbar} = \\ &= \text{const} \cdot e^{iem(\Delta q/e)^2/2 - ieV(q_i)/\hbar} = e^{ieL(q_i, \dot{q}_i)/\hbar}, \end{aligned}$$

лагранжианды келесі түрде жаза аламыз:

$$L(q_i, \dot{q}_i) = \frac{m}{2} \left( \frac{\Delta q}{\epsilon} \right)^2 - V(q_i) \approx \frac{m(\dot{q})^2}{2} - V(q_i).$$

Солайша,

$$G(q, q_0; T_1, T_0) = \lim_{N \rightarrow \infty; \epsilon \rightarrow 0} \int \prod dq_i e^{i \sum_i \epsilon L(q_i, \dot{q}_i)/\hbar} \equiv \int [Dq] e^{iS/\hbar}.$$

**Ескерту.** Математикалық қаталдықтың талабын жоғары ұстайтын оқырман үшін барлық жерде  $\approx$  символын және бейқам алынған шексіз өлшемді интегралдарды көріп, таңғалуы мүмкін. Шындығында, қорытындысын қатаң жасауға болады. Бірінші кезекте евклидтік уақыттың, яғни  $t = -it_E$  жалғасын қарастырайық; онда барлық интегралдар гаустік түрде болады:

$$iS \rightarrow -S_E = \int dt_E \left[ \left( \frac{dq(t_E)}{dt_E} \right)^2 + V(q(t_E)) \right].$$

Шексіз көбейтіндіге қатысты: кез келген өзіне түйіндес  $T$ ,  $V$  операторлары үшін (7.3.1-бөлімін қараңыз) шектің жинақтылығын (Троттер формуласы)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left( e^{-(T+V)/N} \right)^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( e^{-T/N} e^{-V/N} \right)^N$$

дәлелдеуге болады.

Траекториялар бойынша интегралдың ықшамдалу қасиеті ( $T_1 > t > T_0$  кез келген бекітілген  $t$  үшін әділетті):

$$\int_{q(T_0)=q_0}^{q(T_1)=q_1} [Dq] e^{\frac{i}{\hbar} S} = \int dq \left[ \int_{q(t)=q}^{q(T_1)=q_1} [Dq] e^{\frac{i}{\hbar} S} \right] \left[ \int_{q(T_0)=q_0}^{q(t)=q} [Dq] e^{\frac{i}{\hbar} S} \right]$$

траекториялар бойынша интегралдың тікелей өзінің анықтамасынан шығады. Кванттық механиканың жалпы принциптеріне сәйкес бөлшектің ( $t=T_0$ ) моментінде  $q_0$  нүктесінен уақыттың  $t = T_1$  моментінде  $q_1$  нүктесіне өтуінің амплитудасы: алдымен бастапқы  $q_0$  нүктесінен  $q$  нүктесіне дейін, содан соң  $q$  нүктесінен  $q_1$  нүктесіне дейін (аралықтық  $q$  координатасы бойынша қосындыланған) бөлшек амплитудаларының тізбектік қосындысына тең болады.

Жоғарыда көрсетілгендей, амплитуданы екі Гейзенберг күйлерінің арасындағы матрицалық элементі түрінде де жазуға болады:

$$G(q_1, q_0; T_1, T_0) = {}_r \langle q_1, T_1 | q_0, T_0 \rangle_r,$$

мұндағы  $|q_1, t\rangle_r = e^{iHt/\hbar} |q_1\rangle$  – Гейзенберг операторының өзіндік күйі.<sup>6</sup>

$H$  индексі жоқ күйлер – Шредингердің стандарттық  $Q$  координаталар операторының өзіндік күйлерін білдіреді. Енді матрицалық элементті қарастырайық:

$$\begin{aligned} {}_r \langle q_1, T_1 | Q_r(t) | q_0, T_0 \rangle_r &= \langle q_1 | e^{-iH(T_1-t)/\hbar} Q e^{-iH(t-T_0)/\hbar} | q_0 \rangle = \\ &= \int dq \langle q_1 | e^{-iH(T_1-t)/\hbar} | q \rangle q \langle q | e^{-iH(t-T_0)/\hbar} | q_0 \rangle. \end{aligned}$$

Оны жоғарыда көрсетілгендей  $[T_1, t]$  және  $[t, T_0]$  уақыт интервалдарының арасында есептейік. Одан келесі өрнекті аламыз:

$${}_r \langle q_1, T_1 | Q_r(t) | q_0, T_0 \rangle_r = \int [Dq] q(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{T_0}^{T_1} L dt};$$

аналогиялы  $t_1 > t_2$  үшін табамыз:

$${}_r \langle q_1, T_1 | Q_r(t_1) Q_r(t_2) | q_0, T_0 \rangle_r = \int [Dq] q(t_1) q(t_2) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{T_0}^{T_1} L dt}$$

және т.с.с. Сонымен, тамаша нәтиже аламыз:

$$\int [Dq] q(t_1) q(t_2) \dots q(t_n) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{T_0}^{T_1} L dt} =$$

<sup>6</sup> Осы момент шатастыруы мүмкін. Оқырманның есіне сала кетейік:  $|q_1, t\rangle_r$  күйі уақыттың  $t$  моментіндегі Шредингердің  $e^{iHt/\hbar} |q_1\rangle$  күйі емес. Соңғысы, әрине, кез келген координата операторының өзіндік күйі болмайды. Керісінше,  $|q_1, t\rangle_r$  күйі – өзіндік мәні  $q_1$  болатын  $Q_r(t)$  операторының өзіндік күйі

$$Q_r(t) = e^{iHt/\hbar} Q e^{-iHt/\hbar}, \quad Q_r(t) |q_1, t\rangle_r = q_1 |q_1, t\rangle_r.$$

$$= {}_r \langle q_1, T_1 | T \{ Q_r(t_1) Q_r(t_2) \dots Q_r(t_n) \} | q_0, T_0 \rangle_r,$$

мұндағы  $T$  – хронологиялық көбейтінді  $T\{..\}$ , ол төмендегідей анықталады:

$$T \{ Q_r(t_1) Q_r(t_2) Q_r(t_3) \} = \begin{cases} Q_r(t_1) Q_r(t_2) Q_r(t_3) & \text{егер } t_1 > t_2 > t_3; \\ Q_r(t_2) Q_r(t_3) Q_r(t_1) & \text{егер } t_2 > t_3 > t_1. \end{cases} \quad (8.10)$$

және т.с.с.

Одан басқа, біз енді «бастапқы термді»  $J(T)$  енгізу арқылы лагранжианды өзгертейік:

$$L \rightarrow L + J(t)q(t).$$

Егер бастапқы терм уақыттың тек  $t$  және  $t'$  аралығында нөлге тең болмайды деп пайымдасақ

$$T_1 > t' > t > T_0,$$

онда Грин функциясы (траектория бойынша интеграл) осындай бастапқы термнің бар болуының арқасында

$$W^{(J)} = \int [\mathcal{D}q] e^{\frac{i}{\hbar} \int (L+Jq) dt},$$

келесі теңдікке эквивалентті болады:

$${}_r \langle q_1, T_1 | q_0, T_0 \rangle_r^{(J)} = \int dq' dq {}_r \langle q_1, T_1 | q', t' \rangle_r {}_r \langle q', t' | q, t \rangle_r^{(J)} {}_r \langle q, t | q_0, T_0 \rangle_r.$$

Енді шектік жағдайды қарастырайық:

$$T \rightarrow -i\infty, \quad T_0 \rightarrow +i\infty.$$

Толықтық қатынасын ескере отырып, энергияның өзіндік күйлерін құрастырайық. Төмендегі өрнектен

$$\begin{aligned} {}_r \langle q_1, T_1 | q_0, T_0 \rangle_r &= \langle q | e^{-iH(t-T_0)/\hbar} | q_0 \rangle = \sum_n \phi_n(q) \phi_n^*(q_0) e^{-iE_n(t-T_0)/\hbar} \xrightarrow{T_0 \rightarrow +i\infty} \\ &\xrightarrow{T_0 \rightarrow +i\infty} \phi_0(q) \phi_0^*(q_0) e^{-iE_0(t-T_0)/\hbar} \end{aligned} \quad (8.11)$$

осы қосындылаудың шектік жағдайында жалғыз мүшенің (термнің) басым болатынын көреміз. Басқаша айтатын болсақ, траектория бойынша интеграл «вакуумнан вакуумға» (яғни негізгі күйден негізге күйге) амплитудасына пропорционал болады. Осы маңызды нәтижені *Фейнман теоремасы* деп атайды.

Кәдімгі туындыға аналогиялы «функционалдық туындыны» келесі түрде анықтауға болады:

$$\frac{\delta}{\delta J(t)} J(t') = \delta(t-t').$$

Содан соң шектік ( $T_1 \rightarrow -i\infty, T_0 \rightarrow +i\infty$ ) жағдайында

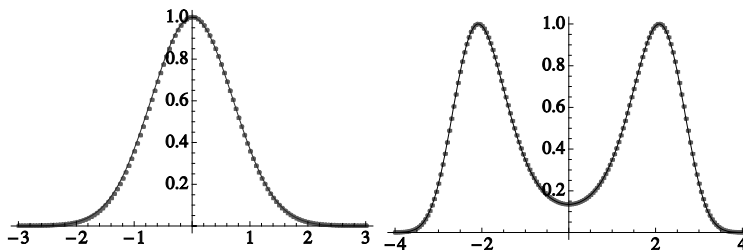
$$\left. \frac{\delta^n W^{(J)}}{\delta J(t_1) \delta J(t_2) \dots \delta J(t_n)} \right|_{J=0} = \langle 0 | T \{ Q_T(t_1) Q_T(t_2) \dots Q_T(t_n) \} | 0 \rangle, \quad (8.12)$$

яғни  $n$ -нүктелі корреляция функциясы үшін генерациялайтын функционал ретінде әсер етеді.

$s$  айнымалысы бар жүйелердегі траектория бойынша интегралдаудың жалпы түрін бірден жазуға болады:

$$\begin{aligned} G(\{q_1\}, \{q_0\}; T_1, T_0) &= \langle \{q_1\} | e^{-iH(T_1-T_0)/\hbar} | \{q_0\} \rangle = \\ &= \int \prod_n \mathcal{D}q^{(n)} e^{i \int_{T_0}^{T_1} L(q^{(n)}(t), \dot{q}^{(n)}(t)) dt}. \end{aligned}$$

Еркіндік дәрежесі шексіз болатын жүйелерді (кванттық өрістерді) еркіндік дәрежесі бірнеше болатын жүйенің шектік жағдайы ретінде қарастыруға болады. Өрістің кванттық теориясында (8.12) мөлшерінің аналогиясын себептік корреляциялық функциялары (пропагатор және  $n$ -нүктелік функция) деп аталады (17.2-бөлімін қараңыз).



**8.3-сурет.** Гармоникалық осциллятор және екі шұңқырлы потенциал үшін Фейнманның траекториялар бойынша интегралдары әдісімен есептелген негізгі күйлері (NB-8.1, NB-8.2 қараңыз)

Айнымалылардың функционалдық алмастыруларын қарастыра отырып, маңызды тепе-теңдіктерді табуға болады:

$$q(t) \rightarrow q(t) + \delta q(t).$$

Алдымен «аргументі»  $G[q]$  болатын траектория бойынша жалпы интегралды қарастырайық:

$$\langle G[q] \rangle = \int [\mathcal{D}q] G[q(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S},$$

мұндағы  $G[q]$  –  $q(t)$ -ның жалпы функциясы (немесе функционалы) болады. Айнымалыларды алмастырып, келесі өрнекті аламыз:

$$\left\langle \frac{\delta G}{\delta q(t)} - \frac{i}{\hbar} G[q(t)] \frac{\delta S}{\delta q(t)} \right\rangle = 0.$$

Осындай тепе-теңдіктің көмегімен  $G[q]$  әртүрлі варианттарын ескеріп, Эренфест, вириал және т.с.с. теоремаларын қайта қалпына келтіруге болады. Бір қызығы  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$  іргелі коммутаторына сәйкес қатынас кванттық механиканың қарапайым формализмінен осылайша ( $F(q) = q_i$ ) пайда болып отыр.

## 8.2.2 Тербелмелі моданы жіктеу

Траектория бойынша интегралдау әдісінің екі ерекшелігін атап өтейік. Біріншісі, ұйтқудың үлестері ( $\theta$ -*тарау*) диаграмма түрінде жеңіл көрсетіледі, сондықтан нақтыланған есептеулерді, әсіресе, еркіндік дәрежесі үлкен күрделі жүйелер үшін есептеулерді әлдеқайда жеңілдетеді. Екіншіден, анықталған ұйтқымайтын эффектілердің (туннельдік эффект) классикалық қозғалыс теңдеулерімен ұқсастығын евклидтік уақытта жалғастыра отырып, әсемдікпен ұғындырады. Осы шешімдер өзінше функционалдық тоқымдық нүкте рөлін атқарады.

Евклидтік уақытқа ауысқанымызда:

$$t \rightarrow t = -i\tau,$$

онда  $e^{iS}$  көбейткіші төмендегі өрнектен анықталады:

$$e^{i \int dt \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dq}{dt} \right)^2 - V(q) \right]} \rightarrow e^{- \int d\tau \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right]} = e^{-S_E},$$

мұндағы евклидтік әсер келесідей анықталған:

$$S_E = \int d\tau \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right] = \int d\tau L_E(q, \dot{q}),$$

яғни бөлшектің  $-V(q)$  потенциалындағы қозғалысын сипаттайды. Бастапқы терм қатысатын болғандықтан, генерациялайтын функционалымыз мынадай болады:

$$W_E(J) = \int \mathcal{D}q e^{-\int d\tau [L_E(q, \dot{q}) - J \cdot q]}$$

және

$$\frac{1}{W(J)} \cdot \frac{\delta^n W}{\delta J(t_1) \dots \delta J(t_n)} \Big|_{J=0} = i^n \frac{1}{W_E(J)} \frac{\delta^n W_E}{\delta J(\tau_1) \dots \delta J(\tau_n)} \Big|_{J=0, \tau_i + it_i}$$

Соңғы қатынас бізге нақты уақыт (Миньковский уақыты) үшін стандарттық режимде  $n$ -нүктелік функциялардың нәтижесін қалайша алуға болатынын көрсетеді, содан соңғы есептеулер евклидтік уақыт формализмінде есептеледі.

Гармоникалық осциллятордың  $V(q) = \frac{\omega^2}{2} q^2$  (мұндағы  $m = 1$ ) евклидтік уақыттағы лагранжианның түрі:

$$L_E = \frac{\dot{q}^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} q^2.$$

Сондықтан траектория бойынша интеграл төмендегідей болады:

$$\langle q_1 | e^{-H\tau} | q_0 \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q e^{-S_E}, \quad (8.13)$$

$$S_E = \int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} \left( \frac{\dot{q}^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} q^2 \right) d\tau,$$

ал негізгі күйдің энергиясы оның  $\tau_0 \rightarrow \infty$  тәртібін зерделеуден соң есептеледі:

$$\langle q_1 | e^{-H\tau} | q_0 \rangle \approx e^{-E_0\tau} \psi_0(q_1) \psi_0(q_0)^*. \quad (8.14)$$

Ал жалпы  $q$ -дің үшінші және одан да жоғары дәрежелерінің жағдайы үшін келесідей жазуға болады:

$$S_E = \int d\tau \left[ q(\tau) \hat{A}(\tau) + V_{\text{oc}}(q(\tau)) \right],$$

мұндағы  $\hat{A}(\tau) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{1}{2} \omega^2$  лагранжианның (евклидианның)

квадраттық бөлігі; қалған бөлігі  $V_{\text{oc}} = \lambda q(\tau)^3 + \eta q(\tau)^4 + \dots$  әсерлесуді

өрнектейді. Енді  $\hat{A}$  операторының өзіндік функцияларының толық жиынын:

$$\hat{A}(\tau)f_k(\tau) = \epsilon_k f_k(\tau), \quad \int d\tau f_k^*(\tau)f_l(\tau) = \delta_{kl} \quad (8.15)$$

және келесі белгілеулерді енгізетін болсақ

$$[Dq] \equiv \prod_k dc_k, \quad q(t) = \sum_k c_k f_k(\tau), \quad (8.16)$$

онда функционалдық интегралдың орнына тербелмелі моданың  $\prod_k dc_k$  жіктелу коэффициенттері бойынша қарапайым интегралға көшеміз. Квадраттық бөлігінің үлесі:

$$\int [Dq] e^{-q \cdot \hat{A} \cdot q} = \prod_k \epsilon_k^{-1/2} = (\det \hat{A})^{-1/2} \quad (8.17)$$

береді. Ал әсерлесуге жауапты бөлігін бастапқы термді енгізу жолымен, ұйтқу теориясында есептеуге болады. Қысқаша түрде жазайық:<sup>7</sup>

$$\begin{aligned} \int [Dq] e^{-q \cdot \hat{A} \cdot q - J \cdot q - V(q)} &= e^{-V\left(-\frac{\delta}{\delta J}\right)} \int [Dq] e^{-q \cdot \hat{A} \cdot q - J \cdot q} = \\ &= e^{-V\left(-\frac{\delta}{\delta J}\right)} e^{J \cdot \hat{A}^{-1} \cdot J/4} (\det \hat{A})^{-1/2}, \end{aligned} \quad (8.18)$$

мұндағы

$$J \cdot A^{-1} \cdot J \equiv \int d\tau_1 d\tau_2 \iint J(\tau_1) D(\tau_1 - \tau_2) J(\tau_2), \quad (8.19)$$

$D(\tau_1 - \tau_2) \equiv \hat{A}_{\tau_1, \tau_2}^{-1}$  және т.с.с.

(8.18) теңдеуі: 1) стандарттық ұйтқу теориясы, яғни тривиалдық минимумның ( $\omega(t) = \omega = const$ ) төңірегіндегі флуктуацияларды есептеу үшін де; 2) ұйтқымаған эффектілерді бағалау, яғни тривиалдық емес классикалық минимумдардың  $q(t) = q^{(клас)}(t)$  және солардың төңірегіндегі тербелістерді анықтау үшін де негізгі болып табылады.

<sup>7</sup> (8.18) теңдеуі негізгі болып табылады.

### 8.2.3 Фейнман диаграммалары

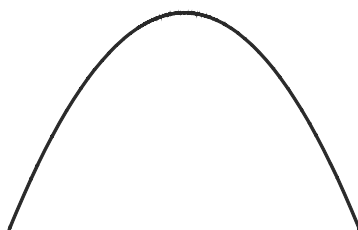
Әсерлесу потенциалдарын жіктеу мақсатында алдымен (8.13) теңдеуіндегі  $q_0 = q_1 = 0$  ( $S_{\text{клас}} = 0$  болғандағы) және бастапқы термнің  $V_{\text{ес}} = J = 0$  әсерлесуі болмайтын гармоникалық осциллятор үшін функционалдық интегралдың мағынасын анықтайық. Бұл формальдық түрде:

$$(\det \hat{A})^{-1/2}, \quad A = -\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2$$

болады және қазір біз оны есептеп көреміз. Осы жағдайда төңкерілген осцилляторлық потенциалының «классикалық шешімі» болып  $q(\tau) = 0$  тривиалдық шешімі ( $\forall \tau$  үшін) табылады (8.4-сурет).

Тербелістер  $\tau = \pm \frac{T}{2}$  нүктелерінде нөлге айналулары керек болғандықтан,  $A$  операторының өзіндік мәндерін табу қарапайым кванттық механикалық есепке тең болады: шексіз терең шұңқырдағы бөлшектер

$$\left( -\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) f_n = \epsilon_n f_n, \quad (8.20)$$



8.4-сурет

$x = \pm \frac{T}{2}$  нүктелерінде

$$f_n\left(\frac{T}{2}\right) = f_n\left(-\frac{T}{2}\right) = 0,$$

ал шешімдері келесідей болады (3.3.1-бөлім)

$$\epsilon_n - \omega^2 = \frac{\pi^2 n^2}{T^2} \equiv \lambda_n^2; \quad f_n(\tau) = A_n \sin \lambda_n \left( \tau + \frac{T}{2} \right).$$

Өзіндік  $f_k$  функциялар қатарына жіктеуді:

$$\delta q(\tau) = \sum_n c_n f_n(\tau)$$

және олардың ортонормаланғандығын пайдаланып

$$S_E = \int d\tau \delta q(\tau) A \delta q(\tau) = \sum_n c_n^2 \epsilon_n,$$

біз төмендегіні табамыз

$$\begin{aligned} \mathcal{N} \int \mathcal{D}q(\tau) e^{-S_E} &= \mathcal{N} e^{-S_{cl}} \int \prod_n dc_n e^{-c_n^2 \epsilon_n} = \\ &= \left[ \mathcal{N} \int \mathcal{D}q(\tau) e^{-S_E} \right]_{\omega=0} \prod_n \left( 1 + \frac{\omega^2 T^2}{\pi^2 n^2} \right)^{-1/2}. \end{aligned}$$

Бірінші көбейткіш еркін бөлшектің (евклидтік уақыт пен  $m = \hbar = 1$  жағдайындағы) таралуына сәйкес келеді, сондықтан ((8.6) теңдеуін қараңыз):

$$\left[ \mathcal{N} \int \mathcal{D}q(\tau) e^{-S_E} \right]_{\omega=0} = \langle 0 | e^{-p^2 T/2} | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}}.$$

«Түзету енгізілетін» көбейткіш келесі формуламен анықталады:

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left( 1 + \frac{z^2}{n^2} \right) = \frac{\text{sh } \pi z}{\pi z},$$

яғни:

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left( 1 + \frac{\omega^2 T^2}{\pi^2 n^2} \right)^{-1/2} = \left( \frac{\text{sh } \omega T}{\omega T} \right)^{-1/2}.$$

Осылайша, флуктуациялар (траекториялар) бойынша қосындылаудан

$$\langle 0 | e^{-H\tau} | 0 \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}q e^{-S_E} = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi}} \text{sh}^{-1/2} \omega T \quad (8.21)$$

болатынын табамыз. Бұл, әрине,  $q_1 = q_0 = 0$  және евклидтік уақытқа өткеннен соң (8.8) теңдеуімен үйлесімде болады. Ал  $T \rightarrow \infty$  шегі

$$\langle 0 | e^{-H\tau} | 0 \rangle \rightarrow \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} e^{-\omega T/2}$$

мен (8.14) жуықтауын, яғни  $E_0 = \frac{\omega}{2}$ ,  $\psi(0) = \left( \frac{\omega}{\pi} \right)^{1/4}$  болатынын ескеріп, (8.21) теңдеуін аламыз. Ал бұл өз кезегінде Шредингер теңдеуінің

шешімімен үйлесімде (3.4-бөлім). (8.18) теңдеуіндегі  $\hat{A}^{-1}$  пропагаторының айқын түрі:

$$\hat{A}^{-1} \equiv D(\tau_1 - \tau_2) = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega|\tau_1 - \tau_2|} \quad (8.22)$$

болатынын байқаймыз. Оны алуымыз үшін  $\hat{A}$  операторы  $E^2 + \omega^2$ -ға тең екендігін ескеріп, алдымен энергия кеңістігінде Фурье түрлендіруін

$$q(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-iE\tau} \tilde{q}(E)$$

табамыз. Осылайша,  $1/(E^2 + \omega^2)$ -ға тең болатын  $\hat{A}^{-1}$  операторы кері Фурье-түрлендіруімен беріледі:

$$\hat{A}^{-1} \equiv D(\tau_1 - \tau_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{1}{E^2 + \omega^2} e^{-iE(\tau_1 - \tau_2)}. \quad (8.23)$$

(8.22) теңдеуін алу үшін интегралды қалықтар теоремасын пайдаланып табуды жаттығу ретінде қалдырамыз. Пропагатор дегеніміз – еркін теориясындағы ( $V_{\text{ec}} = 0$ ) екі нүктелік корреляциялық функция, себебі ол бастапқы терм функциясының екінші ретті туындысына сәйкес келеді.

Осының бәрі қалай жұмыс жасайтынын көрсету үшін кубтық потенциалдың  $V = \lambda q^3(\tau)$  жағдайын, яғни  $m = \hbar = 1$  болатын келесі жүйені қарастырайық:

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} q^2 + \lambda q^3.$$

Біз кубтық әсерлесу энергияның  $\frac{\omega}{2}$  негізгі күйіне қаншалықты түзету енгізетінін есептегелі отырмыз. Оның стратегиясы келесідей: алдымен қалаған  $\lambda$ -ретті тауып шығару үшін қажетті рет  $\delta/\delta J$  туындысын аламыз, содан соң  $J=0$  пайымдап, Фейнман теоремасын (8.11) пайдаланамыз. Осылайша траекториялар бойынша (8.18) интегралын есептейміз. Потенциал (8.18) теңдеуіне

$$e^{-\lambda \int d\tau \frac{\delta^3}{\delta J(\tau)^3}} = 1 - \lambda \int d\tau \frac{\delta^3}{\delta J(\tau)^3} + \frac{\lambda^2}{2!} \int d\tau \frac{\delta^3}{\delta J(\tau)^3} \int d\tau' \frac{\delta^3}{\delta J(\tau')^3} + \dots$$

түрінде енеді. Мысалы,  $\lambda^2$  реті үшін:

$$\frac{\lambda^2}{2!} \int_{\tau} \frac{\delta^3}{\delta J^3} \int_{\tau'} \frac{\delta^3}{\delta J^3} \frac{1}{3!} \left( \int_1 \int_2 \frac{JDJ}{2} \right) \left( \int_3 \int_4 \frac{JDJ}{2} \right) \left( \int_5 \int_6 \frac{JDJ}{2} \right).$$

Функционалдық туындыларды пайдалану кезінде әртүрлі үлестері пайда болады. Мысалы, егер үшінші ретті  $\delta^3 / \delta J^3(\tau)$  туындысы үш жақшаның ішіндегі  $J$  әсер ететін болса, онда нәтижесі

$$\iint (D_{\tau, \tau'})^3 = \int d\tau \int d\tau' \frac{e^{-3\omega|\tau-\tau'|}}{(2\omega)^3} = \frac{T}{12\omega^4} \quad (8.24)$$

пропорционалды болар еді, мұндағы  $T$  – уақыттың жалпы интегралы. Бірақ дәл осы үлес бірнеше рет  $\delta^3 / \delta J^3(\tau)$  және  $\delta^3 / \delta J^3(\tau')$  туындылары ретінде үш топқа бөлінеді: жіктеудегі факториалдар мен комбинаторикалық көбейткіштерді ескере отырып, аталған үлес келесі көбейткішке

$$\frac{\lambda^2}{2!} \frac{1}{3!} 3! 3! = 3\lambda^2$$

көбейтіледі. Үлестің өзге түрін  $J$ -дің екі жақша ішіндегі екі  $\delta^3 / \delta J^3(\tau)$  туындылары береді. Осы айтылғандар міндетті түрде тура сол  $\delta^3 / \delta J^3(\tau')$  туындыларына да қатысты. Осы жағдай үшін:

$$\iint D_{\tau, \tau'} D_{\tau, \tau'} D_{\tau', \tau'} = \int d\tau \int d\tau' \frac{e^{-\omega|\tau-\tau'|}}{(2\omega)^3} = \frac{T}{4\omega^4} \quad (8.25)$$

нәтижесін аламыз. Ал осы жағдайдың комбинаторикасы кішкене күрделірек болады:

$$\frac{\lambda^2}{2!} \frac{1}{3!} \frac{3!}{2} 3! \frac{3!}{2} = \frac{9\lambda^2}{2},$$

ол жоғарыдағы үлеске көбейтіледі. Сонымен, жалпы үлес тең болады:

$$\frac{11T}{8\omega^4}.$$

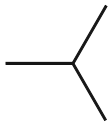
Мұндай есептеулердің түрлері жоғары ретке әкеледі, бірақ ол есептеулер өте жылдам ауырлап кетеді. Фейнманның әсем бақылауларынан осы үлестерді сызбалық түрде қайта құру арқасында, есептеулер әлдеқайда жеңілдетілді. Шындығында ережелердің қарапайым жиынтығы (*Фейнман ережелері*) бар:

- i. әрбір шың (8.5-сурет)  $-\lambda$  көбейткішін береді;

- ii. әрбір пропагатор  $D(\tau_1 - \tau_2)$  (8.6-сурет) береді;
- iii. әрбір шыңның санына ( $\lambda$ -ретті үлес беретін) сәйкес шыңдар мен пропагаторларды біріктіретін графиктерді сызу қажет;
- iv. барлық  $\tau$  (әсерлесу уақыты) бойынша интегралдау қажет;
- v. егер  $n$  бірдей шыңдар болса, онда  $1/n!$  көбейткішін қою керек;
- vi. неше рет осы диаграмманың (графтың) пайда болатынын есептеу керек.

Осылайша, жоғарыда қарастырылған кубтық потенциалдың жүйесіне екінші ретті үлесті қосатын екі А және В траекториялары көрсетілген, олар «вакуум-вакуумдық» амплитудаға үлестерін қосады (8.7-сурет). А және В диаграммаларының комбинаторикалық көбейткіштері (яғни осы диаграмманы неше түрлі әдіспен құруға болатыны) сәйкесінше мынаған тең болады:

$$3 \cdot 3 = 9, \quad 3 \cdot 2 = 6.$$



8.5-сурет

$$= -\lambda \frac{\tau_1}{\tau_2} = \frac{e^{-\omega|\tau_1 - \tau_2|}}{2\omega}$$

8.6-сурет



A



B

8.7-сурет

Сонымен қатар диаграммалардың мәндерін (8.24) және (8.25) теңдеулерінен жеңіл табуға болады.

Жоғарыда келтірілген нәтижелерді «тігу» және Фейнман теоремасын қолдану үшін тағы бір қажетті қадам жасау керек. Біз расында энергияның негізгі күйіне  $\lambda^2$  пропорционал түзетуді іздеп отырғандықтан (ал ол функционалдық интеграл аргументінің экспонентасында табылады), келесі интегралды есептеп табу қажет:

$$\langle q_1 | e^{-HT} | q_0 \rangle \approx e^{-E_0 T} \psi_0(q_1) \psi_0(q_0)^*.$$

Яғни есептеп табылған үлесті экспонента дәрежесіне көтеруіміз керек:

$$1 + (A+B) + \frac{1}{2!}(A+B) \cdot (A+B) + \dots = e^{A+B}.$$

Дәлірек айтқанда, вакуум-вакуумдық амплитуданың барлық  $\lambda$ -реттін есептегіміз келеді; алайда тек екінші ретті үлестерден

құралатын байланысқан бөлігінің (оны  $\sum$  деп атайық) графтарын ғана таңдалық.

$$W|_{J=0} = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi}} \operatorname{sh}^{-1/2}(\omega T) e^{11\lambda^2 T/8\omega^2} \simeq e^{-(\omega/2 - 11\lambda^2/8\omega^2)T},$$

сондықтан:

$$E_0 = \frac{\omega}{2} - \frac{11\lambda^2}{8\omega^2} + \dots,$$

мұндағы ... –  $\lambda$  жоғары реттігінің түзетулерін көрсетеді. Осы нәтиже келесі тарауда келтірілген (9.1-бөлім) ұйтқудың стандарттық моделін қолданып есептелген нәтижемен тең болады.

Потенциалдың төртінші дәрежесінің (квартика) жағдайында:

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} q^2 + gq^4,$$

алдында қарастырған жағдайдан жалғыз айырмашылығы – ол шыңы (8.8-суретін қараңыз). Мұнда да вакуум-вакуум диаграммасы бірінші реттігінде де кездеседі (8.9-суретін қараңыз), ол келесі жолмен есептеледі:

$$-g \frac{4 \cdot 3}{2} \frac{1}{2} \int \frac{e^{-2\omega|\tau-\tau|}}{(2\omega)^2} = -\frac{3}{4} \frac{T}{\omega^2}.$$

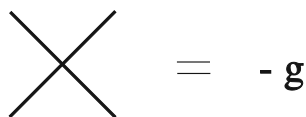
Екінші реттігінде біз екі диаграмманы көреміз, ал олардың қосындысы:

$$\frac{21}{8} \frac{T}{\omega^5}$$

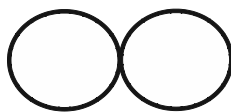
және ол 8.10-суретінде көрсетілген. Осылайша, энергияның негізгі күйіне түзетулер келесідей болады:

$$E_0 = \frac{\omega}{2} + \frac{3}{4} \frac{g}{\omega^2} - \frac{21}{8} \frac{g^2}{\omega^5} + \dots,$$

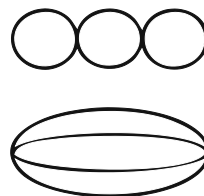
бұлар ұйтқудың стандарттық теориясымен кезекті үйлесімді нәтижелері болып табылады.



8.8-сурет



8.9-сурет



8.10-сурет

### Ескертулер

- Фейнманның ережелері мен диаграммалары еркіндік дәрежесі бірден артық жағдайлар үшін, тіпті, еркін дәрежелері шексіз (өрістің кванттық теориясы) жағдайы үшін де жалпы түрде жеңіл жазылады.
- Диаграммалық әдістің үлкен артықшылығын атап өтейік: мұндағы қарастырылған әртүрлі үлестерді, дербес жағдайда, комбинаторикалық көбейткіштерді есептеу кванттық механикадағы және кез келген өлшемді өрістің кванттық теориясындағы есептеулермен бірдей болуында. Жалғыз айырмашылық (8.23) пропагаторында болады, ол келесімен алмастырылады:

$$D(x_1^\mu - x_2^\mu) = \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} \frac{e^{ip \cdot (x_1 - x_2)}}{p^2 + m^2},$$

мұнда таралатын бөлшек массасының орнына кванттық механикалық осциллятордың  $\omega$  алмастырады. Одан басқа, импульстің ішкі «ілмегі» (пропагатормен қосылған екі шыңның салыстырмалы орналасуының Фурье-түрлендіруі)  $D$ -өлшемді болып қалады.

- Өрістің релятивистік кванттық теориясы немесе статистикалық механика (еркіндік дәрежелері шексіз теориялары) тәрізді әлдеқайда күрделірек мәселелерді шешу кезінде траекториялар бойынша интегралдау әдісінің мықтылығын растап бағаланатын кезі келген болатын. Ал кванттық механиканың қарапайым есептерін осы әдісті қолданып шығаруды салыстырмалы түрде гидравликалық престің көмегімен гайканы сығып шығаруға парапар.
- Элементар бөлшектер физикасының есептерін шешу үшін өрістің релятивистік кванттық теориясы қолданылады, яғни релятивистік формализмді (осы формализмдегі негізгі рөлді лагранждық

тығыздық атқарады, ол лоренц-инвариантты шама, ал гамильтониан тығыздығы ондай бола алмайды) пайдалануы ең үлкен артықшылығы болып табылады.

- Формальдық тұрғыдан евклидтік уақыттағы ( $T=\beta$  талабын қойып)  $\{q\}$  периодты конфигурациялармен (және сол конфигурациялардың барлығымен қосындылау) траекториялар бойынша интегралдауды

$$\sum_q \langle q | e^{-\beta H} | q \rangle = T \tau e^{-\beta H}$$

$\beta \equiv 1/kT$  жағдайы үшін статистикалық механикадағы *статистикалық қосындылау* ретінде интерпретациялауға болады. Бірақ мұндағы  $T$  – жүйенің температурасы. Бұл қарапайым бақылау бір жағынан, конденсацияланған орта физикасын (фазалық өтулер және аумалы күйлері), екінші жағынан, өрістің кванттық теориясы және элементар бөлшектер физикасын қамтитын [Zinn-Justin (1989)] зерттеулерінің өте бай (және жемісті) облыстарының негізінде жатыр. Екі облыс техника мен теориялық тұжырымдамалардың (тіпті, кейбір физиктердің өздері!) өзара экспортымен байыды, мысалы, қайта нормаланатын группа, әмбебаптылық, масштабтау, жүйелердің фазалық құрылымы, дуальдылық және т.с.с.

## 8.2.4 Кері қарапайым уақытқа (Миньковский уақытына) оралу

Нақты уақыттағы қарапайым өрнектеуге оралуды жалғастыру ерекше сақтықпен жасалуы қажет. Біз уақыттық айнымалыны кері бұру үшін сағат тіліне қарама-қарсы (90 градус) бағытындағы бұрылысты таңдағанмыз жөн:

$$t = -i\tau \rightarrow t \text{ нақты,}$$

сонымен қатар:

$$E = iE \rightarrow E \text{ нақты.}$$

болу үшін тілінің бойымен 90 градусқа бұру қажет. 8.11-суретін қараңыз. Мұндай таңдауымыз бізге қажетті корреляциялық функциялардың нақты түрімен байланысты. Расында, (8.23) пропагаторы

$$D_M(t_1 - t_2) = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} \frac{1}{E^2 - \omega^2 + i\epsilon} e^{-iE(\tau_1 - \tau_2)} \quad (8.26)$$

мәніне қайта орала бастайды, мұндағы бөліміндегі  $+i\epsilon$  ерекше болатын  $\pm\omega$  нүктелерін нақты осьтен кіші ауыстыру жолымен  $\pm(\omega - i\epsilon)$  айналып өту керектігін көрсетеді. Енді  $t_1 - t_2 > 0$  немесе  $t_1 - t_2 < 0$  үшін сәйкес болатын қалықтарды есептеп, пропагаторды табамыз:

$$D_M(t_1 - t_2) = \begin{cases} -e^{i\omega(t_1 - t_2)} / 2\omega, & t_1 > t_2; \\ -e^{i\omega(t_1 - t_2)} / 2\omega, & t_1 < t_2. \end{cases}$$

Жалпы, екі нүктелік корреляциялық функцияның түрі, мысалы,  $t_1 > t_2$  үшін ((8.10) теңдеуін қараңыз):

$$\begin{aligned} D_M(t_1 - t_2) &= \langle 0 | T(Q(t_1) Q(t_2)) | 0 \rangle = \\ &= \sum_n \langle 0 | T(Q(t_1) | n) \rangle \langle n | Q(t_2) | 0 \rangle = \sum_n e^{-iE_n(t_1 - t_2)/\hbar} |\langle 0 | Q | n \rangle|^2 \end{aligned}$$

және аналогиялы

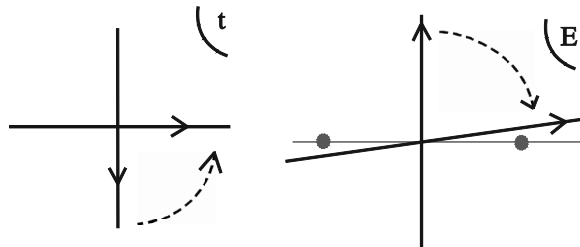
$$D_M(t_1 - t_2) = \sum_n e^{+iE_n(t_1 - t_2)/\hbar} |\langle 0 | Q | n \rangle|^2, \quad t_1 < t_2.$$

Бұдан біз  $D_M(t)$  себеп пропагаторы болатынын көреміз: энергияның тек оң (теріс) күйлері ғана келер (өткен) шақ бағытында таралады.

Аналогиялық талқылаулар скалярлық бөлшектің Миньковский кеңістік-уақытындағы пропагаторының түрі себептік (Фейнмандық) болуын түсіндіреді:

$$D_M(x_1^\mu - x_2^\mu) = i \int \frac{d^D p}{(2\pi)^D} \frac{e^{ip \cdot x}}{p^2 - m^2 + i\epsilon},$$

мұндағы  $i\epsilon$  – кіші шама.



8.11-сурет

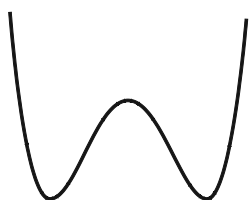
### 8.2.5 Туннельдік эффект және инстантондар

Кванттық механикадағы ұйтқымаған эффектiлерге (туннельдік эффектiлерді атауға болады) траекториялар бойынша интегралдауды қолданудың мысалы ретінде қос шұңқырлы потенциалды қарастырайық:

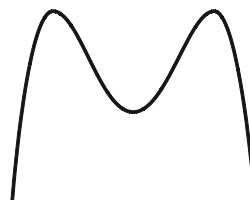
$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q), \quad V(q) = \lambda(q^2 - \eta^2)^2, \quad (8.27)$$

ол 8.12-суретінде көрсетілген. Шредингер теңдеуіне негізделген стандарттық түсініктерден жүйенің негізгі күйі – екі потенциалдың жуықталған күйлерінің симметриялық комбинациясы болатыны күмәнсіз. Яғни бірінші қозған күйі олардың антисимметриялық комбинациясымен, ал екі деңгейдің жіктелуі – екі потенциал амплитудаларының туннельденуімен сипатталады:

$$\Delta E_{\pm} \sim e^{-\frac{1}{\hbar} \int |\rho| dq}.$$



8.12-сурет



8.13-сурет

(Жартылай классикалық жуықтау негізіндегі жете талқылауды 11.1-бөлімінен қараңыз). Өзірге осы тарауда мәселені «траекториялар бойынша қосындылау» жуықтауын қолдану арқылы талдаймыз.

Бізге негізінде келесі амплитудаларды зерделеу қызықтырақ:

$$\langle \eta | e^{-HT} | -\eta \rangle = \int_{q(-T/2)=-\eta}^{q(T/2)=\eta} \mathcal{D}q e^{-S_E}; \quad (8.28)$$

$$\langle -\eta | e^{-HT} | -\eta \rangle = \int_{q(-T/2)=-\eta}^{q(T/2)=-\eta} \mathcal{D}q e^{-S_E} \quad (8.29)$$

және аналогиялық  $\eta \leftrightarrow -\eta$  үшін де, мұндағы  $S_E$  – евклидтік әсер:

$$S_E = \int d\tau \left( \frac{m}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right).$$

Әрбір потенциал шұңқырының төменгі бөлігі гармоникалық осциллятор тәрізді болатынын атап өту керек, ал олардың параметрлері:

$$V''(q)|_{\eta} = 8\lambda\eta^2 \equiv m\omega^2, \quad \omega = \sqrt{\frac{8\lambda\eta^2}{m}};$$

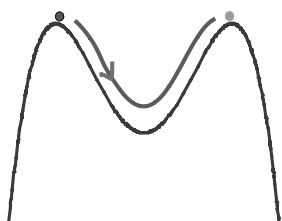
оған қоса тосқауылдың биіктігі:

$$\text{егер } \frac{m^2\omega^3}{\lambda} \gg 1 \text{ болса, онда } V(0) = \lambda\eta^4 = \frac{m^2\omega^4}{64\lambda} \gg \omega.$$

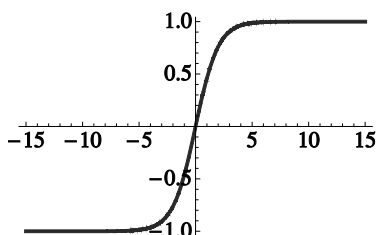
Алдымен  $T$  уақытының аралығында  $-\eta$ -дан  $\eta$ -ға дейін қозғалатын бөлшектің (8.29) амплитудасын қарастырайық. Ал  $S_E$  (функционалдық) стационарлық нүктесі евклидтік қозғалыс теңдеуінің:

$$\frac{\delta S_E}{\delta q} = -m\ddot{q} + \frac{dV}{dq} = 0$$

шешімі болады. Алайда, осы өрнек  $-V(q)$  потенциалында (8.13-сурет) қозғалатын бөлшекті де сипаттайтынын ескеру керек.  $q(-T/2) = -\eta$  және  $q(T/2) = \eta$  шекаралық шарттарын қанағаттандыратын ізделінді шешім, ол:  $q(-T/2) = -\eta$  нүктесінің төңірегінде ұзақ уақыт тұрақтайтын, содан соң үлкен жылдамдықпен орталық ордан өтіп,  $q(T/2) = \eta$  нүктесіне асимптотикалық жақындайтын бөлшектің шешімі болып табылады. Евклидтік қозғалыс теңдеуінің мұндай шешімін *инстантон* деп атайды (8.14-суретін қараңыз).



8.14- сурет



8.15- сурет

Ал нақтылы (8.27) моделі үшін инстантондық шешімнің түрі ( $T$ -ның үлкен мәндері үшін)

$$q^{(клас)}(\tau) = q^{(унсм)}(\tau) = \eta \operatorname{th} \frac{\omega}{2}(\tau - \tau_0) \quad (8.30)$$

болады, мұндағы  $\tau_0$  – инстантонның ортасы, оның мәні еркін. Классикалық механикадан белгілі *8.13-суретте* көрсетілгендей, жалпы сипаттамалары ұқсас потенциалдардағы бөлшек қозғалысының аналогиялық шешімі әрқашан табылады. Сонымен қатар  $\tau$ -ға жете тәуелділік потенциалға байланысты болады. Классикалық инстантондық әсерді келесі түрде өрнектеуге болады. Қозғалыс теңдеуін интегралдап, аламыз:

$$\frac{m}{2} \left( \frac{dq}{d\tau} \right)^2 - V(q) = E = 0,$$

мұнда біз энергияның мәнін бекітіп қою мақсатында шекаралық шарттарды пайдаландық. Бұдан:

$$\frac{dq}{d\tau} = \sqrt{\frac{2V(q)}{m}},$$

осылайша (вириал жөніндегі теореманы пайдаланып)

$$\begin{aligned} S_E^{(унсм)} &= \int d\tau \left[ \frac{m}{2} \dot{q}^2 + V(q) \right] = \int d\tau m \dot{q}^2 = \\ &= \int_{-\eta}^{\eta} dq \sqrt{2mV(q)} = \int_{-\eta}^{\eta} dq |p| \end{aligned} \quad (8.31)$$

болатынын табамыз; бұл туннельдік эффекті үшін *келтірілген әсер* деген атаумен белгілі. Нақтыланған жағдай үшін квартикалық потенциал (8.27) үшін  $S_E^{(унсм)} = \omega^3 / 12\lambda$  болатынын табамыз.

Енді  $q(\tau)$  инстантондық шешімнің төңірегінде жіктелік:

$$q(\tau) = q^{(клас)}(\tau) + \delta q(\tau),$$

$$S_E = S_E^{(унсм)} + \frac{1}{2} \int d\tau \delta q(\tau) \left[ -m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(q^{(унсм)}(\tau)) \right] \delta q(\tau) + \dots;$$

$\delta q$  тербелістері бойынша интегралдап, формалдық түрде аламыз:

$$\int \mathcal{D}q e^{-S_E} = \mathcal{N} e^{-S_E^{(унсм)}} \det \left[ -m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(q^{(унсм)}) \right]^{-1/2}.$$

Алайда, кейбір мәселелер бар. Біріншіден, (8.30) классикалық шешімінде  $x_0$  еркін параметрі бар және  $S_E$  әсері оған тәуелді емес. Осы шешімнің төңірегіндегі тербелістердің арасында қосымша әсерді талап етпейтін уақыттың бағытындағы қарапайым аудармаларға сәйкес келетіндері болуы қажет. Сондықтан нөлдік өзіндік мән квадраттық операторымен байланысқан тербеліс модасының жіктелуі арасында болады ((8.20) теңдеуін қараңыз):

$$\left[ -m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(q^{(инст)}(\tau)) \right] \xi_n(\tau) = \epsilon_n \xi_n,$$

мұндағы  $\epsilon_0 = 0$ , демек  $\det[\dots]^{-1/2}$  көбейткіші мағынасыз болады. Одан басқа, орталығы ығысатын инстантондық өзге де шешімдері болғандықтан, сол шешімдер (көптоқымдық) қисынды жауап алатын нәтижелерге жеткізуі қажет.

Әрине, екі нүкте өзара тығыз байланысқан, оған қоса екі мәселенің шешімі келесі стандарттық әдіспен анықталады. Басты идеясы уақыт бойынша трансляцияға сәйкес келетін нөлдік моданың айқын түрін алу керек:

$$dq^{(клас)}(\tau) = \frac{dq^{(клас)}(\tau)}{d\tau_0} d\tau_0 \equiv dc_0 \xi_0(\tau),$$

мұндағы  $\xi_0$  – нөлдік мода функциясының нормаландырушы көбейткіші:<sup>8</sup>

$$\xi_0(\tau) = \left( \frac{S_E^{(инст)}}{m} \right)^{-1/2} \frac{dq^{(клас)}(\tau)}{d\tau},$$

сондықтан

$$dc_0 = (2\pi\hbar)^{1/2} \left( \frac{S_E^{(инст)}}{m} \right)^{1/2} d\tau_0.$$

Анығын айтқанда, нақтылы тербеліс модалары бойынша (функционалдық) интегралдың бір бөлігінің орнына, инстантонның орталығы бойынша интегралмен алмастырдық! Осындай алмастыруды коллективтік координаталар әдісі ( $\tau_0$  мысал болады) деп атайды. Функционалдық интегралдың анықтамасын келтірейік:<sup>9</sup>

<sup>8</sup> Нөлдік моданың нормалануы (8.31) өрнегіне кіретін интегралдық теңдеуінен белгілі.

<sup>9</sup> Мұндай теориялық құрал солитондарды, ширатуды, ұйытқуды және т.б. зерделегенде қолданылады. Аталған құбылыстар физиканың өртүрлі

$$Dq \equiv \frac{dc_0}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \prod_{n \neq 0} \frac{dc_n}{(2\pi\hbar)^{1/2}} = \left( \frac{S_E^{(uncm)}}{m} \right)^{1/2} d\tau_0 \prod_{n \neq 0} \frac{dc_n}{(2\pi\hbar)^{1/2}}.$$

Инстантондық шешімнің төңірегінде интегралдап, үлесін табамыз:

$$\int \mathcal{D}q e^{-S_E} = (2\pi\hbar)^{1/2} \left( \frac{S_E^{(uncm)}}{m} \right)^{1/2} T \det \left[ -m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(q^{(uncm)}) \right]^{-1/2},$$

мұндағы анықтауыштың үстіндегі штрих туындының тек нөлдік емес өзіндік мәндері бойынша алынатынын білдіреді. Осциллятор жағдайы үшін (8.21) теңдеуінен ( $V = 0$ ) анықтауыштың нормалануын жазайық:

$$\mathcal{N} \det \left[ -m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(q^{(uncm)}) \right]^{-1/2} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\omega T/2} K,$$

мұндағы  $K$  – инстантон төңірегіндегі квадраттық флуктуацияның және  $q^{(клас)}=0$  тривиалдық шешімінің төңірегінің қатынасы. Біз  $K$  есептеуді қозғамаймыз, бірақ нақтылы модель (8.27) үшін мәнін ғана көрсетейік:

$$K = \omega \sqrt{6S_E^{(uncm)} / \pi\hbar}.$$

Біз аяқтайын деп қалдық.  $T \rightarrow \infty$  жағдайында шешімдері көп болады, олар көп рет аударылған потенциалдың екі шыңдары арасында табылатын бөлшектерге сәйкес келеді. 8.16-суретті қараңыз. Әсер инстантон орталығының төңірегінде шоғырланғандықтан (таралу уақыты шегінің реті  $\Delta\tau \sim 1/\omega$ ) – осылайша аталуының себебі де сондықтан – сәйкес келетін  $n$  инстантондардың үлесі шамамен  $(Ke^{-S^{(uncm)}/\hbar} T)^n$ -не пропорционал болады. (8.29) амплитудалары үшін  $n$ -жұп болатыны анық, ал (8.28) амплитудасына тек  $n$ -тақ үлес қосады. Инстантондардың орталықтары бойынша қосындылап, біз ақтық формуланы жазайық:

$$\langle -\eta | e^{-HT} | -\eta \rangle = \langle \eta | e^{-HT} | \eta \rangle \simeq \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} e^{-\omega T/2} ch \left( Ke^{-S^{(uncm)}/\hbar} T \right);$$

$$\langle \eta | e^{-HT} | -\eta \rangle = \langle -\eta | e^{-HT} | \eta \rangle \simeq \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} e^{-\omega T/2} sh \left( Ke^{-S^{(uncm)}/\hbar} T \right).$$

---

облыстарында: оптикадан бастап, қатты дене физикасы, гидродинамика, асқыногкізгіштік және элементар бөлшектер физикасы, космологияға дейін пайда болады және өрістің сызықтық емес шешімдерінің шекті-энергиялық өртүрлі шешімдері болып табылады.

$|\eta\rangle$  және  $|- \eta\rangle$  күйлері эволюция операторының, яғни гамильтонианның өзіндік күйлері болмайды. Дұрыс өзіндік күйлер –  $e^{-HT}$  базисінде диагоналды болатын  $|\psi \pm\rangle = (|\eta\rangle \pm |- \eta\rangle) / \sqrt{2}$  комбинациясынан құралады. Энергияның өзіндік мәндері ( $chx \pm shx = e^{\pm x}$ ):

$$E_{\pm} = \frac{\hbar\omega}{2} \mp K\hbar e^{-S(\text{uicm})/\hbar}.$$

### Тараудың қорытындысы

- Кванттық механикалық Гриннің функциясы әрқайсысының салмағы  $e^{iS/\hbar}$  болатын траекториялар бойынша қосындылауын береді.

### Тереңдетіп оқу үшін

Қызығатын оқырмандар үшін арнайы кеңестер: Фейнманның «Релятивистік емес кванттық механиканың кеңістік-уақыттық тәсілдемесі» [Feynman (1948)] мақаласын оқыған абзал. Кванттық механикадағы траекториялар бойынша интегралдау тұжырымдамасының жете мазмұндалуын оқырман «Кванттық механика және траекториялар бойынша интегралдау» [Feynman and Hibbs (1965)] кітабынан табады. «Өрістің кванттық теориясы және аумалы құбылыстар» [Zinn-Justin (1989 г.)] кітабының алғашқы тараулары өрістің кванттық теориясына да, аумалы құбылыстарға да арналған жақсы кітаптың үлгісі болып есептеледі. Ал келесі шолу мақаласында [Abers and Lee(1973)] траекториялар бойынша интегралға, сондай-ақ өлшемдік теорияларға өте ұқыпты кіріспе берілген. Траекториялар бойынша интегралдар үшін арнайы өзге де жақсы кітаптар көп, мысалы, [Schulman (1981)] және [Kleinert (2006)].

Траекториялар бойынша интегралдау әдісі өрістің кванттық теориясы мен статистикалық механиканың сандық талдауларындағы үлкен прогресс үшін базис ретінде көмектесті. Көптеген тәсілдемелер *Монте-Карло* әдісіне негізделген. Сандық талдау

есептерінде қарапайым кванттық механикалық есептері үшін олардың қысқаша мазмұндамасын береміз.

---

### Сандық талдау

- (8.1) Бірөлшемді кванттық жүйелер үшін Монте-Карло әдісін пайдаланып, бағдарлама жазыңыздар. Әдісті гармоникалық және ангармоникалық осцилляторлар үшін пропагаторды есептеуге қолданыңыздар.
- (8.2) Көрші уақыт кванттарының арасындағы өту матрицасымен анықталатын интегралдың бөлігін есептеңіздер.



## 2-БӨЛІМ

# ЖУЫҚТАУ ӘДІСТЕРІ

Оқулықтың 2-бөлімінде жуықтаудың үш күшті әдістері: ұйтқу (пертурбация) теориясы, вариациялық әдіс және жартылай классикалық жуықтау қарастырылған. Олар көптеген физикалық есептердің шешімдері үшін ауыстыруға келмейтін құралдары болып табылады.

# Ұйтқу (пертурбация) теориясы

## 9

- 9.1 Уақытқа тәуелді ұйтқулар
  - 9.2 Кванттық өтулер
  - 9.3 Континуумға өтулер
  - 9.4 Ыдыраулар (бөлінулер)
  - 9.5 Электромагниттік өтулер
  - 9.6 Эйнштейн коэффициенттері
- Қосымшаларға нұсқаулар  
Есептер  
Сандық талдау

Осы тарауда ең жиі қолданылатын әдістердің бірі – ұйтқу теориясын талқылаймыз. Спектрі белгілі және гамильтонианның кіші «ұйтқыған» бөлігі  $V$  болатын физикалық жүйе жиі «ұйтқымаған»  $H_0$  гамильтонианымен сипатталады. Енді  $\lambda$  – жіктеу параметрін енгізе отырып, жалпы гамильтонианды

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V \quad (9.1)$$

түрінде жаза аламыз. Есептеулер жүргізіліп болған соң,  $\lambda$  параметрін бірге теңестіре саламыз. Әрине, ұйтқу мүшесінің алдында физикалық байланыс тұрақтысының пайда болатын жағдайлары да кездеседі. Ондай кезде физикалық байланыс тұрақтысы бойынша дәрежелік қатарға жіктеуді жүргізуге болады.

Ұйтқу уақыт бойынша тұрақты болған жағдайда, негізгі мәселе «ұйтқымаған» жүйенің спектрінен қаншалықты ығысатынын салыстыруға келіп саяды. Ал егер ұйтқу уақытқа тәуелді болса, онда бұл сапалық жағынан мүлде өзге физикалық есеп болып табылады. Осы жағдайда жүйенің энергиясы сақталмайды және ұйтқымаған күйлер арасындағы кванттық өтулер мәжбүрлі болады.

## 9.1 Уақытқа тәуелді ұйтқулар

Алдымен статикалық, яғни  $V$  операторы тұрақты болатын ұйтқудың себептерін қарастырайық. Сондықтан  $H_0$  үшін шешімдері берілген деп есептейік, енді  $H$  үшін өзіндік энергиялар мен өзіндік функцияларын табу мәселесі туындайды. Есепті жеңілдету мақсатында өзіндік мәндерді дискреттік деп алайық. Егер ұйтқымаған күйін бірінің энергиясы  $E^{(0)}$ , ал оған сәйкес келетін өзіндік векторды  $|\psi\rangle$  деп белгілейтін болсақ, онда мәселе  $E(\lambda)$  және  $|\psi(\lambda)\rangle$  үшін шешімі болатын дәрежелік қатарды табуға келіп тіреледі. Сонымен,

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle \quad (9.2)$$

болады және ол келесі шарттарды қанағаттандырады:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} E(\lambda) = E^{(0)}, \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} |\psi(\lambda)\rangle = |\psi^{(0)}\rangle. \quad (9.3)$$

Оған қоса, бастапқы моментте ұйтқымаған күйлерді сәтінемеген деп ұйғарайық: жалғыз  $|\psi^{(0)}\rangle$  өзіндік векторы жалғыз болатын  $E^{(0)}$  өзіндік мәнімен байланысқандықтан, (9.2) өрнегінің шешімін:<sup>1</sup>

$$|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi^{(2)}\rangle + \dots + \lambda^L |\psi^{(L)}\rangle + \dots; \quad (9.4)$$

$$E = E^{(0)} + \lambda \varepsilon_1 + \lambda^2 \varepsilon_2 + \dots \quad (9.5)$$

түрінде іздейміз.

Ал (9.2) теңдеуі  $\psi$  үшін біртекті және сол теңдеу шешімінің анықтамасы  $|\psi\rangle$  векторының нормасын бекітуді талап етеді. Мысалы,  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$  нормалануын енгізу арқылы. Онда бастапқыда нормалау шартын енгізбестен бұрын, оның орнына келесі шартты пайдаланған жеңілірек болатынын көреміз:

<sup>1</sup> Мұнда (0) индексі «ұйтқымаған» күйге сәйкес келетінін білдіреді, ал  $\psi^{(1)}$ ,  $\psi^{(2)}$  немесе  $\psi^{(L)}$  толқындарындағы индекстер  $\lambda$  – жуықтау ретінің дәрежесін білдіреді. Басқа жағынан, мысалы, дербес жағдайда біз  $n$ -ші «ұйтқымаған» күйін және оның өзіндік мәні мен өзіндік функциясын қарастырып отырмыз делік. Демек, барлық «ұйтқымаған» (мысалы,  $|\psi\rangle$ ,  $E$  және т.с.с.) шамалардың төменде  $n$  индекстері болады. Алайда, қажетті ерекше жағдайларда болмаса, өзге белгілеулерге кедергісін келтірмес үшін ол индекс айқын түрде жаза берілмейді. Одан басқа,  $|n\rangle$ ,  $|k\rangle$  белгілеулері ұйтқымаған күйлердің векторларын білдіреді. Сонымен,  $|\psi^{(0)}\rangle = |n\rangle$ .

$$\langle \psi^{(0)} | \psi \rangle = 1. \quad (9.6)$$

Нормалаудың стандарттық шартын кейінірек енгізсек те болады.

Өзірге  $|\psi^{(0)}\rangle$  ұйтқымаған күйі нормаланған деп ұйғарайық. Онда (9.6) теңдеуі  $|\psi^{(0)}\rangle$  векторына түзетуі  $|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + |\psi_{\perp}\rangle$  түрілерінің бірі болады деп пайымдалады, мұндағы  $\psi_{\perp}$  ортогоналдық векторының гильберттік субкеңістігіне тиесілі. Ал (9.6) теңдеуі  $\lambda$  – жуықтау ретінің дәрежесіне

$$\langle \psi^{(0)} | \psi^{(L)} \rangle = 0, \quad L \geq 1 \quad (9.7)$$

шартын орнатады. Енді (9.4) жіктеуін (9.2) теңдеуіне қойып және жүйенің табылатын күйі  $\lambda$  – жуықтау ретінің дәрежесіне қойылатын шартты қанағаттандырады деген талабын енгізіп, келесіні аламыз:

$$\begin{aligned} (H_0 - E^{(0)})|\psi^{(0)}\rangle &= 0; \\ (H_0 - E^{(0)})|\psi^{(1)}\rangle + (V - \varepsilon_1)|\psi^{(0)}\rangle &= 0; \\ (H_0 - E^{(0)})|\psi^{(2)}\rangle + (V - \varepsilon_1)|\psi^{(1)}\rangle - \varepsilon_2|\psi^{(0)}\rangle &= 0; \\ (H_0 - E^{(0)})|\psi^{(3)}\rangle + (V - \varepsilon_1)|\psi^{(2)}\rangle - \varepsilon_2|\psi^{(1)}\rangle - \varepsilon_3|\psi^{(0)}\rangle &= 0; \\ \dots \dots; \\ (H_0 - E^{(0)})|\psi^{(L)}\rangle + V|\psi^{(L-1)}\rangle - \sum_{K=1}^L \varepsilon_K |\psi^{(L-K)}\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (9.8)$$

### Бірінші ретгі шешім

$\lambda$ -ның ең төменгі реттік шешімін өте жылдам табуға болады, ол үшін жоғарыдағы теңдеулердің көмегімен оны  $|\psi^{(0)}\rangle$  кет-векторына проекциялау қажет. Алайда,  $H_0$  өзіне түйіндес оператор және оның  $|\psi^{(0)}\rangle$  өзіндік векторы  $E^{(0)}$ -мен байланысты болғандықтан, келесі теңдік орынды:

$$\langle \psi^{(0)} | (H_0 - E^{(0)}) = 0 \quad (9.9)$$

Бұдан біз төмендегі

$$\varepsilon_1 = \langle \psi^{(0)} | V | \psi^{(0)} \rangle = \langle n | V | n \rangle = V_{nn} \quad (9.10)$$

өрнегін аламыз; соңғы екі өрнектерде біз  $|\psi^{(0)}\rangle = |n\rangle$  деп қабылдадық. Демек, энергияның  $n$ -ші өзіндік мәніне бірінші ретті түзетуі – ол ұйтқыған потенциалдың қарапайым ( $nn$ ) диагональдық матрицалық элементі болып шықты.

Енді  $H_0$  гамильтонианының  $|k\rangle$  нормаланған өзіндік функциялары гильберттік кеңістігінде толық ортонормаланған базисін құрасын. Онда  $|\psi^{(1)}\rangle$  векторлық күйіне түзетуді

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum'_k |k\rangle \langle k | \psi^{(1)} \rangle \quad (9.11)$$

түрінде жазуға болады. Ал (9.7) шектеуінің әсерінен осы қосындылауда  $|\psi^{(0)}\rangle$  нағыз векторына сәйкес келетін мүше көрсетілмеген; оны біз қосындылау таңбасындағы штрихпен (индексі тәрізді) белгілейік.  $H_0$  операторының  $k \neq n$  болатын өзіндік векторларының ортогональдылығы  $\langle k | \psi^{(0)} \rangle = 0$  теңдігінің орындалуымен өрнектеледі. Сондықтан, (9.8) өрнектерінің екіншісіне  $\langle k |$  -мен әсер етіп,

$$(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle k | \psi^{(1)} \rangle + \langle k | V | \psi^{(0)} \rangle = 0$$

теңдігін аламыз. Бұдан  $|\psi^{(1)}\rangle$  векторлық күйі үшін мынадай теңдеуді жазамыз:

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum'_k \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle k | V | \psi^{(0)} \rangle = \sum'_k |k\rangle \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (9.12)$$

Қосындылау  $|n\rangle$  әртүрлі барлық күйлері бойынша кеңейтілді. Содан, (9.12) теңдеуі толқындық функцияға бірінші ретті түзету болып табылады.

### Итерациялық шешім

Сонымен, (9.8) өрнектерін жоғарыда пайдаланылған итерациялық рәсімдер жолымен шешуге болады. Енді  $(L-1)$ -ретті шешімін білеміз деп қабылдайық. (9.8) өрнектерінің соңғысын  $|\psi^{(0)}\rangle$ -ге көбейтейік. Онда (9.9) шарты бірінші мүшені жойып жібереді, оның нәтижесінде энергияның  $\lambda^L$  ретті түзетуін анықтайтын

$$\varepsilon_L = \langle \psi^{(0)} | V | \psi^{(L-1)} \rangle \quad (9.13)$$

теңдігін аламыз. Енді осы теңдікті  $\langle k |$ -ға көбейтіп (мұндағы  $k \neq n$ ) және  $\langle k | \psi^{(0)} \rangle = 0$  болатынын пайдаланып,

$$\langle k | \psi^{(L)} \rangle = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle k | V | \psi^{(L-1)} \rangle - \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \sum_{K=1}^{L-1} \varepsilon_K \langle k | \psi^{(L-K)} \rangle \quad (9.14)$$

теңдеуді аламыз. Осы теңдеу  $|k\rangle$  ұйтқымаған векторлық күйлерін жіктеу нәтижесінде  $\psi^{(L)}$  өзіндік күйлерінің жуықталған шешімін анықтайды. Мысалы, энергияның өзіндік мәніне екінші ретті түзетуі келесіге тең болады:

$$\varepsilon_2 = \langle \psi^{(0)} | V | \psi^{(1)} \rangle = \sum_k' \frac{\langle k | V | \psi^{(0)} \rangle^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_k' \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}. \quad (9.15)$$

### Проекторларды пайдалану

Шешімін операторлық пішінде тұжырымдауға болады. Ол үшін  $|\psi^{(0)}\rangle$  ұйтқымаған күйіне проекциялайтын  $P$  операторын және  $|\psi^{(0)}\rangle$ -ға ортогоналды кеңістігіне проекциялайтын  $Q$  операторын енгізейік:

$$P = |\psi^{(0)}\rangle \langle \psi^{(0)}|; \quad Q = \sum_k' |k\rangle \langle k|; \quad 1 = P + Q.$$

Енді жоғарыда келтірілген шешімді

$$|\psi^{(1)}\rangle = Q \frac{1}{E^{(0)} - H_0} Q V |\psi^{(0)}\rangle \quad (9.16)$$

түрінде жазуымызға болады. Негізгі идея келесідей. Кез келген  $A$  операторын

$$A = \begin{pmatrix} PAP & PAQ \\ QAP & QAQ \end{pmatrix}$$

жаңа ғана енгізілген екі проекциялық оператордың көрінісінде өрнектеуге болады. Алдымен  $A = E^{(0)} - H_0$  операторын қарастырайық. Бұл оператордың кері операторы болмайды, себебі оның ядросы  $(E^{(0)} - H_0) |\psi^{(0)}\rangle = 0$  тривиалдық. Алайда,  $Q(E^{(0)} - H_0)Q$  операторының кері операторы бар, өйткені ұйтқымаған спектр сетінемеген деп пайымдағанбыз. Сондықтан (9.16) функциясы

$$(E^{(0)} - H_0)|\psi^{(1)}\rangle = V|\psi^{(0)}\rangle \quad (9.17)$$

теңдеуінің қарапайым шешімі болып табылады және ол субкеңістікте  $|\psi^{(0)}\rangle$  -ға ортогональды. Потенциалды  $V = PV + QV$  түрінде жазайық; проекциялық операторлар ортогональдылығының нәтижесінде бірінші мүше шешіміне үлес қоспайды: біз (9.17) теңдеуін бірінші рет проекциялаймыз, содан соң шешімін табу үшін оның кері шамасын табамыз.

Енді

$$G = Q \frac{1}{E^{(0)} - H_0} Q$$

болсын, онда жоғарыдағы қатынастарды

$$\varepsilon_1 = \langle \psi^{(0)} | V | \psi^{(0)} \rangle; \quad |\psi^{(1)}\rangle = GV|\psi^{(0)}\rangle; \quad (9.18a)$$

$$\varepsilon_2 = \langle \psi^{(0)} | V | \psi^{(1)} \rangle = \langle \psi^{(0)} | VGV | \psi^{(0)} \rangle; \quad (9.18б)$$

$$|\psi^{(2)}\rangle = GV|\psi^{(1)}\rangle - \varepsilon_1 G|\psi^{(1)}\rangle \quad (9.18б)$$

түрінде қайта жазуға болады. Рет-ретімен өзіндік векторларды және оларға сәйкес келетін өзіндік мәндерді бағалай отырып, қызықты қатынастарды табамыз. Мысалы,

$$\begin{aligned} \varepsilon_3 &= \langle \psi^{(0)} | V | \psi^{(2)} \rangle = \langle \psi^{(0)} | VGV | \psi^{(1)} \rangle - \varepsilon_1 \langle \psi^{(0)} | GV | \psi^{(1)} \rangle = \\ &= \langle \psi^{(1)} | V | \psi^{(1)} \rangle - \varepsilon_1 \langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle. \end{aligned} \quad (9.19)$$

Дербес жағдайда  $|\psi^{(1)}\rangle$  есептеп болған бетте,  $\varepsilon_3$  -ді жеңіл анықтауға болады.

Жалпы жағдайда

$$|\psi_n\rangle = GV|\psi_{n-1}\rangle - \sum_{k=1}^{n-1} \varepsilon_k G|\psi_{n-k}\rangle = GV|\psi_{n-1}\rangle - \sum_{k=1}^{n-1} \varepsilon_{n-k} G|\psi_k\rangle$$

болатынын көреміз. Ендеше  $|\psi^{(1)}\rangle = GV|\psi^{(0)}\rangle$  болатынын пайдаланып, өзіндік мәндері үшін төмендегіні табамыз:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= \langle \psi^{(0)} | V | \psi_{n-1} \rangle = \langle \psi^{(0)} | VGV | \psi_{n-2} \rangle - \sum_{k=1}^{n-2} \varepsilon_{n-1-k} \langle \psi^{(0)} | VG | \psi_k \rangle = \\ &= \langle \psi^{(1)} | V | \psi_{n-2} \rangle - \sum_{k=1}^{n-2} \varepsilon_{n-1-k} \langle \psi^{(1)} | \psi_k \rangle. \end{aligned}$$

Ал (9.19) теңдеуі  $n=3$  болғандағы дербес жағдайға сәйкес келеді: мұның ең қызығарлық ерекшелігі болып, энергияның  $n$ -ші ( $n>2$ )

ретті түзетуін есептеу үшін өзіндік вектордың  $(n-2)$ -ретті дәлдігімен білу жеткіліктілігін атап өтеміз.

### Ескертулер

•  $\lambda$  ретті өзіндік вектор үшін нәтиже автоматты түрде нормаланған болады:  $(\langle \psi^{(0)} | + \lambda \langle \psi^{(1)} |)(|\psi^{(0)}\rangle + \lambda |\psi^{(1)}\rangle) = 1 + \mathcal{O}(\lambda^2)$ ,  
мұнда  $\langle \psi^{(0)} | \psi^{(1)} \rangle = 0$  пайдаланылды.

•  $E_n > E_0$  болғандықтан, негізгі күйдің энергиясына  $\varepsilon_2$  екінші ретті түзету әрқашан да теріс мәнді. Егер бірінші ретті түзету жойылып кететін болса, онда бұл нәтиженің маңыздылығы артады, өйткені осы жағдайда ұйтқу әрқашан негізгі күйдің энергиясын төмендетеді.

• Тұрақты санға көбейтудің нәтижесінде жоғарыда келтірілген өзіндік функцияны нормалауға болады:

$$|\psi\rangle_N = Z_\psi^{-1/2} |\psi\rangle; \quad {}_N\langle \psi | \psi \rangle_N = 1 \Rightarrow Z_\psi^{-1} = \langle \psi | \psi \rangle. \quad (9.20)$$

Мұндағы  $Z_\psi$  – дұрыс  $\psi$  өзіндік функциясындағы  $\psi^{(0)}$  ұйтқымаған күй табылуының ықтималдылығын білдіреді:

$$|\langle \psi^{(0)} | \psi \rangle_N|^2 = Z_\psi |\langle \psi^{(0)} | \psi \rangle|^2 = Z_\psi; \quad (9.21)$$

демек, жалпы жағдайда  $Z_\psi \leq 1$ . Ең төменгі тривиалдық емес рет үшін:

$$Z_\psi^{-1} = 1 + \lambda^2 \langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle.$$

Бұдан, (9.12) теңдеуінен және  $\langle n | k \rangle = \delta_{nk}$  күйлердің ортогоналдылығынан келесіні аламыз:

$$\begin{aligned} Z_\psi &= 1 - \lambda^2 \langle \psi^{(1)} | \psi^{(1)} \rangle = 1 - \lambda^2 \sum_n \langle \psi^{(0)} | V | n \rangle \frac{1}{(E_0 - E_n)^2} \langle n | V | \psi^{(0)} \rangle = \\ &= 1 - \lambda^2 \sum_n \frac{|\langle \psi^{(0)} | V | n \rangle|^2}{(E_0 - E_n)^2} = 1 + \lambda^2 \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial E_0}. \end{aligned} \quad (9.22)$$

Осы формулада ұйтқымаған энергия бойынша туынды барлық  $V$  матрицалық элементтерді фиксациялап жүргізіледі. Расында, (9.22) теңдеуінде барлық реттер кіреді. Енді  $\delta V = \delta E_0 |\psi^{(0)}\rangle \langle \psi^{(0)}|$

түріне, яғни ұйтқымаған күйлерінің проекциялық операторына пропорционал болатын ұйтқуды қарастырамыз. Бірінші ретті ұйтқудың теориясын қолдана отырып,  $E$  бойынша вариациясын табайық:

$$\delta E = \delta E_0 \cdot_N \langle \psi | \psi^{(0)} \rangle \langle \psi^{(0)} | \psi \rangle_N = \delta E_0 \left| \langle \psi^{(0)} | \psi \rangle_N \right|^2 = Z_\psi \delta E_0;$$

сондықтан:

$$Z_\psi = \frac{\partial E}{\partial E_0}.$$

- Қайта (9.6) шартына оралайық. Енді  $\lambda$  бойынша аналитикалық екенін есте сақтай отырып, дәрежелік қатарының  $\lambda$  шешімін қарастырайық. Онда:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} |\psi(\lambda)\rangle, \quad \lim_{\lambda \rightarrow 0} E(\lambda),$$

шектері дәл анықталады, себебі  $H_0$  операторының спектрі сетінемеген екені есімізде болар. Шредингер теңдеуі біртекті болғандықтан, егер  $|\psi(\lambda)\rangle$  оның шешімі болса, демек,  $c(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$  да шешімі болып табылады. Сондықтан  $a(\lambda) = \langle \lambda^{(0)} | \psi(\lambda) \rangle$  шамасын  $\lambda$ -ның функциясы ретінде қарастырамыз. Өлбетте,  $a(0) = 1$  және үздіксіз болуы үшін  $\lambda = 0$  төңірегінде  $a(\lambda) \neq 0$  болады. Онда кет-векторы (9.6) теңдеуін қанағаттандырады.

Алдыңғы қатарға осы рәсімнің кейбір қыр-сырын шығарып, жоғарыдағы қарапайым талқылауымызды жалпыландыруға болады. Ол үшін алдымен  $\lambda$  вариациясын жаңа  $\delta\lambda \cdot V$  ұйтқу ретінде қарастырайық. Алдындағы талдауымызда  $\psi(\lambda)$  функциясын ұйтқымаған  $\psi^{(0)}$  және  $\psi(\lambda + \delta\lambda)$  толқындық функциялары ретінде қарастырған болатынбыз, яғни жеткілікті кіші  $\delta\lambda$  үшін әрқашан да

$$\langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda + \delta\lambda) \rangle = \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle$$

нормалауын таңдап алуымызға болады. Басқаша айтатын болсақ, онда әрқашан локальді

$$\left\langle \psi(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi(\lambda) \right. \right\rangle = 0 \tag{9.23}$$

теңдігін қанағаттандыру мүмкіндігі болуы қажет. Содан соң  $\|\psi\|$ -ге бөліп, күйді

$$0 = \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle = \left\langle \psi(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi(\lambda) \right. \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi(\lambda) \left| \psi(\lambda) \right. \right\rangle$$

түрінде нормалауға болатынын пайымдай аламыз. Сондықтан бірінші мүше

$$\left\langle \psi(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi(\lambda) \right. \right\rangle = i\beta \quad \text{толығымен жорамал.} \quad (9.24)$$

Күйдің фазасын  $|\psi'\rangle = e^{-ia(\lambda)} |\psi\rangle$  таңдау еркіндігімен пайдаланып, одан

$$\left\langle \psi'(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi'(\lambda) \right. \right\rangle = -i \frac{\partial \alpha}{\partial \lambda} + i\beta(\lambda)$$

теңдігін аламыз. Ендеше,

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \lambda} = \beta(\lambda) \quad (9.25)$$

таңдап, біз

$$\left\langle \psi'(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \psi'(\lambda) \right. \right\rangle = 0$$

(9.23) теңдеуін қайта аламыз. Ал (9.25) теңдеуінің әрқашан локальдік шешімі болатыны пайымдалады. Кейінірек  $\lambda$ -ның үлкен мәндері үшін кейбір қиындықтар пайда болуының мүмкіндіктерін көрсетеміз.

### 9.1.1 Сегінеген деңгейлер

Жоғарыда сипатталған ұйтқу теориясын  $|E_k^{(0)} - E_n^{(0)}|$  ұйтқымаған деңгейінің жіктелуі  $|\langle n|V|k\rangle|$  матрицалық элементтерінен әлдеқайда артық болған жағдайларда қолдану орынды. Ұйтқымаған деңгейлердің арасында  $E_k^{(0)} = E_n^{(0)}$ , бірақ  $\langle n|V|k\rangle \neq 0$  теңсіздігі орындалатын сегінеу болса, онда (9.12) сияқты формулаларын пайдалануға болмайтыны анық. Ал осы аталғанның физикалық мағынасын түсіндірейік. Егер ұйтқымаған ( $V$  жөнінде «білмейтін») күйлер кез келген түрде таңдалған болса, онда тіпті, шексіз кіші ұйтқулардың эффектілері өте үлкен болуы мүмкін. Соңғы айтылғанды ескеріп, әдетте, сегінеген жүйені ұйтқумен теңестіреді; егер ұйтқулар тегіс болатыны сонша, ұйтқымаған күйлер сәйкес түрде «дайын» болса, онда түзетулер кіші болады.

Енді  $G_0$  – қарастырғалы отырған деңгейге сәйкес келетін өзіндік векторларымен бұрылған кеңістік векторы болсын. Оған қоса,  $g_0$  – сәтінәу дәрежесі, яғни  $G_0$  өлшемі осы субдеңгейге қатысты сызықтық тәуелсіз өзіндік векторлардың саны болсын.

Тағы да  $P = \sum_{i=1}^{g_0} |i\rangle\langle i|$  проекциялайтын операторын енгізейік, ол осы деңгейге әсер ететін  $g_0 \times g_0$  матрицасы; ал  $Q$  – сол деңгейге ортогональды проекциясын білдіреді.

Ұйтқымайтын  $(H_0 - E^{(0)})|\psi^{(0)}\rangle = 0$  теңдеуі кез келген  $|\psi^{(0)}\rangle$  үшін орынды.

Бірінші ретті теңдеулерді қарастырайық:

$$(H_0 - E^{(0)})|\psi^{(1)}\rangle + (V - \varepsilon_1)|\psi^{(0)}\rangle = 0. \quad (9.26)$$

Мұны  $G_0$ -ға проекциясын жасамай тұрып,

$$P(V - \varepsilon_1)|\psi^{(0)}\rangle = 0 \quad (9.27)$$

ұйтқымайтын теңдеудің арқасында бірінші мүшесі жойылып кететінін ескертеміз. Енді бұл матрицалық теңдеу, шындығында біртекті сызықтық теңдеулер жүйесін аламыз.  $G_0$  кеңістігіндегі кез келген базаны таңдап,

$$|\psi^{(0)}\rangle = \sum_{i=1}^{g_0} c_i |\varphi_i\rangle$$

ұйтқымаған күй ретінде қабылдаймыз. Осы теңдеуді (9.27) қойып және оны  $\langle \varphi_i |$  -ге сол жағынан көбейтіп, нәтижесінде

$$\langle \varphi_i | V | \varphi_j \rangle c_j = \varepsilon_1 c_i \Rightarrow V_{ij} c_j = \varepsilon_1 c_i \quad (9.28)$$

теңдігін аламыз. Осы теңдеу  $\varepsilon_1$  үшін өзіндік мәнінің теңдеуі болады: оның тривиалдық емес шешімі тек

$$\det(V - \varepsilon_1) = 0 \quad (9.29)$$

болғанда табылады. Шындығында (9.29) теңдеуі  $V$  үшін секулярлық теңдеуі болады. Ол әрі сәтінәмеген жағдайлар үшін орынды (9.10) теңдеуінің жалпы түрі және оның  $g_0$  түбірі бар:  $V$  матрицасының өзіндік мәндері. Өзіндік мәндерге сәйкес келетін өзіндік векторлар

$$|\tilde{\varphi}_1\rangle, |\tilde{\varphi}_2\rangle, \dots, |\tilde{\varphi}_{g_0}\rangle$$

*ұйтқымайтын* күйлердің базисін құрайды. Осы базисте ұйтқу эффектісі тегіс болады.

Барлық  $g_0$  түбірлер әртүрлі болса, онда сетінеу толықтай жойылады, ал бастапқы деңгей  $g_0$  субдеңгейлерге жіктеледі. Ал егер өзіндік мәндердің кейбірі тең болып қалса, онда сетінеген бөлігі ғана жойылады.

Бірінші жағдайда  $V$ -ның өзіндік векторларының бірін, мәселен,  $\varepsilon_A$  өзіндік күйіне сәйкес келетін  $|A\rangle$  өзіндік векторын таңдап аламыз. Осы күй ұйтқымаған жағдайдағы  $|\psi^{(0)}\rangle$  күйінің рөлін атқарады. Біз  $Q$ -дің көмегімен (9.26) теңдеуін проекциялаймыз: онда осы күйді ұйтқумен байланысқан  $|k\rangle$  күйімен араластырамыз:

$$\begin{aligned} Q(H_0 - E^{(0)})|\psi^{(1)}\rangle + Q(V - \varepsilon_A)|A\rangle &= 0 \Rightarrow \\ Q(H_0 - E^{(0)})|\psi^{(1)}\rangle + QV|A\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Ал  $Q(H_0 - E^{(0)})Q$  матрицасының ұйтқымаған жағдайындағы тәрізді кері матрицасы болмайды, сондықтан:

$$|\psi^{(1)}\rangle = Q \frac{1}{E^{(0)} - H_0} QV|A\rangle.$$

Енді біз осылайша жалғастыра беріп,

$$\varepsilon_2 = \langle A|VQ \frac{1}{E^{(0)} - H_0} QV|A\rangle \quad (9.30)$$

итерациялық жолмен жоғары ретті түзетулерді табамыз. Мұның маңыздысы:  $Q$  проекциялық операторының әсерінен пайда болған күйлер  $|A\rangle$  күйіне ортогональды болмағанымен, бірақ олар  $G_0$ -ге ортогональды күйлер болады. Енді (9.30) теңдеуінің айқын түрін жазайық, мысалы,

$$\varepsilon_2 = \sum'_m \langle A|V|m\rangle \frac{1}{E^{(0)} - E_m^{(0)}} \langle m|V|A\rangle;$$

онда  $|m\rangle$  күйлерінің  $H_0$  гамильтонианының  $E_m^{(0)} \neq E^{(0)}$  өзіндік мәндеріне сәйкес келетінін, ал  $G_0$  кеңістігіндегі  $|B\rangle$ ,  $|C\rangle$ , ... күйлеріне сәйкес келмейтінін көреміз.

Одан әрі (9.29) секулярлық теңдеуінің өзіндік мәндерінің кейбірі тең болған жағдайды қарастырайық. Онда рәсімді қайталау қажет болады. Ал сетінеген субдеңгейге сәйкес келетін  $|\psi^{(1)}\rangle$  векторы бірмәнді анықталмаған. Енді  $\varepsilon_2$  үшін теңдеуіне кез келген сызықтық комбинациясын қойып, өзге секулярлық теңдеуін аламыз және т.с.с. Бұдан әрі мұны егжей-тегжей талқыламаймыз. Кейде есептерді жеңілдететін жағдайлармен кездесеміз: қандай да симметрияның нәтижесінде екі немесе одан артық күйлер ұйтқудың барлық реттерінде сетінеген болып қала береді. Мұндай жағдайда  $|A\rangle, |B\rangle$  басқаларын да  $V$  диагональдық болатындай етіп таңдауымыз қажет; бұл күйлер араласпайтын болғандықтан, олардың әрбірі үшін алдындағы формулаларды қолдануға болады.

### 9.1.2 Сутегі атомының $n=2$ деңгейі үшін Штарк әффектісі

Сетінеген ұйтқу теориясының әдеттегі және кеңінен танымал мысалы ретінде сутегі атомындағы Штарк әффектісін келтірейік: сыртқы электр өрісінің есебінен деңгейлер (бөлігінің) сетінеуін қарастырайық. Қарапайымдылықты және нақтыланғандықты қамтамасыз ету мақсатында

$$|2s\rangle, |2p,0\rangle, |2p,\pm 1\rangle$$

деңгейлерінің төрт рет сетінейтін  $n=2$  жағдайын алайық. Сыртқы электр өрісі  $z$  осімен бағыттас болсын (бұрыштық моментті кванттаудың осін әрқашан сыртқы электр өрісінің бағытымен таңдай аламыз). Ендеше ұйтқудың түрі:

$$V = -ez\mathcal{E}$$

болады, мұндағы  $\mathcal{E}$  – сыртқы электр өрісі.

#### Таңдау ережелері

Алдымен біз келесі таңдау ережелерін бақылаймыз:

1.  $V$  операторының жұптылығы тақ болғандықтан, ол жұптылықтары қарама-қарсы күйлерді қосады: тек  $s$ - және  $p$ -деңгейлерінің арасындағы матрицалық элементтер ғана нөлге тең емес.
2.  $V$  операторы  $L_z$  операторымен коммутациялайды, сондықтан  $L_z$ -тің өзіндік мәндері бірдей болатын күйлердің арасындағы матрицалық элементтері нөлден өзгеше болады.

Осы айтылғаннан мына матрицалық элементтердің

$$\langle 2s | V | 2p, 0 \rangle$$

және олардың эрмиттік түйіндестері нөлдік емес болатынын көреміз. Атомдық бірліктерде ( $r_B = 1$ ) көрсетілген күйлерге сәйкес келетін толқындық функцияларды жазайық:

$$\psi_{2s} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} e^{-r/2}, \quad \psi_{2p,0} = \frac{r e^{-r/2}}{2\sqrt{6}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \equiv \frac{z e^{-r/2}}{2\sqrt{8\pi}}.$$

Ал  $\cos^2 \theta$  бұрыштық шамасының орташа мәні  $\frac{1}{3}$ -ге тең болатынын ескеріп, матрицалық элементтің мәні

$$\begin{aligned} \langle 2s | V | 2p, 0 \rangle &= -e\mathcal{E} \frac{1}{16\pi} \int d\Omega r^2 dr e^{-r} z^2 \left(1 - \frac{r}{2}\right) = -e\mathcal{E} \frac{1}{16\pi} \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty dr r^4 \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r} = \\ &= -e\mathcal{E} \frac{1}{12} \left(4! - \frac{1}{2} 5!\right) = 3e\mathcal{E} \end{aligned}$$

болатынын есептеп табу қиын емес. Стандарттық бірліктерде оның нәтижесі  $\langle 2s | V | 2p, 0 \rangle = 3e\mathcal{E}r_B$  болады. Ал  $H$  матрицасының  $(2s, 2p)_s$  субкеңістігіндегі  $|2s\rangle, |2p, 0\rangle, |2p, 1\rangle, |2p, -1\rangle$  базистік күйлеріндегі түрі

$$\begin{pmatrix} E_2 & 3\mathcal{E}_{r_B} & 0 & 0 \\ 3\mathcal{E}_{r_B} & E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad (9.31)$$

болады. Бұдан сыртқы электр өрісі сетінеуді толығымен жоймайтынын көреміз. Тек  $|2s\rangle, |2p, 0\rangle$  күйлері араласады және олардың энергиясы ұйтқудың салдарынан ығысады. Энергияға түзетулерді

$$\det \begin{pmatrix} -\varepsilon_2 & 3e r_B \mathcal{E} \\ -3e r_B \mathcal{E} & -\varepsilon_2 \end{pmatrix} = 0$$

анықтаушынан табамыз, яғни

$$\varepsilon_2 = \pm 3e r_B \mathcal{E}.$$

Оларға сәйкес келетін өзіндік күйлер

$$\begin{aligned}
 &|2p, \pm 1\rangle, & E = E_2 \\
 &|A\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p, 0\rangle), & E = E_2 - 3er_B \mathcal{E}, \\
 &|B\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p, 0\rangle), & E = E_2 + 3er_B \mathcal{E}.
 \end{aligned}$$

Осының барлығын *Штарктың сызықтық* эффектісі деп атайды. Мұндағы  $|A\rangle, |B\rangle$  күйлерінің дипольдік моменті нөлдік болмайтынын атап өтейік:

$$\begin{aligned}
 \langle A|z|A\rangle &\approx \frac{1}{2}(\langle 2s|z|2p, 0\rangle + \langle 2p, 0|z|2s\rangle) = -3r_B, \\
 \langle B|z|B\rangle &\approx \frac{1}{2}(\langle 2s|z|2p, 0\rangle - \langle 2p, 0|z|2s\rangle) = +3r_B,
 \end{aligned}$$

мүмкін жұптылықтың өзіндік күйлері болмауы да сондықтан болар. Мұны өз кезегінде жұптылықтың ұйтқыған гамильтонианмен, демек, толық гамильтонианмен де бұзылуының салдары екені түсінікті.

### Ескертулер

Демек, сутегі атомының  $n=2$  деңгейі арақашықтықтары болатын үш деңгейге жіктеледі. Ал  $r_B \approx 0.5 \times 10^{-8} \text{ см}$  болғандықтан, олардың арасы  $3er_B \approx 1.5 \times 10^{-8} \text{ ЭВ}$ -ке тең.

Электр өрісі үшін түзету кіші  $\mathcal{E} \ll 10^9 \text{ В/см}$  болады, ал ұйтқу теориясы дұрыс нәтиже береді. Дәлірек айтатын болсақ:

- (1) Орбиталдық бұрыштық момент пен спиннің арасындағы релятивистік әсерлесу  $2p$  деңгейінің сетінеуін жояды. Енді  $\ell$  жақсы кванттық сан бола алмайды, сондықтан деңгейлердің атаулары  $j^2$  толық бұрыштық моментімен анықталады, мұндағы  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ . Ал  $2p$  деңгейіне спиндер де қосылатындықтан, ол  $j = \frac{3}{2}$  және  $j = \frac{1}{2}$  субдеңгейлеріне жіктеледі. Осы жуықтауда  $2s_{1/2}$  күйі  $2p_{1/2}$  күйімен жіктеліп кетеді. Есептеулерді жүргізгенде кейбір эффектілерді ескермедік (оларды нәзік құрылым деп атайды және олардың реті  $4.5 \times 10^{-5} \text{ ЭВ}$  шамасында болады, *15.3.1-бөлімін қараңыз*).
- (2) Өте әлсіз өрістерді де, олардың мысалы ретінде және  $2p_{1/2}$  деңгейлерінің арасындағы жіктелуін ескеретін эффектілер бар: ядро мен электронның магниттік моменттерінің әсерлесуі, виртуалдық сәулелену мен фотондардың қайта

жұтылуының әсерінен мәжбүрленген жіктелуі. Соңғысын *лэмбтік ығысу* деп атайды (реті шамамен  $10^{-6} \text{ эВ}$ ). Ал  $n=2$  деңгейі үшін Штарк эффектiсi мен шамамен  $475 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$  болатын өрiсi үшін *лэмбтік ығысу* салыстыруға болатындай жағдай туады. Осындай және бұдан да әлсiз өрiстерде кейбiр екi деңгейлi жүйелер үшін сияқты Штарк эффектiсi де квадраттық болып кетедi.

### 9.1.3 Дипольдiк әсерлесулер мен поляризациялану

Зарядтық нейтралды жүйелердiң, мысалы атомдар мен молекулалардың сыртқы электр өрiсiндегi әсерлесуi келесi гамильтонианмен

$$H = H_0 + V; \quad V = -\mathbf{d} \cdot \mathcal{E}; \quad \mathbf{d} = \sum_a e_a \mathbf{x}_a$$

сипатталады, мұндағы  $H_0$  – сыртқы өрiс болмайтын кездегi гамильтониан,  $\mathbf{d}$  – жүйенiң *дипольдiк* моментi. Атом үшін:

$$\sum e_a x_a = \sum_{el} -|e| x_{el} + Z|e| x_N = -|e| \sum_{el} (x_{el} - x_N).$$

Әдетте, шексiз массивтi ядро жуықтауында жүйенiң массалық орталығы ядроның кеңiстiктегi орнымен сәйкес келгендiктен,  $x_N = 0$  деп қабылданады.

$H$  гамильтонианы жұптылыққа қатысты инвариантты деп пайымдайық. Онда гамильтонианмен коммутациялайтын  $P$  жұптылық операторы үшін

$$P \mathbf{x}_a P^\dagger = -\mathbf{x}_a; \quad P^\dagger = P^{-1}; \quad \text{мұндағы } [P, H_0] = 0$$

теңдiктерi орындалады. Бұдан келесi салдарды көреміз:  $H_0$  операторының өзiндiк мәндерiн жұптылықтың да өзiндiк мәндерi ретiнде қабылдауға болады. Ұйтқымаған деңгейлер үшін де осы мiндеттi түрде орындалады және энергияның әрбiр өзiндiк мәндерi нақтылы  $\pm 1$  жұптылыққа ие болады. Бұдан келесi қорытынды жасаймыз: кез келген стационарлық күй үшін дипольдiк оператордың орташа мәні нөлге тең болады. Расында,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \mathbf{d} | \psi \rangle &\equiv \langle \psi | P^{-1} P \mathbf{d} P^{-1} P | \psi \rangle = \langle \psi | P^\dagger \mathbf{d} P^\dagger | \psi \rangle = \\ &= |\eta p|^2 \langle \psi | P \mathbf{d} P^\dagger | \psi \rangle = -\langle \psi | \mathbf{d} | \psi \rangle \end{aligned}$$

демек,

$$\langle \psi | \mathbf{d} | \psi \rangle = 0. \quad (9.32)$$

Жоғарыда көрсетiлген ережелерден жалғыз ерекшелiгi, сутегi атомы үшін  $n=2$  деңгейлерiндегi Штарк эффектiсiн талдауда атап өткенiмiздей: кулондық потенциалындағы  $s$ - және  $p$ - күйлерi тәрiздi

атомның сетінеген деңгейлерінің энергиясы тең болғанымен, жұптылықтары қарама-қарсы. Сетінеудің осындай түрі әдетте, қандай да бір жуықтаудың (жүйенің релятивистік емес өңдеуі тәрізді) нәтижесі болып табылады және толық гамильтонианды қарастырғанда сол сетінеу жойылады. Алайда, кейбір жүйелердің сетінеулерін жақсы жуықтаулармен сипаттала алмайды, ал нақтыланған шарттарда жүйенің тұрақты перманенттік дипольдері жөнінде сөз қозғау заңды болып шығады.

Бақылаушының көзқарасы бойынша сыртқы электр өрісінің шексіз кіші өзгерісіне дипольдік моментінің жауабы тәріздес:

$$\mathbf{D} = -\frac{\partial E}{\partial \mathcal{E}},$$

мұндағы  $E$  – өрістің қатысуындағы жүйенің энергиясы. Егер

$$\lim_{\mathcal{E} \rightarrow \infty} \mathbf{D} = \mathbf{D}_0 \neq 0$$

болса, онда жүйенің  $\mathbf{D}_0$  ішкі (немесе перманенттік) дипольдік моменті бар деп айтады. Сетінеу болмайтын жағдайда (9.32) теңдеуі  $\mathbf{D}_0 = 0$  шартына айналады. Ал  $\mathcal{E}$  өрісіндегі квадраттық мүше  $\mathcal{E}$ -ға пропорционалды диполін тудырады: мұны индукцияланған (мәжбүрленген) диполь деп атайды. Сыртқы электр өрісінің қатысуымен өтетін энергия мен спектрлік сызықтардың вариациясы *Ло Сурдо-Штарк* эффектісі деп аталады.

Енді  $|\psi^{(0)}\rangle$  жұптылығы нақтылы болатын ұйтқымаған күйі болсын. Онда (9.32) теңдеуіне сәйкес сыртқы өрістің әсерінен энергияның бірінші ретінің ығысуы болмайды. Ал екінші реті үшін

$$\delta E^{(2)} = \sum_n' \langle \psi^{(0)} | \mathbf{d} \cdot \mathcal{E} | n \rangle \frac{1}{E_0 - E_n} \langle n | \mathbf{d} \cdot \mathcal{E} | \psi^{(0)} \rangle \equiv -\frac{1}{2} \alpha_{ij} \mathcal{E}_i \mathcal{E}_j$$

өрнегін аламыз. Мұнда *поляризация тензоры*

$$\alpha_{ij} = \sum_n' \langle \psi^{(0)} | d_i | n \rangle \frac{1}{E_n - E_0} \langle n | d_j | \psi^{(0)} \rangle + (j \leftrightarrow i)$$

ұғымы енгізілді. Сондықтан мұндай жүйенің перманентті диполі нөлге тең және тек мәжбүрленген диполі ғана болады:

$$\mathbf{D} = -\frac{\partial E}{\partial \mathcal{E}} \Rightarrow D_i = \alpha_{ij} \mathcal{E}_j.$$

Расында, термині өте орынды табылған: классикалық физикада сыртқы өрістегі электрондар таралуының деформациялануына сәйкес келеді, ал ол өз кезегінде дипольдік моментті тудырады. Мұны екі жолмен тексеруге болады:

- Фейнман-Гелл-Манн теоремасын пайдалану нәтижесінде. Онда  $H = H_0 - \mathbf{d} \cdot \mathcal{E}$  теңдеуінен табамыз:

$$\alpha_{ij} \mathcal{E}_j = -\frac{\partial E}{\partial \mathcal{E}_i} = -\langle \psi | \frac{\partial E}{\partial \mathcal{E}_i} | \psi \rangle = \langle \psi | d_i | \psi \rangle.$$

- Бірінші ретті ұйтқу теориясын қолданудың нәтижесінде. Бірінші ретті жуықтауға сәйкес толқындық функция  $|\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle$  ((9.12) теңдеуінен):

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum'_k |k\rangle \frac{1}{E_0 - E_k} \langle k | -d_i \mathcal{E}_i | \psi^{(0)} \rangle = \sum'_k |k\rangle \frac{\langle k | d_i | \psi^{(0)} \rangle}{E_k - E_0} \mathcal{E}_i.$$

Сондықтан дипольдің орташа мәні келесіге тең болады:

$$\begin{aligned} D_i &= \langle \psi^{(1)} | d_i | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | d_i | \psi^{(1)} \rangle \\ &= \sum'_k \frac{\mathcal{E}_j}{E_k - E_0} \left[ \langle \psi^{(0)} | d_j | k \rangle \langle k | d_i | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | d_i | k \rangle \langle k | d_j | \psi^{(0)} \rangle \right] = \alpha_{ij} \mathcal{E}_j. \end{aligned}$$

Осы формулалардан көретініміздей, қарастырып отырған эффекті шамасының реті:

$$\alpha \sim \frac{e^2 a^2}{\Delta E}; \quad [a] = \text{см}^3.$$

Егер байланыс энергиясының табиғаты электростатикалық болса, онда  $\Delta E \sim e^2 / r_B$ , сондықтан  $a \sim r_B^3$ . Демек, поляризациялануы жүйенің көлеміне пропорционалды болады.

### Ескертулер.

$a_{ij}$  поляризациялану тензоры – симметриялық. Оны өзіне пропорционал және ізсіз (ізі нөлге тең) бөліктерге жіктеуге болады:

$$a_{ij} = a_{kk} \frac{1}{3} \delta_{ij} + \left( a_{ij} - a_{kk} \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \equiv a \delta_{ij} + \beta_{ij}; \quad (9.33a)$$

$$a = \frac{2}{3} \sum'_n \langle \psi^{(0)} | d_i | n \rangle \frac{1}{E_n - E_0} \langle n | d_i | \psi^{(0)} \rangle. \quad (9.33ә)$$

(9.33ә) өрнегіндегі оператор

$$\sum'_n d_i | n \rangle \frac{1}{E_n - E_0} \langle n | d_i$$

әлбетте, бұрылысқа қатысты инвариантты, себебі барлық мүмкін болатын күйлер бойынша қосындылау жүргізіледі. Вигнер-Эккарт теоремасына сәйкес  $|\psi^{(0)}\rangle = |n, J, j_z\rangle$  күйіндегі орташа мәні  $J_z$  -ке тәуелсіз.

Екінші жағынан,  $\beta_{ij}$  тензоры  $J=2$  спині тәрізді түрленеді. Вигнер-Эккарт теоремасы бойынша  $|\psi^{(0)}\rangle = |n, J, j_z\rangle$  әртүрлі күйлеріндегі  $\beta_{ij}$  орташа мәні  $J_i J_j + J_j J_i - \frac{2}{3} \mathbf{J}^2 \delta_{ij}$  мәніне пропорционал, ал оның пропорционалдық тұрақтысы  $B$  болады. Сондықтан электр өрісі  $z$  осімен бағытталса, онда сол өрістің тудыратын ығысуының теңдеуі

$$\delta E(J, J_z) = \frac{1}{2} \mathcal{E}^2 \left[ a + B \left( J_z^2 - \frac{1}{3} J(J+1) \right) \right] \quad (9.34)$$

болады, мұндағы  $a$  – ығысқан деңгейлер массаларының орталығы. Барлық күйлердегі поляризация матрицасының іздерін есептеулер  $B$  – пропорционалдық мүшесінің нөлге тең болатынын көрсетеді. Оны қосымша тексеруге де болады:

$$\frac{1}{2J+1} \sum_{J_z=-J}^{J_z=+J} J_z^2 = \frac{1}{3} J(J+1).$$

Оған қоса,  $|J_z|$  мәндері тең, бірақ  $J_z$  таңбалары қарама-қарсы болатын күйлердің сетінеуі жойылмайтынын атап өтейік. Мұны ұйтқу енгізілген гамильтонианның  $z$  осі қоса кіретін  $xz$  жазықтығына қатысты инвариантты болуының нәтижесі ретінде қарастыруға болатынын білдіреді.

## 9.2 Кванттық өтулер

Егер ұйтқу уақытқа тәуелді болса, онда өткен бөлімде зерттелген жағдайдан айырмашылығы *сапалы* өзгеше бөлек болады. Жүйенің энергиясы енді сақталмайды және әртүрлі деңгейлер арасында кванттық өтулерге тыйым салынбайды. Біз үшін негізгі мәселе – жүйеге кіші ұйтқу қосылғандағы бірлік уақыт интервалында сол деңгейлер арасындағы өту жылдамдықтарын есептеу болып табылады. Енді гамильтонианның түрін:

$$H = H_0 + V(t)$$

деп жорамалдап, ал ұйтқымаған гамильтониан деңгейлерінің энергиялары  $|k\rangle$  және өзіндік векторлары  $E_k$

$$H_0 |k\rangle = E_k |k\rangle$$

белгілі болсын делік. Жүйенің уақыт бойынша эволюциясы

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle \Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (9.35)$$

теңдеуімен анықталады. Бастапқыда ( $t=0$  уақытында) жүйе  $H_0$  операторының  $|\Psi(0)\rangle = |i\rangle$  өзіндік мәндерінің бірінде табылсын. Ендеше жүйенің  $t$  уақытында  $k$  күйіндегі табылуының ықтималдылығы қалай анықталады? Кванттық механиканың стандарттық ережесіне сәйкес ықтималдылық мынаған тең болады:

$$P_{ki}(t) = |\langle k | \Psi(t) \rangle|^2.$$

Ал  $\{|k\rangle\}$  ұйтқымаған өзіндік векторлары толық жиынын құрайтын болғандықтан, біз қашан да толқындық функцияны осы жиын бойынша жіктей аламыз:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k b_k(t) |k\rangle; \quad P_{ki} = |b_k(t)|^2, \quad (9.36)$$

мұндағы  $b_k(t)$  – жіктеу коэффициенттері уақытқа тәуелді. Осы  $b_k(t)$  коэффициентін табу үшін оны (9.35) Шредингер теңдеуіне апарып қоямыз. Әдеттегідей, уақытқа тәуелді ұйтқымаған күйлерін көбейткіш түрінде жазу ыңғайлы:

$$b_k(t) = e^{-iE_k t/\hbar} a_k(t); \quad P_{ki} = |b_k(t)|^2,$$

онда  $a_k(t)$  үшін теңдігіміз  $a_k(0) = \delta_{ki}$  түріне өзгереді:

$$\boxed{i\hbar \dot{a}_k = \sum_s e^{iE_k t/\hbar} \langle k | V | s \rangle e^{-iE_s t/\hbar} a_s \equiv V_{ks}^I(t) a_s,} \quad (9.37)$$

мұнда,  $V_{ks}^I$  деп ұйтқымаған күйлердің арасындағы ұйтқыған потенциалдың матрицалық элементін белгіледік, ол  $e^{i\omega_{ks} t}$  көбейткішін де ескереді:

$$V_{ks}^I(t) = e^{i\omega_{ks} t} \langle k | V | s \rangle = e^{i\omega_{ks} t} V_{ks}, \quad \omega_{ks} = \frac{E_k - E_s}{\hbar}.$$

(9.37) теңдеуінің соңғы бөлігінде біз Эйнштейннің конвенциясын енгіздік, яғни қайталанатын индекстер бойынша қосындылау амалы орындалады. Одан әрі де осы конвенцияны қолданатын боламыз.

Бастапқы шарты (9.37) болатын  $a_k(t)$  үшін теңдеуін интегралдық теңдеуіне

$$a_k(t) = a_k(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ks}^I(\tau) a_s(\tau) d\tau$$

түрлендіріп, қайта жазуға келеді. Оны дәлелдеу жеңіл. Осы пішінде  $a_k(t)$  үшін рекурсивтік түрде шешімін табуға мүмкіндік береді:

$$a_k^{(n+1)}(t) = a_k(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ks}^I(\tau) a_s^{(n)}(\tau) d\tau; \quad a(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} a^{(n)}(t),$$

мұндағы  $a_s^{(n)}$  –  $V$  потенциалының  $n$ -ші ретті дәрежесінің эффектiлерiн ескеретiн  $a_k$ -лар үшiн шешiмдерi. Расында, ең төменгi реттi жуықтау шешiмдерi үшiн

$$a_k^{(1)}(t) = \begin{cases} -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ki}^I(\tau) d\tau; & (k \neq i); \\ 1 & (k = i) \end{cases}; \quad (9.38a)$$

$$a_k^{(2)}(t) = \begin{cases} -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{ki}^I(\tau) d\tau - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 V_{ks}^I(\tau_1) V_{si}^I(\tau_2); & k \neq i \\ 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 V_{is}^I(\tau_1) V_{si}^I(\tau_2) & k = i \end{cases} \quad (9.38\text{ә})$$

болады. Біз екінші ретті формула үшін унитарлық шектеудің (яғни толық ықтималдылықтың) сақталатындығын дәлелдеуді оқырманның өзіне қалдырамыз.

### 9.2.1 Ақтық интервалға созылатын ұйтқу

Егер ұйтқу тек уақыттың шектеулі интервалында ғана созылатын болса, онда бастапқы  $i$ -ші күйдегі жүйенің  $t = \infty$  уақытында  $k$ -ші күйде ( $k \neq i$ ) табылуы ықтималдылығының ең төменгі ретті

$$P_{i \rightarrow k} = |a_{ki}^{(1)}(\infty)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt V_{ki} e^{i\omega_k t} \right|^2$$

осылайша өрнектеледі.

Ұйтқудың кейбір жағдайларын қарастыру қызықты да:  $t = -\infty$  ұйтқу болмайды, ал  $t = +\infty$  жақындағанда ол (кіші) тұрақты операторға жуықтайды. Мұндай жағдайларда ақтық жүйенің бастапқыдан кішігірім айырмашылығы болады, сондықтан энергияның деңгейлері мен энергияның өзіндік мәндерінің вариациясын сәйкесінше, яғни *өтудің жылдамдығын* есептеп табуды қажет етеді. Расында, (9.38a) теңдігін бөлшектеп интегралдағанда

$$a_{ki}^{(1)} = -\frac{V_{ki}(\infty)e^{i\omega_{ki}t}}{\hbar\omega_{ki}} + \int_{-\infty}^t dt' \frac{\partial V_{ki}}{\partial t'} \frac{e^{i\omega_{ki}t'}}{\hbar\omega_{ki}};$$

$$a_{ii}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' V_{ii} \simeq -\frac{i}{\hbar} V_{ii}(\infty)t$$

болатынын табамыз. Онда толқындық функция мынадай болады:

$$\begin{aligned} \psi(t) &\simeq \left(1 - \frac{i}{\hbar} V_{ii}(\infty)t\right) \psi_i^{(0)}(t) = \\ &= -\sum_k' \frac{V_{ki}(\infty)e^{i\omega_{ki}t}}{\hbar\omega_{ki}} \psi_k^{(0)}(t) + \sum_k' \left( \int_{-\infty}^t dt' \frac{\partial V_{ki}}{\partial t'} \frac{e^{i\omega_{ki}t'}}{\hbar\omega_{ki}} \right) \psi_k^{(0)}(t). \end{aligned}$$

Бірінші мүше энергия деңгейінің ығысуын білдіреді, себебі ол осы ретте

$$\simeq e^{-iV_{nn}(\infty)t/\hbar} \psi_n^{(0)}(t) = e^{-i(E_n^{(0)} + V_{nn}(\infty))t/\hbar} \psi_n^{(0)}(0)$$

шамасына пропорционал, ал екінші мүше – өзіндік функцияларға (араластыруының) бірінші ретті түзетуі болып табылады. Осы реттік толқындық функция  $t$  уақыт моментінде  $H_0 + V(\infty)$  асимптотикалық гамильтонианның өзіндік функциясы болады:

$$\psi(t) \simeq \tilde{\psi}_n(t) + \sum_k' \left( \int_{-\infty}^t dt' \frac{\partial V_{ki}}{\partial t'} \frac{e^{i\omega_{ki}t'}}{\hbar\omega_{ki}} \right) \psi_k(t). \quad (9.39)$$

Демек, (бастапқы)  $i$ -ші деңгейінен (ақтық)  $k$ -ші деңгейіне өтудің ықтималдылығы келесіге тең болады:

$$P_{n \rightarrow k} = \left| \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \tilde{\psi}_k(t) | \psi(t) \rangle \right|^2 = \left| \int_{-\infty}^t dt' \frac{\partial V_{ki}}{\partial t'} \frac{e^{i\omega_{ki}t'}}{\hbar\omega_{ki}} \right|^2. \quad (9.40)$$

### Ескертулер

- Сондықтан осы жағдайлар қарастырылған ұйтқудың статистикалық теориясы (алдындағы бөлім) және уақытқа тәуелді ұйтқу теориясы мен кванттық өтулерін біріктіреді.
- Ал баяу вариациялау шегінде (адиабаталық шек) (9.40) теңдеуінен

$$P_{n \rightarrow k} \simeq 0, \quad k \neq n \quad (9.41)$$

болатынын көреміз, егер:

$$\left| \frac{\partial V_{ki}}{\partial t} \right| \frac{1}{|V_{ki}|} \ll \omega_{ki}. \quad (9.42)$$

Расында,  $\omega_{ki}$  шамасымен салыстырғанда  $V_{fi}$  осындай шарттарды қанағаттандыратын Фурье-компоненттері болмайды, ал (9.39) теңдеуіндегі екінші мүше нөлге ұмтылады. Бұл адиабаталық теорема деп аталады және жалпы нәтиженің мысалы (міндетті түрде ұйтқу теориясымен байланысты болмайды) болады: гамильтонианның баяу өзгерісінің шегінде стационарлық күй лездіктің өзіндік күйі болып қалады (12.3-бөлімін қараңыз).

- Импульстік жуықтаудың кері, яғни гамильтонианның бір сәтте өзгеруі жағдайында, (9.39) теңдеуіндегі екінші мүшені интеграл астынан шығаруға болады, өйткені  $\frac{\partial V_{ki}}{\partial t}$  шамасы  $t = t_0$  төңірегіндегі өте қысқа уақыт аралығында нөлге ұмтылмайды. Осылайша

$$a_{ki} \approx \frac{e^{i\omega_{ki}t_0}}{\hbar\omega_{ki}} \int_{-\infty}^t \frac{\partial V_{ki}}{\partial t} dt = \frac{e^{i\omega_{ki}t_0}}{\hbar\omega_{ki}} V_{ki}$$

болатынын аламыз және өту жылдамдығы үшін табамыз:

$$P_{i \rightarrow k} = |a_{ki}|^2 = \frac{|V_{ki}|^2}{\hbar^2 \omega_{ki}^2}. \quad (9.43)$$

Осы нәтиженің импульстік жуықтаудың жалпы бекінімінде де тұрақты, яғни даму үшін уақыттың аз мөлшері табылатын болса, онда осы уақыт интервалында толқындық функция инвариантты болатынын көрсету қиын емес.

## 9.2.2 Периодтық ұйтқу

Ұйтқудың өте маңызды бөлімі уақыт бойынша периодты өзгертін ұйтқыған потенциал жағдайына сәйкес келеді. Ұйтқуды  $t=0$  моментінде қосылады деп пайымдайық, онда осындай периодпен берілген өзіне түйіндес оператордың жалпы түрі

$$V(t) = \theta(t) [F e^{-i\omega t} + F^\dagger e^{i\omega t}] \quad (9.44)$$

болады. Осы теңдікті (9.38a) теңдеуіне қойып,

$$a_k^{(1)}(t) = -\frac{1}{\hbar} \left[ F_{ki} \frac{e^{i(\omega_{ki}-\omega)t} - 1}{\omega_{ki} - \omega} + F_{ki}^\dagger \frac{e^{i(\omega_{ki}-\omega)t} - 1}{\omega_{ki} + \omega} \right] \quad (9.45)$$

өрнегін аламыз. Көріп отырғанымыздай, (9.45) теңдеуінің екі мүшесі бар. Олар  $\omega = \pm\omega_{ki}$  болғанда әрқайсысы бірінен-бірі арта

бастайды: мұны *резонанстық жиіліктер* деп атайды.  $\omega > 0$  жағдайында  $\omega = \omega_{ki} = \frac{1}{\hbar}(E_k - E_i)$  жиіліктері энергиясы артатын өтулерге сәйкес келеді, яғни жүйе ұйтқу энергиясын жұтады. Ал  $\omega = -\omega_{ki}$  жиіліктері энергияның жүйеден шығатын өтулеріне сәйкес келеді. Жоғарыда келтірілген формуланың мәні мен оның салдары бастапқы немесе ақтық күйлердің спектрлері дискретті ме, жоқ әлде үздіксіз бе, міне, осыған байланысты.

### 9.2.3 Дискреттік спектрдегі өтулер.

Енді (9.45) теңдеуіндегі  $i$  және  $k$  күйлерінің екеуі де  $E_i < E_k$  дискреттік спектріне сәйкес болсын деп пайымдайық. Алдымен (9.45) теңдеуін төмендегідей

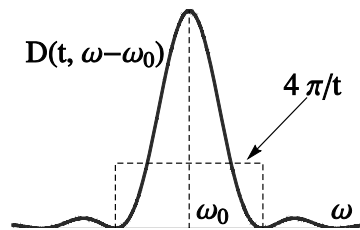
$$a_k^{(1)}(t) = -\frac{1}{\hbar} \left[ e^{i(\omega_{ki}-\omega)t/2} F_{ki} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ki}-\omega}{2}t\right)}{\frac{\omega_{ki}-\omega}{2}} + e^{i(\omega_{ki}+\omega)t/2} F_{ik}^* \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ki}+\omega}{2}t\right)}{\frac{\omega_{ki}+\omega}{2}} \right]$$

қайта жазайық. Онда өту ықтималдылығын

$$P_k(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left[ |F_{ki}|^2 D(t, \omega_{ki} - \omega) + |F_{ki}|^2 D(t, \omega_{ki} + \omega) + 2 \operatorname{Re} \left[ F_{ik} F_{ki} e^{-i\omega t} \right] \sqrt{D(t, \omega_{ki} - \omega) D(t, \omega_{ki} + \omega)} \right]$$

түрінде жаза аламыз, мұндағы

$$D(t, a) = \left( \frac{\sin \alpha t / 2}{\alpha / 2} \right)^2. \quad (9.46)$$



9.1-сурет.  $D(t, \omega - \omega_0)$  функциясының графигі

$D(t, \alpha)$  функциясының түрі кәдуілгі дифракциялық модельге сәйкес келеді: ал  $\alpha = 0$  нүктесінде айқын максимумге ие болады, функцияның сол нүктедегі мәні:  $t^2$ . 9.1-суретін қараңыз. Оның

бірінші түйіні  $\alpha = \frac{2\pi}{t}$  нүктесінде болғандықтан, онда  $\frac{4\pi}{t}$  қисықтың ені ретінде қабылдайық:

$$\max(D(t, a)) = t^2; \quad \Delta a = \Delta \omega \sim \frac{4\pi}{t} \dots$$

Сондықтан,  $\omega$  функциясының екі резонанстық жиіліктерінің  $\omega = \pm \omega_{ki}$  болғаны тәрізді,  $P_k(t)$  функциясының да екі шыңы бар.

### Резонанстық емес жиіліктер

Егер  $\omega$  резонанстық емес облыста жататын болса, онда (9.46) теңдеуіндегі екі мүше де өз үлестерін қосады. Дербес жағдайда жоғары жиіліктер және  $t \gg 1/\omega$  үшін  $\overline{\sin^2 x} = \frac{1}{2}$ ,  $\overline{\cos x} = 0$  болады:

$$P_{ki} \approx \frac{4|F_{ki}|^2}{\hbar^2 \omega^2},$$

мұндағы  $\omega \gg \omega_{ki}$ .

Өзге шегінде  $\omega = 0$ , яғни ұйтқу тұрақтысы  $t=0$  моментінде тең болады:

$$P_k(t) = \frac{|\mathcal{F}_{ki}|^2}{\hbar^2} \left( \frac{\sin \omega_{ki} t / 2}{\omega_{ki} / 2} \right)^2,$$

мұндағы  $\mathcal{F} = F + F^\dagger$ .

### Резонанстық жиіліктер

Енді  $t \rightarrow 0$  шегінде

$$a_k \rightarrow -\frac{1}{\hbar} \mathcal{F}_{ki} t; \quad P_k \rightarrow \frac{|\mathcal{F}_{ki}|^2}{\hbar^2} t^2 \tag{9.47}$$

шектік мәнінде ықтималдылық  $t$  квадратына пропорционал артатынын көреміз; әлбетте, мұндай нәтиже ұзақ мерзімде орындала бермейді, себебі ықтималдылықтан әрбір  $k$  үшін  $P_k \leq 1$  (унитарлық) шартын қанағаттандыруы қажет. Сондықтан бірінші ретті формуласының орындалуы шартын жазамыз:

$$t < T_L = \frac{\hbar}{|F_{ki}|}. \tag{9.48}$$

Біз  $t$ -ның кіші мәндеріндегі жағдай үшін дәлірек анықтауымыз қажет. Егер  $\omega$  жиілігі  $|\omega_{ki}|$  резонанстық жиілігінен алшақ облыста, оның аргументіндегі синус  $t \ll 1/\max(|\omega_{ki}|, \omega)$  үшін кіші болады. Ал шындығында, үлкен және кіші жиіліктер үшін (9.48) теңдеуінің шектері аса маңызды емес:

а)  $\omega \gg |\omega_{ki}|$  үшін дәрежелік қатарға жіктеудің тек  $t \ll 1/|\omega_{ki}|$  болғанда ғана мағынасы болады. Алайда, бұл (9.48) теңсіздігінен әлдеқайда кіші. Сондықтан ұйтқу теориясының орынды болуы үшін  $|F_{ki}| \ll \omega_{ki} \hbar$  шартын қанағаттандыруы қажет.

ә)  $\omega \gg |\omega_{ki}|$  үшін жіктеуіміз  $t \ll 1/|\omega|$  теңсіздігінен әлдеқайда кіші, ал ол (9.48) теңсіздігінен *афортиори* кіші.

Басқаша айтатын болсақ, онда резонанстық облыс шегінен алыс облыстарда (9.48) ешқандай сұрақтар туындамайды, ал резонанстық жиіліктер аумағында ұйтқу формулаларының орындылығы соншалықты айқын емес. Мәселені одан әрі зерттеу үшін өзге резонанстық жуықтауды қолданамыз, онда резонанстық емес деңгейлер ескерілмейді. Ал қалған бағалау жүйесі дәл осындай, яғни ұйтқу теориясын пайдаланбаймыз.

#### 9.2.4 Екі деңгей арасындағы резонанстық осциллятор

Енді резонанстық өту жиілігінде жататын, жиілігі  $\omega$  болатын гармоникалық ұйтқуды қарастырайық. Жоғарғы күйді  $f$  деп белгілейік. Осы күйлердің уақыт бойынша эволюциясы (9.45) теңдеуіндегі  $i \rightarrow f$  өтуіне  $e^{-i\omega t}$  пропорционалды мүшесімен, ал  $f \rightarrow i$  кері өтуінде  $e^{+i\omega t}$  мүшесімен анықталады. Біз жуықтаудың жақсы ретінде  $2 \times 2$  субкеңістігін қарастырумен шектелуімізге болады. Онда гамильтонианның ең жалпы түрі:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} E_0 & F e^{-i\omega t} \\ F^* e^{i\omega t} & -\frac{1}{2} E_0 \end{pmatrix}$$

болады. Ыңғайлылық мақсатында

$$E_0 = \hbar \omega_0; \quad F = \frac{\hbar \omega_1}{2}$$

белгілеулерін енгізейік. Осылайша  $\omega_0$  резонанстық жиілік болып, ал гамильтонианымызды

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \cos \omega t - i \omega_1 \sin \omega t \\ \omega_1 \cos \omega t + i \omega_1 \sin \omega t & -\omega_0 \end{pmatrix} \\ &\equiv \frac{\hbar}{2} \left( \omega_0 \sigma_z + \omega_1 (\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t) \right) \end{aligned}$$

түрінде жазуымызға болады. Осылайша тұжырымдалған есеп  $z$  осінің бойымен бағытталған сыртқы магнит өрісіндегі және  $(xy)$

жазықтығында айналатын спині  $-\frac{1}{2}$ , магнит моменті  $-g\mu$  болатын жүйеге келеді:<sup>2</sup>

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{z} + \mathbf{B} \perp(t), \quad \mathbf{B} \perp(t) \equiv B_1(\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t),$$

Біз осы есептің дәл шешімін таба аламыз. Олардың (шешімдердің) ішіндегі ең ыңғайлы әдісі уақытқа тәуелді унитарлық түрлендіру болып табылады:

$$|\Psi^R(t)\rangle = R(t)|\Psi(t)\rangle;$$

Ендеше гамильтонианның түрі

$$H^R = R(t)HR^\dagger(t) - \hbar \frac{\omega}{2} \sigma_z = \frac{\hbar}{2}((\omega_0 - \omega)\sigma_z + \omega_1 \sigma_x)$$

болып, ол уақытқа тәуелді болмайды. Алдымен эволюция операторын есептеп тауып алып

$$U^R(t, 0) = e^{-iH^R t/\hbar} = e^{-i((\omega_0 - \omega)\sigma_z + \omega_1 \sigma_x)t/2},$$

оны қайта  $R(t)^{-1}$  арқылы түрлендіруімізге болады. Мұны дәлелдеу оңай, ол үшін  $H^R$  диагональды болатын базасын алу жеткілікті. Нәтижесінде (толығырақ 12.2-бөлімін қараңыз):

$$U_R = \cos(\Omega t) + i \frac{\omega - \omega_0}{2\Omega} \sin(\Omega t) \sigma_z - i \frac{\omega_1}{2\Omega} \sin(\Omega t) \sigma_x,$$

мұндағы

$$\Omega = \sqrt{\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{4} + \frac{\omega_1^2}{4}} = \sqrt{\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{4} + \frac{|F|^2}{\hbar^2}}$$

Раби жиілігі. Өтудің ықтималдығын табу үшін:

$$P_{fi}(t) = |\langle + | U_S(t) | - \rangle|^2 = |\langle + | U_R(t) | - \rangle|^2 = \frac{|F|^2}{\hbar^2 \Omega^2} \sin^2(\Omega t); \quad (9.49a)$$

$$P_{ii}(t) = 1 - P_{fi}(t) \quad (9.49\theta)$$

(9.49) нәтижесінің маңызды ерекшелігі бар. Ол ұйтқыған емес, дәл нәтижесі болып табылады. Әрине, өзге резонанстық емес деңгейлерді және екі күйі бар жуықталған жүйесін ескермегенін қайталап айтамыз. Дербес жағдайда, резонанстық жиілік  $\omega = \omega_0$

<sup>2</sup> Осы жүйе ядролық магниттік резонанс немесе қысқаша ЯМР құбылысында орын алады. Атомдардың осы тәрізді жарықтың резонанстық жұту (немесе шығару) құбылыстары лазерлік оптикада және атомдық физикада, лазерлік салқындату, оптикалық толтыру және т.с.с. орталық рөл атқарады.

үшін тербелістер шамасы  $|F| = \Omega \hbar$  максималдық мәнге жетеді. Тіпті,  $F \ll E_0 (\omega_1 \ll \omega_0)$  шексіз кіші ұйтқуы үшін  $T_{1/2} = \pi / \Omega$  жартылай периодында спин-жоғары күйі спин-төменге айналуының (және керісінше) ықтималдылығы бірге тең болады. Атап өтейік, алдыңғы бөлімде ескертілген (унитарлық) мәселе бастапқы  $t \ll 1 / \Omega$  уақыттарда (9.47) теңдеуіндегідей квадраттық түрде артқанына қарамастан, осы әдісте кездеспейді.

### 9.3 Континуумдағы өтулер

Жоғарыдағы формулалар континуумдағы өтулерге қолдану үшін де сәйкес келетін қайта интерпретациялауды талап етеді: мұндағы негізгі мәселе – енді  $|a_k|^2$  – ықтималдылықты емес, *ықтималдылық тығыздығын* білдіреді.

Алдымен күйдің нормасына қатысты белгілеуді түзетіп алайық. Ол үшін кванттық сандардың толық жиынтығын  $\alpha$  және оларға сәйкес келетін күйлерін  $|\alpha\rangle$  деп белгілейік. Біз мұндай нормалауды

$$\langle \alpha' | \alpha \rangle = N(\alpha) \delta(\alpha - \alpha') \quad (9.50)$$

жиі пайдаланатын боламыз. Онда проекциялаушы оператор берілген  $\alpha$  мәнінің төңірегіндегі күйге

$$|\alpha\rangle \frac{d\alpha}{N(\alpha)} \langle \alpha | \equiv |\alpha\rangle d\Phi \langle \alpha |$$

әсер етеді, мұндағы  $d\Phi$  –  $|\alpha\rangle$  күйінің төңірегіндегі *фазалық кеңістік*. Ал  $|\alpha\rangle$  төңірегіндегі күйлерге өту ықтималдылығының өрнегі

$$dP_\alpha = |\langle \alpha | \Psi(t) \rangle|^2 d\Phi$$

болады.

Гармоникалық (периодтық) ұйтқу (9.44) жағдайында өзінің резонанстық үлесін шекаралап (және  $E_\alpha > E_i$  болғанға дейін),  $|i\rangle$  күйінен  $|\alpha\rangle$  төңірегіндегі күйге өту ықтималдылығы келесі өрнекпен беріледі:

$$dP_\alpha = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \alpha | F | i \rangle|^2 \left( \frac{\sin\left(\frac{\omega_{\alpha i} - \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{\alpha i} - \omega}{2}} \right)^2 d\Phi.$$

Формальды түрде осы өрнек шексіз кіші болғандықтан, Дирактың дельта-функциясының көрінісін пайдаланып:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(xt)}{\pi t x^2} = \delta(x), \quad (9.51)$$

$t$ -ның үлкен мәндеріндегі шекті анықтаймыз, яғни:<sup>3</sup>

$$\left( \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ai} - \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{ai} - \omega}{2}} \right)^2 \rightarrow \pi t \delta\left(\frac{\omega_{ai} - \omega}{2}\right) = 2\pi \hbar t \delta(E_\alpha - E_i - \hbar\omega).$$

Сондағы табатын өрнегіміз:

$$dP_\alpha = t \frac{2\pi}{\hbar} |F_{ai}|^2 \delta(E_\alpha - E_i - \hbar\omega) d\Phi.$$

Бұдан келесі қорытынды жасауымызға болады: уақыттың бірлік интервалындағы өтудің ықтималдылығы төмендегідей өрнектеледі

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\Phi. \quad (9.52)$$

Мұны Фермидің *алтын ережесі* деп атайды.

### Ескертулер

- (1) (9.52) өрнегіндегі дельта-функция энергия сақталуының айқын мағынасын білдіреді: сыртқы өрістің  $\hbar\omega$  энергия квантын (электромагниттік ұйтқу жағдайында – фотон) жүйе жұтып, энергиясы одан жоғары  $E_f = E_i + \hbar\omega$  деңгейіне өтеді.
- (2) резонанс жағдайында (9.44) өрнегінің екінші мүшесі (мұндағы  $E_f < E_i$ ) энергия квантының бөлінуіне сәйкес келеді, онда дельта-функцияның аргументі  $E_f - E_i + \hbar\omega$  болады.
- (3) күткеніміздей, (9.52) формуласы (9.50) теңдеуіндегі таңдалған күйлердің нормалануына тәуелді емес: нормалаушы көбейткіш  $|f\rangle$  (шындығында, оның квадраты) және  $d\Phi$  арасында нөлге тең болып кетеді. Бастапқы күй бірге нормаланған, кері жағдайда формула  $\langle i|i\rangle$  -ға бөлінуі қажет.

<sup>3</sup>  $\delta(cx) = \delta(x)/c$  болатынын еске саламыз.

(9.52) формуласындағы дельта-функциясын ақтық күйлер бойынша интегралдау нәтижесінде жоя аламыз. Енді  $\alpha = \{E, \beta\}$  (мұндағы  $\beta$  – энергиядан басқа кванттық сандар) ретінде белгілейік және  $|\alpha\rangle$  күйін бөліп,  $d\Phi$ -ті қайта жазайық:

$$d\Phi = \rho(E, \beta) dE d\beta,$$

онда  $E$  бойынша интегралдап, нәтижесінде келесіні аламыз:

$$\boxed{dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \rho(E_f = E_i + \hbar\omega, \beta) d\beta,} \quad (9.53)$$

мұнда энергиялары бірдей болатын барлық ( $\beta$ ) күйлері бойынша қосындылау жүргізіледі. Ал  $\beta$  бойынша интегралдау – өтулердің толық жылдамдығын береді. Ескертетін жағдай,  $\rho$  күйлердің тығыздығындағы бірінші аргумент энергияның сақталуы салдарынан орнатылған.

### 9.3.1 Күйдің тығыздығы

Ақтық күйде еркін бөлшек болған жағдайда

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}; \quad \langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

күйлердің тығыздығы жеңіл анықталуы мүмкін. Фазалық кеңістігіміз:

$$d\Phi = \frac{d^3\mathbf{P}}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Ақтық күйдің түрі:

$$E_f = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + E_R,$$

мұндағы  $E_R$  – тыныштық күйіндегі энергиясы. Ал  $m dE = p dp$  қатынасынан

$$\delta(E_f - E_i) d\Phi = \frac{p^2 dp d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \delta\left(\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + E_R - E_i\right) \rightarrow \frac{d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} m p_f \quad (9.54)$$

өрнегін аламыз. Мұнда Фермидің формуласы пайдаланылды. (9.54) теңдеуіндегі  $p_f \equiv \sqrt{2m(E_i + E_R)}$  және  $d\Omega$  – сәулеленген бөлшектің  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$  денелік бұрышы.

## 9.4 Ыдыраулар

Енді  $|i\rangle$  бастапқы күйді  $-H_0$  операторының нормаланатын өзіндік мәнін («байланысқан күй») қарастырайық.  $H_0$  гамильтонианының спектрі үздіксіз де, дискретті де болады деп пайымдалық. Онда  $V$  ұйтқуы дискреттік спектрден үздіксізге дейінгі күйлерді байланыстыра алады. Осы жағдай үшін Фермидің алтын ережесіне сәйкес: бірлік уақыттың аралығындағы өтудің ықтималдылығы - өтудің жылдамдығымен анықталады:<sup>4</sup>

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) d\Phi.$$

Барлық ақтық күйлер бойынша қосындылап, толық өту жылдамдығын табамыз:

$$W = \sum_f W_{i \rightarrow f} \equiv \frac{\Gamma}{\hbar} \equiv \frac{1}{T}, \quad (9.55)$$

мұндағы енгізілген  $\Gamma$  шамасының өлшемі - энергия; оны *ыдыраудың ені* деп атаймыз, ал мағынасы жуық арада түсіндірелетін болады.

Ал енді  $t=0$  моментінде  $i$  күйінде болатын жүйені қарастырайық. Егер осы күйдің өту ықтималдылығын өрнектейтін (9.55) шарты орындалатын болса, онда  $t$  моментіндегі жүйенің осы күйде қалуының ықтималдылығы төмендегідей өзгеруі керек:

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\Gamma}{\hbar} P(t) \Rightarrow P(t) = e^{-\Gamma t/\hbar} P(0). \quad (9.56)$$

Осы нәтижені формальдық түрде келесідей интерпретациялауға болады:  $V$  әсерлесуінің есебінен ұйтқымаған гамильтонианның  $E_i$  өзіндік мәні  $-i\Gamma/2$  жорамал мәнін иеленеді. Жүйенің тап осы күйдегі табылуының ықтималдылығы кванттық механиканың стандарттық ережелеріне сәйкес

$$P_i(t) = |\psi(t)|^2 = \left| \psi(0) e^{-it(E_i - i\frac{\Gamma}{2})/\hbar} \right|^2 = P(0) e^{-\Gamma t/\hbar} \quad (9.57)$$

теңдігімен өрнектеледі. Егер жүйенің ыдырау каналдары бірнеше

<sup>4</sup> Бұл көбейткіштердің өлшемдерін тексеруге арналған жақсы жаттығу: ақтық күйіндегі нормалаушы көбейткіш  $d\Phi$ -тағы теңгеруші көбейткішінде ескерілетінін көрсеткенбіз. Ал  $|i\rangle$  күйі өту жылдамдығын өлшеу үшін өлшемі дұрыс

болатындай  $[W] = [\hbar^{-1}] [V]^2 [\delta(E)] = \frac{1}{E \cdot t} E^2 \frac{1}{E} = \frac{1}{t}$  етіп нормаланған.

болса, онда әртүрлі «ыдыраудың парциалдық ендерін»  $\Gamma_k = W_{i \rightarrow f_k} \hbar$  анықтауға болады; ал олардың қосындысы (9.57) теңдеуінде пайда болатын *ыдыраудың толық енін* береді.

Ықтималдылық тұрғысынан мұның қаншалықты зерделі болуына тәуелсіз, (9.55) теңдеуі дәлел бола алмайды. Ықтималдылықтың анықтамасы статистикалық механикадағы тәрізді макроскопиялық түрінде қолданылған. Ықтималдылықтың кванттық механикалық анықтамасы  $P(t)$ :

$$P(t) = |\langle i | \psi(t) \rangle|^2; \quad |\psi(0)\rangle = |i\rangle$$

болып табылады. Кез келген жағдайда (9.56) теңдеуі дәл бола алмайтынын біз білеміз, себебі кіші уақыттарда өтудің ықтималдылығы (9.56) өрнегінен көретініміздей  $t$ -ға пропорционал емес,  $t^2$ -ға пропорционал болады. Егер  $\Delta$  – есептің типтік уақыттық масштабы болса, онда Фермидің формуласы тек  $t \gg \hbar / \Delta$  болғанда ғана орынды.

Енді ұйтқу теориясы тұрғысынан мәселені қайта қарастырайық. Онда, (9.37) теңдеуіне қайта оралайық:

$$i\hbar \dot{a}_i = \sum_a \langle i | V | \alpha \rangle e^{it(E_i - E)/\hbar} a_\alpha; \quad (9.58a)$$

$$i\hbar \dot{a}_\alpha = \langle \alpha | V | i \rangle e^{-it(E_i - E)/\hbar} a_i. \quad (9.58\theta)$$

9.2-бөліміндегі табылған ұйтқудың шешімін теңдіктің оң жағын  $a_i(0) = 1$ ,  $a_\alpha(0) = 0$  бастапқы шарттарымен алмастыруға негізделген болатын. Енді осындай итерациялық рәсімді қолданбай-ақ теңдеудің шешімін табуға тырысайық. Жоғарыда айтылған тұспалдаманы қабылдай отырып, шешімін келесі түрде іздестіріп көрейік:

$$a_i = \exp \left[ -\frac{it}{\hbar} \left( \delta E - i \frac{\Gamma}{2} \right) \right]. \quad (9.59)$$

Экспонентаның көрсеткішінде нақты бөлігі  $\delta E$  және жорамал бөлігі  $-\Gamma/2$  болатын кез келген жорамал санды жаздық, осы өрнекті (9.58 $\theta$ ) апарып қойып және оны интегралдаған соң,  $a_\alpha(t)$  үшін келесі өрнекті аламыз:

$$a_\alpha(t) = \frac{\langle \alpha | V | i \rangle}{E_i - E + \delta E - i \frac{\Gamma}{2}} \left[ e^{-\frac{it}{\hbar} \left( E_i - E + \delta E - i \frac{\Gamma}{2} \right)} - 1 \right]$$

және оны (9.58a) теңдеуіне қоямыз

$$\delta E - i \frac{\Gamma}{2} = \sum_a \frac{|\langle \alpha | V | i \rangle|^2}{E_i - E + \delta E - i \frac{\Gamma}{2}} \left[ 1 - e^{-\frac{i\hbar}{\hbar} (E_i - E + \delta E - i \frac{\Gamma}{2})} \right]. \quad (9.60)$$

Егер (9.59) анзацы дұрыс болса, онда (9.60) теңдеуінің оң бөлігі уақытқа тәуелсіз болуы қажет немесе ең болмағанда,  $t \gg \hbar / \Delta$  үшін. Ал  $t$ -ның үлкен мәндері үшін экспоненциалдық функция жылдам осцилляцияланып (тербеліп),  $\alpha$  бойынша интеграл нольге тең болады.

Тербеліс негізінен экспонентадағы  $E - E_i$  көбейткішінің есебінен болғандықтан, бірінші жуықтауда  $\Gamma = \delta E = 0$  етіп бекітуге де болады; онда:<sup>5</sup>

$$\delta E - i \frac{\Gamma}{2} \approx \sum_a \frac{|\langle \alpha | V | i \rangle|^2}{E_i - E} \left[ 1 - e^{-\frac{i\hbar}{\hbar} (E_i - E)} \right]. \quad (9.61)$$

(9.51) теңдігіндегідей келесі жуықтауын қолданамыз:

$$\frac{1 - e^{-\frac{i\hbar}{\hbar} (E_i - E)}}{E_i - E} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \mathcal{P} \frac{1}{E_i - E} - i\pi \delta(E_i - E), \quad (9.62)$$

мұндағы  $\mathcal{P}$  – Кошидің басты мәні. Мұндай шектеу  $t \gg \hbar / \Delta$  аралығында орындалатындықтан, интеграл астындағы функцияны осындай масштабтағы энергия үшін тегіс деп пайымдауымыз жеткілікті. Алғашқы өту үдерісінен соң, (9.59) түріндегі функциялар (9.58) теңдеулерін қанағаттандырады. Ал  $\delta E$  және  $\Gamma$  үшін өрнектерді (9.62) жуықтауында (9.61) өрнегіне апарып қоюдың нәтижесінде табамыз:

$$\delta E = \mathcal{P} \sum_a \frac{|\langle \alpha | V | i \rangle|^2}{E_i - E} \equiv \mathcal{P} \int \frac{dE}{E_i - E} \int d\beta \rho(\beta, E) |\langle \beta, E | V | i \rangle|^2; \quad (9.63a)$$

$$\Gamma = 2\pi \sum_a |\langle \alpha | V | i \rangle|^2 \delta(E_i - E) = 2\pi \int d\beta \rho(\beta, E_i) |\langle \beta, E_i | V | i \rangle|^2. \quad (9.63\text{ә})$$

(9.63ә) өрнегі Фермидің алтын ережесінің арқасында табылды; (9.63a) өрнегінде әсерлесу энергияның өзгеруіне әкелетінін көреміз; бұл нәтиже, әрине, ұйтқудың статикалық теория тұрғысынан да

---

<sup>5</sup> Формальдық түрде теңдіктің оң бөлігі  $V$  бойынша екінші ретті деп пайымдауымызға болады, сондықтан өрнектің қалған бөлігінде  $\Gamma = \delta E = 0$  етіп бекіту заңды.

күтілген. Ал осы сипатталған жуықтауды 1930 жылы Вайскопф пен Вигнер ұсынған болатын. Ақтық нәтиже – ұйтқу теориясының нәтижесінің  $\Gamma t / \hbar \gg 1$  уақытында да маңызды болатындығы, мұнда енді ықтималдылықтың өзгерісі кіші шама болмайды.

Осы нәтиже бастапқы күйдің ыдырауынан соң жүйенің ақтық күйі жөнінде ақпарат алуға мүмкіндік береді. Ақтық күйлер ықтималдылықтарына сәйкес таралады:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |a_\alpha(t)|^2 = \frac{|\langle \alpha | V | i \rangle|^2}{(E_i - E + \delta E)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

немесе энергиядан басқа кванттық сандар бойынша интегралдау жолымен табылады:

$$\begin{aligned} P_E dE &= dE \int d\beta \rho(\beta, E) |\langle \alpha | V | i \rangle|^2 \frac{1}{(E_i - E + \delta E)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} = \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E_i - E + \delta E)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} dE. \end{aligned} \quad (9.64)$$

Атап өтетін мәселе: таралу дұрыс нормаланған. (9.64) теңдеуінің мағынасы әсерлесудің салдарынан бастапқы күйдің реті  $\Gamma$  болатын энергияның анықталмағандығына ие болады. Бұл түсінікті де, себебі бастапқы күй енді энергияның өзіндік мәні (стационарлық күй) болмайды, ол – метаорнықты күй. Өмір сүрудің орташа уақыты  $\tau$  мен энергияның анықталмағандығы  $\Delta E = \Gamma$ :

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$

теңсіздігін қанағаттандырады. Осы қатынасты кейде энергия мен уақыттың анықталмағандығы деп те атайды. Атомның қозған күйлері үшін (9.64) теңдеуі спектрлік сызықтардың табиғи ені болып табылады.

### Бета-ыдырау

Атомдық саны  $Z$  және массалық саны  $A$  болатын ядроның бета-ыдырауын қарастырайық:

$$N(A, Z) \rightarrow N(A, Z+1) + e^- + \bar{\nu}_e. \quad (9.65)$$

Үдерісте бөлінетін энергияның мөлшері:

$$Q = M_{A,Z}c^2 - M_{A,Z+1}c^2.$$

Үдеріске қатысатын электронның және нейтриноның сәйкесінше  $\hbar/p_e$  және  $\hbar/p_\nu$  толқын ұзындықтары ядроның мөлшерінен әлдеқайда артық болғандықтан, <sup>6</sup> әсерлесуге қатысатын барлық бөлшектерді нүктелік деп қарастыруымызға болады. Ал әсерлесудің матрицалық элементін төмендегідей параметризациялауға болады:

$$\langle f|V|i\rangle = G_F, \quad (9.66)$$

мұндағы  $G_F$  – Ферми тұрақтысы, оның өлшемі  $EL^3$ . Нейтронды протонға түрлендіретін оператордың матрицалық элементін  $G_F$  -дің анықтамасына енгізілген деп қарастыруға болады. Ақтық күйге екі еркін бөлшек кіретіндіктен, ыдыраудың ықтималдылығын

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} |V|^2 \delta(Q - E_e - E_\nu) \frac{d^3\mathbf{p}_e}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3\mathbf{p}_\nu}{(2\pi\hbar)^3}$$

түрінде жазуға болады. Ұшып шығу бұрыштары бойынша интегралдау  $4\pi$ -ге тең. Келесі  $p^2c^2 = E^2 - m^2c^4$  қатынасын пайдаланып және нейтриноның массасын нөлге теңестіріп, келесі теңдікті аламыз:

$$\frac{d^3\mathbf{p}_e}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3\mathbf{p}_\nu}{(2\pi\hbar)^3} \rightarrow \frac{(4\pi)^2}{(2\pi\hbar)^6} p^2 dp_e p_\nu^2 dp_\nu = \frac{1}{4\pi^4 (\hbar c)^6} \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} E_e dE_e E_\nu^2 dE_\nu, \quad (9.67)$$

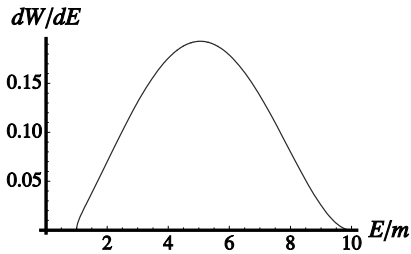
$dE_\nu$  бойынша интегралдау дельта-функцияның көмегімен жүргізіледі де, одан:

$$dW = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{G_F}{(\hbar c)^3} \right]^2 \frac{1}{2\pi^3} \sqrt{E_e^2 - m_e^2 c^4} E_e (Q - E_e)^2 dE_e \quad (9.68)$$

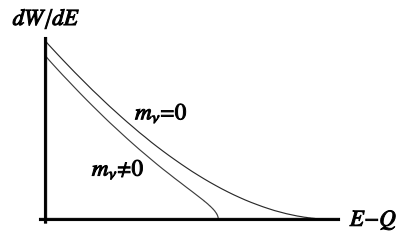
теңдігін аламыз.

---

<sup>6</sup> Шындығында бета-ыдырау үдерісінің ақтық күйінде пайда болатын бөлшекті келісімге сәйкес антинейтрино деп атайды, оны  $\nu_e$  үстіндегі сызықша білдіреді.



9.2-сурет. Бета-ыдырауындағы электронның энергиялық спектрі



9.3-сурет. Бета-ыдырауындағы жоғары энергиялық электрон спектрінің соңғы бөлігі

(9.68) теңдеуі – бета-ыдырауындағы атақты *Фермидің электрондық спектрі* (9.2-суретін қараңыз). Спектрдің жоғары энергиялық бөлігіндегі иілуіне көңіл аударыңыздар: бұл  $m_\nu = 0$  пайымдауының салдарынан.

Нейтрино массасы нөлге тең болмаған жағдайында электронның жоғары энергиялық спектрінің соңғы бөлігінде

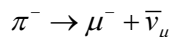
$(Q - E_e)^2 \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$  квадраттық пішін  $(E_{\max} - E_e)^{1/2}$  түрімен алмастыру қажет болады, ал (9.67) теңдеуіндегі  $E_\nu^2$  көбейткішін  $\sqrt{E_\nu^2 - m_\nu^2 c^4} E_\nu$  алмастыру қажет. 9.3-суретін қараңыз.

Алайда, нейтриноның массасын Фермидің энергиялық спектрінің соңғы бөлігінен анықтауды пайдалану жөніндегі эксперименттер қиындықтарға шалдығып, осы күнге дейін жемісті болғаны жоқ.

Жақындағы нейтриноның осцилляциясын бақылаулардың нәтижелері, оның (нейтриноның) массасы нөлге тең болмайтындығын эксперимент жүзінде көрсетті.

### Нейтриноның осцилляциясы

Бүгінгі күні нейтриноның үш түрі бар екендігі белгілі, олар:  $\nu_e$  – электрондық нейтрино (бета-ыдырауға қатысады, (9.65) теңдеу), мюондық нейтрино – зарядталған пион ыдырауының негізгі өнімі сапасында өндіріледі:



және әлсіз әсерлесудегі тау-лептонның<sup>7</sup> серіктесі – тау-нейтриносы  $\nu_\tau$

Қарапайымдылық мақсатында алдымен нейтриноның екі түрі:  $\nu_e$  және  $\nu_m$  бар деп пайымдайық. Әлсіз әсерлесудің әртүрлі үдерістеріне қатысатын осы екі бөлшек толық гамильтонианның өзіндік күйлері болмауы да әбден мүмкін. Оларды әзірге  $\nu_1$  және  $\nu_2$  деп белгілеп, соңғы айтылған нейтринолардың түрлерімен унитарлық түрлендірумен байланысқан деп пайымдалық:

$$\nu_1 = \nu_e \cos \theta + \nu_\mu \sin \theta; \quad \nu_2 = -\nu_e \sin \theta + \nu_\mu \cos \theta;$$

$\nu_{1,2}$  – тыныштық күйінде нақтылы массаларға ие болсын және

$$\nu_1 \rightarrow e^{-im_1 c^2 / \hbar} \nu_1; \quad \nu_2 \rightarrow e^{-im_2 c^2 / \hbar} \nu_2$$

жалпы санақ жүйесіндегі эволюциясы Лоренц түрлендіруімен өрнектелсін. Бета-ыдырауы кезінде пайда болған  $\nu_e$ , мысалы,  $\nu_e$  және  $\nu_m$  күйлерінің арасында тербелетін болады, себебі ол – кез келген қарапайым екі деңгейлі жүйенің стационарлық күйі (2.7-есепін қараңыз). Ал үш нейтрино жағдайында, олар мүмкін болатын үш  $\nu_e$ ,  $\nu_m$  және  $\nu_\mu$  күйлерінің арасында тербеледі және тербелу жиілігі олардың массаларының айырымдарына  $m_i^2 - m_j^2$ , сапарларының қашықтықтарына, бұрыштарының араласуына, сол сияқты нейтриноның энергиясына да тәуелді болады.

Нейтринолық осцилляциялардың бар болуының алғашқы сөзсіз дәлелдемесі атмосфералық нейтринолар эксперименті деп аталатын 1998 жылы Супер-Камиоканде тәжірибесінде<sup>8</sup> көрсетілді. Осы экспериментте (9.3) формуласында көрсетілген Жердің атмосферасындағы мюондық нейтринолардың саны ағындарының бағытына тәуелділігін көрсетті: Жер қойнауынан өткен нейтринолардың ағыны қарама-қарсы, яғни ғарыш сәулелерінің Жер атмосферасының бөлшектерімен соқтығысындағы пайда болатын нейтринолардың ағынынан әлдеқайда кем болды. Аналогиялық құбылыс, яғни Күн нейтринолары ағынының Жерге дейін жолдағы әлсіреуі («Күн нейтриноларының мәселесі» атауымен танымал) нейтринолар осцилляциясымен байланысты болатынын тәуелсіз реактор-экспериментінде дәлелденді (KamLAND, 2003 жыл).

<sup>7</sup> Қазіргі күні белгілі элементар бөлшектердің атаулары мен негізгі қасиеттері 24-қосымшасындағы кестеде келтірілген.

<sup>8</sup> Осы тәжірибеде Камиока (Жапония) ескі кенінің терең бөлігіндегі орнатылған 50 000 тонна таза су және 10000-ға жуық фотокебейткіштер пайдаланылды. Теңдессіз Камиоканде тәжірибесі протонның ыдырауын ашуға арналған, оған қоса нейтрондық обсерватория болатындай етіп жетілдірілген болатын.

## 9.5 Электромагниттік өтулер

(9.52) теңдеуінің ең маңызды қолдануының бірі: электромагниттік өтулер болып табылады. Біз мұнда мәселені жартылай классикалық тұрғыдан, яғни электромагниттік сәулеленуді сыртқы классикалық өріс ретінде қарастырамыз.<sup>9</sup> Бұндай жуықтауда зарядталған бөлшектер жүйесінің гамильтонианын мына түрде өрнектейміз:

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} \left( \mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V_{\text{Кулон}} - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (9.69)$$

мұндағы  $\mathbf{A}$  – сәулеленуші өрісті сипаттайтын  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  векторлық потенциал. Есепті жеңілдету мақсатында атомдық жүйелері ядроларының массасын шексіз деп қабылдайтын болсақ, онда айнымалылар тек электрондармен ғана байланысты болады.

Электромагниттік өріс үшін біз кулондық өлшемдік түрлендіруіндегі жазық толқынның келесі пішінін пайдаланатын боламыз:

$$A_0 = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (9.70)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \mathbf{A}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}; \quad \mathbf{A}_0 = |\mathbf{A}_0| \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (9.71)$$

мұндағы  $\mathbf{k}$  – толқындық вектор, ол  $\omega$  бұрыштық жиілігімен  $|\mathbf{k}| = \omega/c$  түрінде байланысқан.  $\boldsymbol{\varepsilon}$  – поляризация векторы. Егер жарық  $\mathbf{z}$ -тің бойымен бағытталса, онда .. поляризациясын

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= \hat{\mathbf{x}}; \quad \varepsilon_y = \hat{\mathbf{y}}, \\ \varepsilon_+ &= -\frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{x}} + i\hat{\mathbf{y}}); \quad \varepsilon_- = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{x}} - i\hat{\mathbf{y}}) \end{aligned}$$

екі жағдай (сызықтық және шеңберлік поляризациялануы) үшін өрнектеуге болады. Сол (немесе оң) шеңберлік поляризацияны  $\varepsilon_+$  (немесе  $\varepsilon_-$ ) өрнектейді, ал  $x$  (немесе  $y$ ) бағытындағы сызықтық поляризацияланған жарықты  $\varepsilon_x$  (немесе  $\varepsilon_y$ ) өрнектейді. Электромагниттік өрістерді келесі түрде жазуға болады

<sup>9</sup> Негізінде, сәулеленудің затпен әсерлесуін келесідей қарастырғанымыз жөн: байланысқан кванттық жүйенің  $H_{\text{зат}} + H_{\text{сәулелену}}$  әсерлесу мүшесі  $H_I$  болады. Мұндағы жуықтау сәулеленудің электромагниттік (бірақ классикалық) өрісін уақытқа тәуелді өрі сыртқы деп қарастырып, өрістің сәулеленуімен байланысқан кванттық эффекттері ескерілмейді. Электромагниттік өрісі квантталуының жеңілдетілген рәсімін 22.6-қосымшасынан табасыз.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} = -i \frac{\omega}{c} \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \dots \quad (9.72a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A} = i\mathbf{k} \times \mathbf{A} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \dots \quad (9.72\text{ә})$$

Кеңістіктің  $\mathbf{r} = 0$  бекітілген нүктесінде сол шеңберлік жарық классикалық электр өрісімен сипатталсын:

$$\mathbf{E}(0) = -\sqrt{2} |\mathbf{A}_0| \frac{\omega}{c} (\sin \omega t \hat{x} - \cos \omega t \hat{y})$$

(және магнит өрісіне ортогональды), ал бағыты  $xy$  жазықтығында сағат тіліне қарама-қарсы бұрылсын. Электромагнит өрісі энергиясының макроскопиялық ағыны  $t \gg 1/\omega$  уақыты периодының орташа мәні болатын Пойтинг векторымен анықталады. Көп уақыт үшін  $\overline{e^{-i\omega t}} = 0$  болатынын пайдаланатын болсақ, онда (9.72) теңдеуінен

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \overline{\mathbf{E} \times \mathbf{H}} = \hat{\mathbf{k}} \frac{c}{4\pi} 2 |\mathbf{A}_0|^2 \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c} |\mathbf{A}_0|^2 \hat{\mathbf{k}}$$

болатынын көреміз. Жазық толқын үшін Пойтинг векторының абсолюттік шамасы оның сәулеленуінің интенсивтілігіне, яғни  $\hat{\mathbf{k}}$  таралу бағытына перпендикуляр болатын бірлік аудан арқылы өтетін энергияның ағынына тең:

$$I = \frac{1}{2\pi} \frac{\omega^2}{c} |\mathbf{A}_0|^2 = n_\gamma \hbar \omega \quad (9.73)$$

Мұнда біз  $n_\gamma$  «фотондар саны» ұғымын енгіздік, оның әрқайсысы энергиясы  $\hbar \omega$  болатын толқынды сипаттайды.<sup>10</sup>

### Когеренттік емес сәулелену

Толық электромагниттік сәулеленуді жазық толқындар қосындысына жіктеуге болады. Қарапайымдылық мақсатында суперпозицияны дискреттік қосындылау ретінде жазайық:

<sup>10</sup> Бұл энергияға деген таза парамагнетикалық көзқарас, яғни энергияның амплитудасымен және жартылай классикалық электромагниттік толқынның жиілігімен өрнектелетін әрбір фотонмен тасымалдануы. Бір гармоникалық осциллятор жағдайы үшін осциллятордың квантталған қозғалысын классикалық шешіммен қалайша салыстыруға болатындағын талқылаған болатынбыз (3.4-бөлімін қараңыз). Осы қарапайым мысалдан біздің қарастырып отырған әдісіміз жоғары қозған күйлері (көп фотондар) үшін де жақсы жуықтау болады деп күтеміз.

$$\mathbf{A} = \sum_i \mathbf{A}_0 e^{i\varphi_i} e^{i(\mathbf{k}_i \mathbf{r} - \omega_i t)} + \dots \quad (9.74)$$

Әрбір компоненталарының арасындағы  $\varphi_i$  салыстырмалық фазалар когеренттілік дәрежесіне сәйкес келеді. Төменде біз монохроматтық сәулеленуін *толықтай когерентті емес* деп есептейміз, ондағы  $\varphi_i$  фазалары кездейсоқ ретпен таралады. Бұдан Пойтинг векторын есептеу кезінде орташалаудың жалпы квадраттық түрін пайдаланатынымызды білдіреді:

$$\overline{e^{i(\varphi_i - \varphi_j)}} = \delta_{ij} . \quad (9.75)$$

Орташа мәні болып фазалардың статистикалық ансамблі бойынша жүргізілуін түсінеміз. Онда Пойтинг векторы үшін

$$\mathbf{S} = \sum_i \hat{\mathbf{k}}_i \frac{1}{2\pi} \frac{\omega_i^2}{c} |\mathbf{A}_0^{(i)}|^2 \quad (9.76)$$

болатынын табамыз. Жақсы коллимацияланған ағын үшін таралу бағыты барлық құраушылары үшін бірдей болады деп есептеледі. Ал (9.76) теңдеуі сәулеленудің интенсивтілігі үшін

$$I = \sum_i \frac{1}{2\pi} \frac{\omega_i^2}{c} |\mathbf{A}_0^{(i)}|^2 = \sum_i I_i ,$$

яғни жарықтың интенсивтілігі құраушыларының қосындысын береді. Қосындылаудан интегралдауға ауысып, енді спектрлік интенсивтілікті келесідей анықтауымызға болады:

$$I(\omega)\Delta\omega = \sum_{\omega_i \in \omega \pm \Delta\omega/2} I_i ;$$

$$I = \int d\omega I(\omega) .$$

### 9.5.1 Дипольдік жуықтау

Егер барлық магниттік эффектілерді ескермейтін болсақ, онда (9.69) әсерлесуіндегі электромагниттік бөлігінің бірінші ретінің түрі төмендегідей болады:<sup>11</sup>

$$V = -\frac{e}{mc} \sum_e \mathbf{A}(\mathbf{r}_e) \cdot \mathbf{p}_e .$$

Онда сәйкес келетін матрицалық элементтерінің түрін жазайық:

<sup>11</sup> Біз  $\mathbf{A}$ -ның трансверсальділігін пайдаландық, яғни  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = 2\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$

$$V_{fi} = -\frac{e}{mc} |\mathbf{A}_0| \sum_e \langle f | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_e} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p}_e | i \rangle + \dots, \quad (9.77)$$

мұнда (9.74) теңдеуін пайдаландық. Өтулердің көпшілігінде электромагниттік сәулеленуінің толқын ұзындықтары жүйеге тән мөлшерлерінен әлдеқайда артық. Мысалы, оптикалық өтулер үшін  $\lambda \sim 10^4 \text{ \AA}$ , ал атомның мөлшері  $r_b \sim 1 \text{ \AA}$ . Бұдан кеңістігі шектеулі кеңейетін толқындық функциялар, мысалы, атомдағы байланысқан электрондар үшін жоғары дәлдікпен (9.77) теңдеуіндегі экспонентаның көрсеткішінде  $kr = 2\pi / \lambda \ll 1$  алмастыруын жүргізуге болатынын табамыз. Өрнек одан сайын жеңілдер еді, егер

$$\begin{aligned} \langle f | \mathbf{p} | i \rangle &= m \langle f | \dot{\mathbf{r}} | i \rangle = \\ &= m \frac{i}{\hbar} \langle f | [H, \mathbf{r}] | i \rangle = m \frac{i(E_f - E_i)}{\hbar} \langle f | \mathbf{r} | i \rangle = im\omega_{fi} \langle f | \mathbf{r} | i \rangle \end{aligned}$$

орындалса. Нәтижесінде матрицалық элементі ретінде электрлік дипольді аламыз, ал жоғарыда сипатталған жуықтауды *дипольдік* деп атайды. Онда (9.77) матрицалық элементін

$$V_{fi} = -i \frac{e}{c} \omega_{fi} |\mathbf{A}_0| \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r}_{fi}; \quad \mathbf{r}_{fi} \equiv \sum_e \langle f | \mathbf{r}_e | i \rangle \quad (9.78)$$

түрінде қайта жазуға болады. Мұндағы  $\mathbf{r}_{fi}$  – бірлік дипольдік моменттің матрицалық элементі.

### Таңдау ережелері

(9.78) өрнегі дипольдік жуықтаудағы мүмкін болатын өтулерге (*рұқсат етілген өтулерге*) қатаң таңдау ережелерін орнатады:

(e1)  $\mathbf{r}$  – полярлық вектор; сондықтан жұптылық жақсы кванттық сан болады деп пайымдалады,  $|i\rangle$  және  $|f\rangle$  күйлерінің жұптылықтары қарама-қарсы болулары керек:  $P_f = -P_i$ .

(e2)  $\mathbf{r}$  - кеңістік бұрылыстарына қатысты вектор болып табылады. Осылайша, Вигнер-Эккарт теоремасы

$$(J_f - J_i) = \pm 1, 0; \quad 0 \nrightarrow 0$$

шарттарын орнатады, мұнда толық бұрыштық моменті сақталады.

(e3) Егер спин-орбитальдық әсерлесуді  $\propto \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  ескермейтін болсақ, онда  $L$  толық орбиталдық бұрыштық моменті және  $S$  толық спиндік моменті жақсы кванттық сандары болады да, енді күйлер солар бойынша жіктеледі (классификацияланады). Ал  $\mathbf{r}$  операторы тек орбиталдық айнымалаларға ғана әсер етеді де,

жоғарыдағы қарастырған (е2) ережесін қолданып, таңдау ережелерін қайта анықтауымыз қажет:

$$S_f = S_i; (L_f - L_i) = \pm 1, 0; 0 \rightarrow 0.$$

Түсінбестіктер туындамас үшін еске салайық: атомдағы электрондар жүйесінің жұптылығы жеке электрондардың орбиталдық жұптылықтарының көбейтінділері  $P = (-1)^{\sum l_i}$  болып табылады және жалпы олардың қосындысы  $L$ -ге тең болмайды.

Әрине, поляризацияланған күйлерімен байланысты таңдау ережелері бар:

(п1) жалпы  $\varepsilon \cdot \mathbf{r}$  көбейтіндісін үш сфералық гармоникаларға  $Y_{10}, Y_{1\pm 1}$  сәйкес келетін үш сфералық құраушыларының  $r_z, r_+, r_-$  қосындысына жіктеуге болады. Бұдан дипольдік өту үшін  $J_z$  операторының  $M$  өзіндік мәні мынадай ережені қанағаттандыру керектігін көреміз:

$$M_f - M_i = \pm 1, 0.$$

Ал  $L, S$  жақсы кванттық сандар болған жағдайында келесі теңдіктер орындалуы тиіс:

$$S_{z,f} = S_{z,i}; M_f^{(L)} - M_i^{(L)} = \pm 1, 0.$$

(п2) егер жарықтың таралу бағыты мен оның поляризациялануы анықталған болса, онда толық болжауды жасау мүмкіндігіміз бар.

Соңғы (п2) ережесін талдайық. Нақтыланған мысал ретінде сол шеңберлік поляризацияланған жарықтың жұтылуын қарастырамыз.  $z$  кванттау осін жарықтың таралу бағытының бойымен сәйкес болатындай етіп таңдай аламыз. Жұтылу үдерісінде (9.71) теңдеуінің бірінші мүшесі ғана резонанстық күйінде болады, демек, матрицалық элемент  $\varepsilon$  -ға пропорционал. Мұндай жағдайда таңдау ережесін төмендегідей жазамыз:

$$\varepsilon_+ \cdot \mathbf{r} \propto x + iy \Rightarrow M_f = M_i + 1.$$

(Кері жағдайда, яғни түсуші оң шеңберлік поляризацияланған жарық үшін біз  $M_f = M_i - 1$  теңдігін аламыз).

Енді дербес жағдайда  $z$  бағытында таралатын  $\varepsilon_z = 0$  жарық үшін  $M_f = M_i$  өтуіне тыйым салынатынына көңіл аударайық. Электромагниттік өрісті кванттау тұрғысынан мұның қарапайым интерпретациясы бар. Себебі  $z$  бағытында қозғалатын фотонның  $L_z$

орбиталдық бұрыштық моментінің емес, тек  $\mathbf{k} \parallel \hat{\mathbf{z}}$  спинінің құраушысы ғана болады. Қозғалыс бағытына жүргізілген спиннің құраушысын *спиральділік* деп атайды. Фотондардың оң немесе сол шеңберлік поляризациясына плюс немесе минус бір спиральділігі сәйкес келеді.<sup>12</sup>

Сәулелену үдерісінде (9.71) теңдеуіндегі екінші мүше  $\boldsymbol{\varepsilon}^*$  векторына пропорционал, ал мұның маңызды мағынасы бар. Сол поляризацияланған фотондарды шығару үшін матрицалық элемент келесіге пропорционал болады:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_+^* \cdot \mathbf{r} \propto x - iy \Rightarrow M_f = M_i - 1.$$

Ал бұл фотонды шығару бұрыштық моменттің шамасын бірге кемітетінін білдіреді.

Біз әртүрлі жағдайларды талдауды оқырманға қалдырамыз. Мұндай талқылаулардың маңыздылығы өте зор, мысалы, магнит өрісінің қатысуындағы спектрлік сызықтарды талдау кезінде, Зеeman эффектінде, яғни атомдарға арналған *15-тарауда* қарастырылатын болады.

Ілгерілеуге қол жеткізу үшін осы екі монохроматтық сәулелену мен «кең жолақты» сәулелену жағдайларының арасындағы айырмашылықты түсіну қажет. Атом энергиясының деңгейлері жалпы жағдайда дәл анықталмайтынына біз әлі көз жеткіземіз. Сондықтан негізгі күйінен басқаларының ені  $\Gamma$  нөлге тең болмайды. Сәулеленудің екі  $\hbar\Delta\omega \ll \Gamma$  немесе  $\hbar\Delta\omega \gg \Gamma$  түрі үшін оның мағынасы неде? Сәулеленудегі спектрлік таралуы рас па, әлде жоқ па? Өтулерге қатысатын деңгейлерге қатысты олар тар бола ма, жоқ кең бола ма? Осы сұрақтарға жауап ізделік.

## Монохроматтық сәулелену

Осы жағдай *9.2.4-бөлімінде* қарастырылған мысалға сәйкес келеді. Резонанстық радиациялық фонда екі  $a$  және  $b$  деңгейлері арасында тербеліс бар. Сәйкес келетін матрицалық элемент тең болады:

<sup>12</sup>Тыныштық күйіндегі массасы нөлге тең бөлшек – фотонның тек екі  $\pm 1$  спиральдік күйлері болатыны Лоренц группасы көрінісінің теориясынан шығады: бұл арнайы салыстырмалық теориясының салдары болады әрі нәтиженің дербес жағдайы, яғни тыныштық күйіндегі массасы нөл, бірақ спині кез келген болатын бөлшек үшін орынды. Электромагнит өрісі үшін оның кванты, яғни фотонның тек екі спиральдік күйлері болатындығы да өрістің өлшемдік инварианттылығының салдары. (9.70) теңдеулері тәрізді өлшемдік түрлендірудің осындай түрін енгізу мүмкіндігінің нәтижесінде ( $\mathbf{A}$ ,  $\varphi$ ) потенциалдарымен сипатталатын еркіндіктің тәуелсіз дәрежелерінің саны төртеуден екіге кемиді.

$$V_{ba} = -i \frac{e}{c} \omega_{ba} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{r}_{ba} = -i \frac{1}{c} \omega_{ba} A_0 d_{ba}; \quad d_{ba} = e \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r}_{ba}. \quad (9.79)$$

(9.73) теңдеуін пайдаланып,

$$A_0^2 = \frac{2\pi c}{\omega^2} I; \quad |V_{ba}|^2 = \frac{2\pi}{c} \left( \frac{\omega_{ba}}{\omega} \right)^2 I d_{ba}^2 \approx \frac{2\pi}{c} I d_{ba}^2$$

болатынын табамыз және (9.49) теңдеулерінен жүйе тербелістерінің ықтималдылығын табамыз; жүйенің бастапқы күйі  $|a\rangle$  болғанын ескеріп, төмендегіні жазамыз:

$$P_{ba}(t) = \frac{|V_{ba}|^2}{\hbar^2 \Omega^2} \sin^2(\Omega t); \quad \Omega^2 = \frac{(\omega_{ba} - \omega)^2}{4} + \frac{2\pi}{\hbar^2 c} I d_{ba}^2.$$

Көңіл аударыңыздар, тербеліс жиіліктері сәулеленудің интенсивтілігіне тәуелді және идеалды резонанс кезінде  $\Omega \propto \sqrt{I}$  болады.

Оқырманды ескерте кетуіміз қажет: осында алған формулаларымыз тек сыртқы өрістің мәжбүрлі жұтылуы мен сәулеленуі үшін ғана орынды. Қозған атомның спонтандық сәулеленуін талқылауды 9.5.4-бөлімінен табасыз.

## 9.5.2 Сәулеленудің жұтылуы

Жалпы жағдайда қандай да жүйенің монохроматтық емес жарықты жұтуы дегеніміз – атомның энергиясы  $E_b > E_a$  болатын  $a$  күйінен өзге  $b$  күйіне өтуі. Осы жағдайда (9.71) теңдеуінің тек бірінші мүшесі резонанста болады, оған қоса (9.79) және (9.74) теңдеулерінің көмегімен амплитуданың өрнегі

$$a_{ba} = -\frac{\omega_{ba}}{\hbar c} \sum_{\omega} e^{i\varphi_{\omega}} A_0(\omega) d_{ba} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ba} - \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{ba} - \omega}{2}} \quad (9.80)$$

болатынын көреміз. Бұл жиіліктері әртүрлі болатын амплитудалардың қосындысы, олар (жиіліктер) сәулеленуді құрайды. Жарықты когеренттік емес деп пайымдап, (9.75) теңдеуінен табамыз:

$$|a_{ba}|^2 = \frac{\omega_{ba}^2}{\hbar^2 c^2} |d_{ba}|^2 \sum_{\omega, \omega'} A_0(\omega) A_0(\omega') \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ba} - \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{ba} - \omega}{2}} \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ba} - \omega'}{2} t\right)}{\frac{\omega_{ba} - \omega'}{2}} e^{i(\varphi_{\omega} - \varphi_{\omega'})} =$$

$$= \frac{\omega_{ba}^2}{\hbar^2 c^2} |d_{ba}|^2 \sum_{\omega} A_0^2(\omega) \left( \frac{\sin\left(\frac{\omega_{ba} - \omega}{2} t\right)}{\frac{\omega_{ba} - \omega}{2}} \right)^2.$$

(9.51) және (9.73) теңдеулерінен келесі өрнекті аламыз:

$$\begin{aligned} P_{ba} &= \frac{\omega_{ba}^2}{\hbar^2 c^2} |d_{ba}|^2 \sum_{\omega} A_0^2(\omega) \pi t \delta\left(\frac{\omega_{ba} - \omega}{2}\right) = \\ &= \int d\omega I(\omega) \frac{2\pi c}{\omega^2} \frac{\omega_{ba}^2}{\hbar^2 c} |d_{ba}|^2 2\pi t \delta(\omega_{ba} - \omega), \end{aligned}$$

оған қоса, бірлік уақыт интервалындағы өтудің ықтималдылығы (өтудің жылдамдығы) үшін:

$$\boxed{W_{ba} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} |d_{ba}|^2 I(\omega_{ba})} \quad (9.81)$$

өрнегін аламыз. Нақтыланған қосымшаларда атомның күйлері мен жарықтың поляризациясын көрсету қажет. Атомдар таза күйлерде болмауы жиі кездеседі, ал (9.81) теңдеуіндегі дипольдік моментке тәуелді бөлігін

$$|d_{ba}|^2 = \langle b | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{d} | a \rangle \langle a | \boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \mathbf{d} | b \rangle \rightarrow \text{Tr}(\Pi_b \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{d} \rho_a \boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \mathbf{d})$$

теңдігімен алмастыру қажет. Мұндағы  $\rho_a$  – бастапқы атомдар тығыздығының матрицасы және  $\Pi_b$  – біз бақылайтын күйге проекциялайтын оператор. Енді ақтық күйдің бұрыштық моменті өлшенбейтін, ал бастапқы поляризацияланбаған жағдайын қарастырайық. Мұндай бастапқы күй:

$$\rho_a^0 = \frac{1}{2J_a + 1} \sum_{J_z} |J_z\rangle \langle J_z|$$

тығыздық матрицасымен өрнектеледі, яғни орташалау  $J_z$  бойынша жүргізіледі. Ақтық күйдің мүмкін болатын барлық күйлері бойынша қосындылау – поляризацияланбаған аралас күйлер үшін тығыздық матрицасын қолдануға және оны  $g_b = 2J_b + 1$  күйлердің еселігіне көбейткенге эквивалент. Осылайша, матрицалық элементті «жеңілдетіп» алуымызға болады:

$$|d_{ba}|^2 = g_b \text{Tr}(\rho_b^0 \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{d} \rho_a^0 \boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \mathbf{d}). \quad (9.82)$$

(9.82) теңдеуіндегі  $\rho_a^0$  және  $\rho_b^0$  матрицалары бұрылыстарға қатысты

инвариантты болғандықтан:

$$\text{Tr}(\rho_b^0 d_x \rho_a^0 d_x) = \text{Tr}(\rho_b^0 d_y \rho_a^0 d_y) = \text{Tr}(\rho_b^0 d_z \rho_a^0 d_z) = \frac{1}{3} \text{Tr}(\rho_b^0 \mathbf{d} \rho_a^0 \mathbf{d});$$

$$\text{Tr}(\rho_b^0 d_x \rho_a^0 d_y) = \text{Tr}(\rho_b^0 d_x \rho_a^0 d_z) = \text{Tr}(\rho_b^0 d_y \rho_a^0 d_z) = 0;$$

яғни

$$\text{Tr}(\rho_b^0 d_i \rho_a^0 d_j) = \frac{1}{3} \text{Tr}(\rho_b^0 \mathbf{d} \rho_a^0 \mathbf{d}) \delta_{ij} \equiv \frac{1}{3} \overline{d_{ba}^2} \delta_{ij}. \quad (9.83)$$

Осы жағдайда бірлік уақыт интервалындағы екі деңгейлердің арасындағы өтудің ықтималдылығы төмендегідей беріледі:

$$W_{ba} = B_{ba} I(\omega_{ba}), \quad B_{ba} = g_b \frac{4\pi^2}{3\hbar^2 c} \overline{d_{ba}^2}. \quad (9.84)$$

### 9.5.3 Индукцияланған (немесе мәжбүрлі) сәулеленулер

Энергиялары  $E_b > E_a$  болатын екі  $|a\rangle$  және  $|b\rangle$  күйлерінің арасындағы өтуді қайта қарастырайық. Бірақ енді бастапқы күйіміз қозған  $b$  күйі болсын. Егер резонанстық үлеспен ғана шектелетін болсақ, онда  $b \rightarrow a$  амплитудасының ықтималдылығы тең болады:

$$V_{ab} = -i \frac{e}{c} \omega_{ab} \mathbf{A}_0^* \mathbf{r}_{ba} = -i \frac{1}{c} \omega_{ab} A_0 d_{ab}; \quad d_{ab} = e \boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \mathbf{r}_{ba}.$$

Формальдық түрде жұтылу жағдайынан жалғыз айырмашылығы ол:  $\boldsymbol{\varepsilon} \rightarrow \boldsymbol{\varepsilon}^*$  және  $a, b$  индекстерін алмастыруында ғана. Физикалық тұрғыдан шығатын жарық пен түсуші жарықтың поляризациясы мен жиілігі бірдей болуы маңызды. Ал  $\boldsymbol{\varepsilon} \perp \mathbf{k}$  және формула кез келген бастапқы поляризация үшін болғандықтан, ақтық сәулеленудің бағыты мен бастапқы сәулеленудің бағыты бірдей екендігін білдіреді. Осылайша, жүйе түсуші жарықты «күшейте» отырып, оның сипаттамаларымен бірдей болатын когерентті жарықты шығарады.<sup>13</sup>

Өту ықтималдылығының анықтамасы алдындағы жағдаймен (жұтылумен) бірдей, бірақ  $a$  және  $b$  индекстерін алмастыру керек; демек:

<sup>13</sup> Бұл мәжбүрлі сәулеленудің маңызды кванттық механикалық қасиеті. Алғаш рет Планктің формуласын қайта қорытып шығарғанда Эйнштейн байқаған болатын. Осы аталған қасиет мазердің (мәжбүрлі сәулеленудің көмегімен микротолқындардың күшейтілуі) немесе лазердің (мәжбүрлі сәулеленудің көмегімен жарықтың күшейтілуі) негізін құрайды.

$$W_{ab} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2 c} |d_{ab}|^2 I(\omega_{ba}). \quad (9.85)$$

Поляризацияланбаған бастапқы күйлер мен ақтық поляризация бақыланбайтын өтулер үшін алдыңғы бөлімдегі талқылаулар өз күшінде қалады; сондықтан екі деңгейлер арасындағы уақыт бірлігіндегі өту ықтималдылығының өрнегі келесідей болады:

$$W_{ab} = B_{ab} I(\omega_{ba}), \quad B_{ab} = g_a \frac{4\pi^2}{3\hbar^2 c} \overline{d_{ab}^2}. \quad (9.86)$$

### 9.5.4 Спонтандық сәулелену

Қозған  $|b\rangle$  күйі төменірек болатын  $|a\rangle$  күйіне ыдырауы мүмкін, ондағы энергиясы  $\hbar\omega = E_b - E_a$  фотон сәулеленеді. Мұндай жағдайды *спонтандық сәулелену* деп атайтын боламыз. Бұл маңызды үдеріс және оны осыған дейін қолданған жартылай классикалық тәсілмен есептей алмаймыз. Өйткені ешқандай бастапқы сыртқы сәулелену жоқ, сондай-ақ «сәулеленудің» ақтық күйі жалғыз фотоннан тұрады, ал оны (фотонды) классикалық интерпретациялауға келмейді.

Мұндай үдерістің дұрыс тәсілі: бүкіл кванттық механикалық жүйені, соның қатарында электромагнит өрісінің және затпен электромагниттік әсерлесудің гамильтониандарын түсіндіру мақсатында «екінші рет кванттау» формализмін қолданған жөн. Бұл формализм осы тараудың *22-қосымшасында* қысқаша талқыланған. Ең басында атом қозған күйде, ал  $H_{\text{сәулелену}}$  сәулеленетін жүйе – негізгі күйде (вакуум) табылады. Ақтық күйде атом төменгі күйінде, ал сәулеленуші жүйе бір фотонды қозған күйде болады. Бұл өтудің жылдамдығын есептеу үшін Фермидің алтын ережесін қолданамыз.

Мұнда, негізгі мәтінде Бордың үйлесімдік принципіне сілтеме жасай отырып, осындай мәселелерді айналып өтетін боламыз. Аталған принципте  $N$  үлкен кванттық сандар (өте қозған күйлер) үшін, егер классикалық қозғалысты (яғни атомдық тербелістерді) өртүрлі Фурье-құраушыларына жіктей алатын болсақ, онда кванттық механикалық  $\langle n+k|q|n\rangle$ ,  $k=1,2,\dots$ , матрицалық элементтер классикалық  $k$ -ші жиілік гармоникасына сәйкес келеді. (Берілген жиілікпен) тербелетін заряд қатысатын Льенар-Вихерт потенциалы үшін шешімінде расында барлық гармоникалар  $\omega, 2\omega, \dots$  болады. Мұндай «принциптің» негіздемесі жартылай классикалық (ВКБ) жуықтауына арналған *11-тарауда* берілген. Бұл жерде спонтандық

сәулелену есебінен болатын өтудің ықтималдылығын қорытып шығару үшін іс жүзіндегі (эвристикалық?) әдісі ретінде пайдаланамыз.

Дипольдық жуықтаудағы жүйе сәулеленуінің толық энергиясының түрі кеңінен таныс:

$$-\frac{dE}{dt} = I = \frac{2}{3c^3} \ddot{\mathbf{d}}^2.$$

Егер қозғалыс мультипериодты болса, онда оны жиіліктері  $\omega_n$  гармоникаларының жиыны бойынша жіктеледі; осындай жағдайда шығарылатын сәулеленудің интенсивтілігі төмендегідей анықталады:

$$I_n = \frac{4\omega_n^4}{3c^3} |\mathbf{d}_n|^2. \quad (9.87)$$

(9.87) теңдеуі сәулеленудің толық энергиясына қатысты, ол үшін жарықтың ақтық поляризациясы және заттың ақтық күйлері бойынша қосындылау керек.

Үйлесімділік сәйкестік принципін пайдаланып, енді (9.87) теңдігін кванттық механикалық формуласына айналдырамыз: бірлік уақыт аралығындағы энергияның сәулеленуі  $\hbar\omega$  болатын бір фотонның энергиясы бір секундтағы ыдырау ықтималдылығына тең болады:

$$\hbar\omega_{ba} W_{ab}^{(S)} = \frac{4\omega_{ba}^4}{3c^3} \sum_{\text{поляризация}} |\langle a | \mathbf{d} | b \rangle|^2.$$

Ақтық поляризация бойынша қосындылауын  $g_a$  деңгейі мөлшерінің орташа санымен қайта алмастыруына болады. Сәулелену мен поляризацияланудың барлық бағыттары бойынша қосындылауды жүргізіп, формуланың бұрыштық моменттің бастапқы бағдарына тәуелді болмайтынын көреміз. Енді (9.83) теңдеуіндегі есептеулерді пайдаланып, табамыз:

$$W_{ab}^{(S)} = g_a \frac{4\omega_{ba}^3}{3\hbar c^3} \overline{\mathbf{d}_{ab}^2}. \quad (9.88)$$

Назар аударыңыздар, (9.86) теңдеулеріне кіретін  $W_{ab}^{(S)}$  және индукцияланған сәулеленудің формуласындағы  $B_{ab}$  -ның саны байланысқан:

$$W_{ab}^{(S)} = \frac{\hbar\omega_{ba}^3}{\pi^2 c^2} B_{ab}. \quad (9.89)$$

## 9.6 Эйнштейн коэффициенттері

Қызықты мәселені назарларыңызға салайық: жоғарыда келтірілген жұтылудың, индукцияланған сәулеленудің және спонтандық сәулеленудің ықтималдылықтарының қатынастарын Эйнштейн қазіргі заманғы кванттық механиканың әзірленгеніне дейін алған болатын. Сол таңдаудың қосымша өнімі болып, Планк таралуы заңының жаңа қорытылуы табылады. Алдындағы бөлімдердегі  $A$ ,  $B$  коэффициенттері – Эйнштейн коэффициенттері атауымен танымал.

Екі деңгейі бар жүйені интенсивтілігі  $I(\omega)$  немесе энергия тығыздығы

$$u(\omega) = \frac{I(\omega)}{c}$$

болатын сәулеленетін абсолюттік қара денеге орналастырайық; оның үстіне аталған шамалар бізге белгісіз деп пайымдайық. Ал  $N_a$  және  $N_b$  екі деңгейдің қоныстануы, ал оның тұрақтысы  $N_a + N_b$  болсын. Өрбір деңгейдің қоныстануы жоғарыда қарастырылған электромагниттік өтулерге байланысты уақыт бойынша өзгеріп отырады: жоғары деңгейдегі қоныстануы:

$$\frac{dN_b}{dt} = -W^{(s)}N_b - B_{ba}N_bI(\omega) + N_aB_{ba}I(\omega), \quad (9.90)$$

мұнда біз

$$\omega = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$$

деп анықтадық. Алғашқы мүше жоғары деңгей қоныстануының спонтандық сәулеленудің есебінен кемитіндігін білдіреді, ал қалған екеуі сәйкесінше индукцияланған сәулелену мен жұтылуға сәйкес келеді.

Жылулық тепе-теңдікте екі деңгейдегі атомдардың саны стационарлы болуы тиіс және олардың қатынасы Больцманның формуласымен анықталады:

$$\frac{dN_b}{dt} = 0; \quad \frac{N_a}{N_b} = \frac{g_a e^{-E_a/kT}}{g_b e^{-E_b/kT}} = \frac{g_a}{g_b} e^{\frac{(E_b - E_a)}{kT}}. \quad (9.91)$$

Ең алдымен, индукцияланған жұтылу мен сәулеленуі үшін (9.84) және (9.86) формулаларындағы  $B$  коэффициенттерінің арасында қарапайым

$$B_{ab}g_b = B_{ba}g_a \quad (9.92)$$

қатынасының бар болуын атап өтейік. Мұндай теңдік қолымызда бар  $N_b$  стационарлық нәтижелер үшін қажет, өйткені  $I(\omega) = cu(\omega)$  интенсивтілігі (1.7) Рэлей-Джинс формуласына сәйкес  $T \rightarrow \infty$  шегінде  $\propto kT$  жинақты емес болады. Ал Рэлей-Джинс формуласы төменгі жиіліктер ( $\omega$  бекітілгендегі жоғары температураларды білдіреді) үшін орынды екені белгілі. Енді (9.92) және (9.91) теңдеулерінің көмегімен (9.90) теңдеуінен аламыз:

$$I(\omega) = \frac{W^{(S)} N_b}{N_a B_{ba} - N_b B_{ab}} = \frac{W^{(S)} / B_{ba}}{\frac{N_a}{N_b} - \frac{B_{ab}}{B_{ba}}} = \frac{W^{(S)} g_b}{\frac{B_{ba} g_a}{e^{(E_b - E_a)/kT} - 1}}. \quad (9.93)$$

Мұнда біздің пайдаланғанымыз:

- (а) Вин заңы (1.9). Оның төменгі температураларда (немесе осыған эквивалент: бекітілген  $T$ -да жоғары жиіліктерде) орындалатыны белгілі. Демек,  $\beta = \hbar / k$  үшін

$$\frac{E_b - E_a}{kT} = \beta \omega / T$$

анықтауға болады.

- (ә) Рэлей-Джинс заңы (жоғары температураларда орындалады). Одан келісімділік шартын аламыз:

$$\frac{W^{(S)} g_b kT}{B_{ba} g_a \hbar \omega} = c \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT \Rightarrow W^{(S)} = \frac{g_a}{g_b} \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^2} B_{ba}.$$

Бірақ осы қатынас расында орындалады ((9.89) теңдеуін қараңыз), осы формуладан дипольдік жуықтауында  $W^{(S)}$  және  $B_{ab}$  айқын түрінде аламыз! Мұны (9.93) өрнегіне қойып, Планктың таралуын табамыз:

$$cu(\omega) = I(\omega) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^2} \frac{1}{e^{\hbar \omega / kT} - 1}.$$

Бұдан термодинамика мен квантталудың (сәулелену мен заттың) арасындағы таңғалдырарлық ұқсастықтың әрі Планк формуласының келісімділік шарты көрінісінің болатындығына көзімізді жеткіземіз.

## Қосымшаларға нұсқаулық

Ұйтқу теориясын физикалық қосымшаларға қолданудың спектрі өте кең, сондықтан олардың барлығын бір тарауда қанағаттандыратындай етіп жеткізе алмаймыз. 21.1-қосымшасында ұйтқу теориясын қолдануға болатын бірнеше мәселелер, оған қоса ұйтқу қатарларының жинақсыздығы жөніндегі теориялық және мүмкін болатын қайта қосындылау сұрақтары да талқыланған.

Аталған мәселелердің бірқатары сандық талдауда да қарастырылған. Нәтижелерді аналитикалық түрде алудың өзге жолдары болмаған жағдайда Mathematica бағдарламасын пайдалануға болады; мысал ретінде сутегі атомының кез келген деңгейі үшін (жалпы кез келген реті үшін) Штарк эффектісінің аналитикалық түрі NB-9.3 келтірілген.

## Есептер

(9.1)  $H = H_0 + H_1$  гамильтонианын қарастырайық, мұндағы

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2; \quad H_1 = g \frac{\omega}{2}(xp + px), \quad g \in \mathbb{R},$$

(а)  $H$ -тың дәл спектрін есептеңіздер.

(ә) Ұйтқу теориясын пайдаланып ( $H_1$  – ұйтқу), гамильтонианның спектрін  $g$  бойынша екінші ретіне дейін есептеп, (а) нәтижесімен салыстырыңыздар.

(9.2) Массасы  $m$  және жиілігі  $\omega$  гармоникалық осциллятор сыртқы ұйтқуға шалдығады. Келесі ұйтқулар үшін

$$g_1 q; \quad \frac{1}{2}g_2 q^2, \quad \frac{1}{2}g_3 q^3, \quad \frac{1}{2}g_4 q^4$$

энергияның өзіндік мәндеріне енгізетін түзетулерін ұйтқу теориясының бірінші және екінші реттері бойынша есептеңіздер.

(9.3) Протонды радиусы  $R$  болатын бірқалыпты зарядталған шар ретінде қарастырайық. Онда сутегі атомының неше деңгейі осы гипотезаның арқасында «зардап шегетінін» есептеңіздер.

(9.4) Кулондық потенциалдың тәртібі  $1/r^{(1+\epsilon)}$  болады деп пайымдайық, мұндағы  $\epsilon > 0$ . Онда сутегі атомының деңгейлеріне әсерін есептеңіздер және лэмбтік ығысудың

бақыланатын түзетуімен,  $2p-2s$  деңгейлері тесігіндегі индукцияланған энергияны салыстыру арқылы  $\epsilon$  -дің шекарасын бағалаңыздар. Теорияның экспериментпен үйлесімділігі кем дегенде,  $\Delta E / h = 10^4 \text{ кГц}$ .

(9.5) Зарядталған гармоникалық осциллятордың деңгейлеріне электр өрісінің әсерін есептеңіздер. Индукциялаған электрлік дипольдік моментін есептеп, Фейнман-Гелл-Манн теоремасын тексеріңіздер.

(9.6) Екі деңгейі бар жүйенің

$$H = E_0 + \begin{pmatrix} -E_1 & -\delta \\ -\delta^* & E_1 \end{pmatrix} \equiv E_0 - \sigma \cdot \mathbf{B}$$

дәл шешімдерін табыңыздар және оларды ұйтқу теориясының  $B \rightarrow 0$  нәтижесімен салыстырыңыздар. Өзіндік мәндердің фазаларының  $B$ -ға тәуелділігін талқылаңыздар.

(9.7) Алдындағы есеп тәрізді екі деңгейлі жүйені  $NH_3$  аммиак молекуласының жеңілдетілген моделі ретінде қарастыруға болады. Сутегінің үш атомы жататын жазықтыққа қатысты азот атомының орналасуы классикалық екі эквивалентті конфигурацияларға сәйкес келеді.

Осы модель үшін жұптылық операторын анықтаңыздар және оның қасиеттерін талқылаңыздар. Электр өрісінің жүйеге әсерін зерделеңіздер.

(9.8) Сутегі атомының  $n=2$  күйлеріне электр өрісінің әсерін (Ло Сурдо-Штарк эффектісі) зерделеңіздер. Спинді ескермеңіздер.

(9.9) Бөлшек бірөлшемді  $U$  потенциалында қозғалсын. Осы жүйенің барлық өзіндік функцияларын білеміз және жүйеге  $V[x]$  ұйтқуы әсерін тигізеді деп пайымдайық. Әдетте, өзіндік мәндердің бірінші ретті түзетулері интегралдауға әкеледі. Ал толқындық функциялар  $\Psi^{(1)}$  бірінші ретті түзетулерін есептеу шексіз мүшелер бойынша қосындылауға жеткізеді. Енді  $\Psi^{(1)}$  табу есебін дербес туындылардың біртекті теңдеулерінің шешімдеріне түрлендіруге болатынын көрсетіңіздер. Ол үшін  $\Psi^{(1)}(x) = f(x)\Psi^{(0)}(x)$  өзіндік функциялардың бірінші ретінің шешімі деп қабылдап, .. үшін теңдеуді жазу керек. Дербес жағдайда, сфералық симметриялық потенциал үшін және ұйтқуды тұрақты электр өрісі түрінде қарастырыңыздар. Осылайша шешу амалын Дальгарно-Льюис әдісі деп атайды.

(9.10) Ені  $a$  және ол  $a\chi \ll 1$  шартын қанағаттандыратын бірөлшемді потенциалдық шұңқырдағы қозғалатын бөлшектің

поляризациялануын есептеңіздер. Мұндағы  $\chi = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$  және  $E$  – байланыс энергиясы. (9.9) есебінің шешімін пайдаланыңыздар.

(9.11) Сутегі атомы негізгі күйінің поляризациялануын есептеңіздер. (9.9) есебінің шешімін пайдаланыңыздар. Континуумдық күйлердің үлесіне баға беріңіздер.

(9.12) Спиндік әсерлесулер сутегі атомының сетінеген  $n=2$  деңгейін екі ( $2s_{1/2}, 2p_{1/2}$ ) және  $2p_{3/2}$  деңгейлеріне жіктейді. Осы бөлінуді ескеріп, электр өрісінің әсерін (Ло Сурдо-Штарк эффектiсi) зерделенiздер. ( $2s_{1/2}, 2p_{1/2}$ ) деңгейi өзара қашықтығы шамамен  $10^{-6}$  эВ болатын радиациялық түзетулер (Лэмб ығысуы) есебінен жіктеледі. Осы бөлінудің Ло Сурдо-Штарк эффектiсiнде салдары қандай болады?

(9.13) Параболалық координаталары  $(\xi, \eta, \varphi)$  төмендегідей анықталады:

$$x = \sqrt{\eta\xi} \cos(\varphi), \quad y = \sqrt{\eta\xi} \sin(\varphi), \quad z = \frac{\xi - \eta}{2}.$$

Сутегі атомы үшін Шредингер теңдеуі осы координаталар жүйесінде ажыратылатыны (NB-6.4-ParabolicCoordinates.nb талдауында) көрсетілген болатын. Ло Сурдо-Штарк эффектiсiн параболалық координаталарда есептеңіздер. Бірінші және екінші ретті эффектiлердi кез келген күй үшін есептеңіздер.

(9.14) Гелий атомы үшін электрон-электрондық әсерлесуін кіші ұйтқу деп есептеуге болады. Гелий атомы негізгі күйінің энергиясын ең төменгі ретін есептеңіздер. Келесі функциялардың

$$\frac{1}{r}, \quad \frac{e^{-r\mu}}{r}, \quad e^{-r\mu}$$

үшөлшемді Фурье-түрлендірулерін табыңыздар және осы есептің шешімі үшін қалайша пайдалануға болатынын көрсетіңіздер.

(9.15) Гелий атомы үшін электрон-электрондық әсерлесуін кіші ұйтқу деп есептеуге болады. Гелий атомы бірінші қозған S күйінің энергиясын ең төменгі ретін есептеңіздер. Мүмкін болатын күйлерді Паули принципі қалай таңдайтынын талқылаңыздар.

(9.16) Гелий атомы жалпы ( $1s, nL$ ) күйінде болсын. Электрондар арасындағы әсерлесу ұйтқу теориясына сай ескеріледі.

Қозған күйлерінің ұйтқымаған гамильтонианының потенциалдарын асимметриялы: электрондардың бірі үшін  $Z/r$  және өзгесі үшін  $(Z-1)/r$  түрінде алыңыздар. Негізгі күйдің энергиясын есептеңіздер.

- (9.17) Сілтілік атомның қозған күйін сыртқы электронның толқындық функциясымен сипаттауға болады. Оның (сыртқы электронның) ядро мен қалған электрондардың (заряды  $|e|$ ) кулондық потенциалындағы экрандалуын  $V(r)$  орталық ұйтқуға кіші түзетуі деп қарастырайық. Онда осы жуықтауда оптикалық электронның спектрі Ридбергтің түзетілген формуласымен сипаттауға болатынын көрсетіңіздер.
- (9.18) Еркін бөлшек мөлшері  $(a, b, c)$  болатын қораптың ішінде қозғалады. Онда  $a, b, c$  өзгерісі энергия деңгейлерінің өзгерісіне қалай әсер ететінін талқылаңыздар. Өлшемдердің изотроптық өзгерістері, яғни стационарлық күйлердің орташа энергиясы өрнектелген бірлік ұзындықтың өзгерісі үшін релятивистік емес идеалды газ күйінің теңдеуіне әкелетінін көрсетіңіздер.
- (9.19) Еркін бөлшек радиусы  $R$  сфералық шұңқырдың ішінде қозғалады. Егер сфера осьтері  $(b, b, a)$  болатын (мұндағы  $b < a$ ) эллипсоидқа деформацияланатын болса, энергияның деңгейлері қалай өзгертетінін талқылаңыздар. Нәтижесін кез келген деформация үшін жалпылаңыздар.
- (9.20) Сутегі атомының негізгі күйіндегі фотоэффектінің қимасын есептеңіздер, егер  $ka_B \ll 1$  болса; мұндағы  $k$  – фотонның толқындық саны. Ұшып шығатын электронның жуықталған толқындық функциясын жазық толқынмен алмастырып, қолданылған жуықтаудың негізделгендігін талқылаңыздар.
- (9.21) Дипольдік, квадрупольдік және магниттік дипольдік әсерлесулерді ескере отырып, сәулеленудің затпен әсерлесу гамильтонианының айқын түрін жазыңыздар. Әрбір жағдай үшін таңдау ережелерін талқылаңыздар.
- (9.22) Атом жүйесі сыртқы айнымалы электрлік өріске орналасқан болсын. Индукцияланған дипольді есептеңіздер. (Дисперсия заңы).
- (9.23) Гелий атомындағы электрон-электрондық әсерлесуді кіші ұйтқу деп қарастырайық. Ұйтқымаған гамильтониан  $H_0$  кулондық потенциалдағы екі тәуелсіз электрондарды сипаттайды. Жүйенің иондалу энергиясын ұйтқудың нөлдік ретінде жазыңыздар. Енді гелий  $2s^2$  күйінде (екі электрон да  $2s$ -деңгейінде) табылсын. Электрон-электрондық әсерлесу

жүйенің ыдырауына жеткізе алатынын көрсетіңіздер және осы үдерістің бірлік уақыттағы ықтималдылығын жазыңыздар (автоиондалу).

### Сандық талдау

- (9.1) Ұйтқу теориясын жүзеге асыру үшін гармоникалық осциллятор күйлерінің негізінде ақтық матрицалық тұжырымдауды қолданыңыздар. Мұндай әдіс ұйтқу теориясының кез келген ретінде әсерлесудің полиномдық потенциалдар үшін дәл нәтижелерін беруі мүмкін. Сандық матрицалардың орнына операторларды пайдалану әдісін тұжырымдаңыздар және бағдарлама жазыңыздар; ол кватрикалық осциллятор үшін кез келген ретті дәлдікпен ұйтқу теориясының аналитикалық түрінде есептейтін болсын.
- (9.2) Сутегі атомының негізгі күйі поляризациясының  $\varepsilon^4$  ретіне дейін есептеу үшін Дальгарно-Льюис әдісін қолданыңыздар.
- (9.3) Сутегі атомының кез келген байланысқан деңгейінің электр өрісінің есебінен энергиясының ығысуын ұйтқу теориясының кез келген ретін есептеу үшін параболалық координаталарын пайдаланыңыздар. Есептеулерді сандық және аналитикалық түрлерінде жүргізіңіздер.
- (9.4) Кватрикалық осциллятор гамильтонианның өзіндік мәндері үшін сандық рекурренттік қатынастарын табыңыздар. Ұйтқу теориясы бойынша алғашқы 50 немесе 60 ретін есептеңіздер және жуықталған қатарларды қайта қосындылаудың Паде техникасын қолданыңыздар.

# Вариациялық әдістер

# 10

- 10.1 Вариациялық принцип
- 10.2 Қарапайым қосымшалар
- 10.3 Гелийдің негізгі күйі
- Қосымшаларға нұсқаулар
- Есептер
- Сандық талдау

Ескі де болса өте күшті жуықтау әдісі, ол – вариациялық әдіс. Осы тарауда әдістің негізгі идеялары баяндалған және бірнеше қосымшалары қарастырылған.

## Вариациялық принцип

Кванттық механиканың негізгі есептерінің бірі болып берілген гамильтонианның өзіндік мәндері мен өзіндік күйлерін анықтау табылады:

$$H\psi = E\psi . \quad (10.1)$$

Егер жүйе көптеген бөлшектерден құралған болса (молекулалар сияқты) немесе дәл шешілетін гамильтонианның негізгі бөлігі жоқ болса, онда ұйтқу теориясы көмегін көрсете алмайды. Вариациялық әдіс есепті шешудің жиі мықты құралы болып табылады.

Негізгі идея келесіде қорытылған. Ол үшін  $\psi(q; \{\beta\})$  «сынақ» толқындық функцияларының жиынын енгізейік, мұндағы  $\{\beta\}$  - бір немесе одан артық вариациялық параметр(лер). Енді кез келген  $\psi$  нормаланған толқындық функциясы (сондықтан  $\psi(q; \{\beta\})$ ) үшін келесі теңсіздік орындалады

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_0 . \quad (10.2)$$

Мұндағы  $E_0$  -негізгі күйдің энергиясы. Дәлелдеуі қарапайым: кез келген функцияны (10.1)  $H$  -тың  $\psi_n(q)$  ақиқат өзіндік күйлері бойынша жіктеуге болады.

$$\psi(q; \{\beta\}) = \sum_n c_n \psi_n(q); \quad \sum_n |c_n|^2 = 1. \quad (10.3)$$

Осы өрнекті (10.2) теңдігінің сол жағына апарып қоятын болсақ, онда

$$\langle \psi(\beta) | H | \psi(\beta) \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0$$

теңдігін аламыз.  $\langle \psi(\beta) | H | \psi(\beta) \rangle$  шамасын  $\beta$  -ға қатысты минимизациялайтын болсақ, онда  $E_0$  -дің жуықтауы болатын  $E_0^{(\text{вар})}$  аламыз, әрі олар төмендегідей байланыста болады

$$E_0^{(\text{вар})} \geq E_0. \tag{10.4}$$

Жалпы жағдайда гильберттік кеңістіктегі кез келген  $|\psi\rangle$  функциясын (нормаланған болуы шарт емес) қарастырайық және гамильтонианның осы күйдегі орташа мәнін қарастырайық:

$$Q(\psi) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}.$$

Енді  $|\bar{\psi}\rangle$  өзіндік векторы  $\psi$  -дің кез келген өзгерісіне қатысты  $Q$  минимумына сәйкес келсін. Онда  $Q$  минимумындағы  $\bar{E}$  мәні деп атайық:

$$\bar{E} = Q(\bar{\psi}) = \frac{\langle \bar{\psi} | H | \bar{\psi} \rangle}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle}.$$

$Q$  минимумы стационарлық нүкте болып табылады, сондықтан вариацияның бірінші ретінде  $|\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle + |\delta\psi\rangle$  қабылдайтын болсақ, онда

$$\delta Q = \frac{\langle \delta\psi | H | \bar{\psi} \rangle}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} - \frac{\langle \bar{\psi} | H | \bar{\psi} \rangle}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \frac{\langle \delta\psi | \bar{\psi} \rangle}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} = \frac{1}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \left[ \langle \delta\psi | H | \bar{\psi} \rangle - \bar{E} \langle \delta\bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle \right] = 0.$$

Бұл кез келген вариация үшін орынды болғандықтан,

$$H |\bar{\psi}\rangle = \bar{E} |\bar{\psi}\rangle \tag{10.5}$$

орындалатынын байқауға болады. Оған қоса бұл Шредингер теңдеуі, ал  $\bar{E}$  оның өзіндік мәні. Алайда вариациялар тек  $H$  кеңістігіндегі функциялардың субъективті қарастыратын болсақ, онда жуықталған өзіндік мәндерді аламыз.

Эквиваленттік тұжырымдама болып Лагранж көбейткішін енгізу табылады, сонда келесі вариациялық есебін қарастырамыз

$$Q'(\psi) = \left[ \langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda (\langle \psi | \psi \rangle - 1) \right].$$

$Q'$  үшін стационарлық шарттардың орнатылуы  $\psi$  және  $\lambda$  екеуіне де қатысты келесі өрнектерін береді:

$$\delta_{\psi} Q' = \langle \delta\psi | (H - \lambda) | \psi \rangle = 0; \quad \delta_{\lambda} Q' = \delta\lambda (\langle \psi | \psi \rangle - 1) = 0.$$

Екінші өрнек шектеудің нормалануын беретін болса, ал біріншісінен Шредингер теңдеуін аламыз.

Жалпы күйдің энергиясын табу үшін барлық өзге де төменгі (не дәл, не вариациялық) күйлері мен ортогоналдық шарты одан әрі шектеу ретінде орнатылуы қажет. Сол шектеулер Лагранж көбейткішін қолданудың немесе функциялардың жиынын сәйкес түрде таңдаудың көмегімен жүзеге асырылады.

Негізгі идеяның қарапайымдылығына және көнелік ерекшелігіне қарамастан осы әдіс өте нәтижелі, оған қоса өзге әдістермен талдаудың қиындыққа соғатын есептерді шешуге мүмкіндік туғызады. Назар аударыңыздар: вариациялық есептеулердің сапасы сынақтық толқындық функциялардың таңдауына едәуір дәрежеде тәуелді: егер  $\psi(q; \{\beta\})$  сынақ толқындары дұрыс әрі сәтті таңдалған болса, онда әдіс міндетті түрде дәл жауабына әкеледі. Әдетте олай бола бермейді, бірақ егер сынақ функцияларының жеткілікті кең класы қолданылса (мысалы, еркін параметрлердің саны жеткілікті болса), онда нәтиже жиі жақсы болып жатады.

Вариациялық әдістің нәтижелері соншалықты жақсы болуының себептерін көрсетейік: егер толқындық функциядағы қателіктің реті  $O(\epsilon)$  болса, онда энергия қатесінің реті  $O(\epsilon^2)$ . Осыған көз жеткізейік. Ол үшін толқындық функцияның  $\psi_{\min}$  минимумы  $\langle \psi_{\beta} | H | \psi_{\beta} \rangle$  болсын делік:

$$\psi_{\min} = (\psi_0 + \epsilon\psi_{\perp}) / \sqrt{1 + \epsilon^2},$$

мұндағы  $\psi_0$  - негізгі күйдің дұрыс толқындық функциясы,  $\psi_{\perp}$  - алдында аталған функцияға ортогоналды және  $\psi_n$  (нормаланған) сызықтық комбинациясы ( $n \neq 0$ ). Осы функцияны  $\langle \psi_{\beta} | H | \psi_{\beta} \rangle$  апарып қойғанда, табамыз:

$$E|_{\min} \simeq E_0 + O(\epsilon^2)$$

### Ескертулер

- Вариациялық әдістің артықшылықтарының бірі бастапқы есеп (әдетте, екінші ретті күрделі дифференциалдық функциялар) саны шекті болатын параметрлерге қатысты минимизациялау есебімен алмастырылады, ал олар алгебралық теңдеулер болып табылады,

сондықтан жеңіл де болады.

- Әдістің негізгі шектеуі, ол - қолданылатын сынақ функциялары жиынының шешімдері үшін ешқандай әмбебап әдістерінің болмауында. Ол үшін сынақ функцияларының жеткілікті кең класын табу қажет, егер ондай ерекшелігі болса, онда симметриясын да ескерген жөн. Алайда физикалық интуицияның үні - дәл толқындық функцияның түрі қандай болуы қажеттілігі сандық есептеулердің қисынды ретімен жүргізілетін жақсы нәтиже алудың негізгі факторы болып табылады.

### 10.1.1 Төменгі шектер

Вариациялық әдіс (10.4) гамильтонианының  $E_i$  өзіндік мәндерінің жоғары шегін береді, сонымен қатар олардың төменгі шектерінде алуға болады. Ал екеуі бірігіп, әдістің дәлдігін бағалауға мүмкіндік береді. Әдіспен [Weinstein (1928), MacDonald (1934)] кітабында танысуға болады. Енді белгілі күйдегі гамильтонианның дисперсиясын қарастырайық

$$\sigma = \langle H\psi | H\psi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle^2 \equiv D_\psi - \mathcal{E}_\psi^2.$$

Бұдан  $\sigma \geq 0$  болатынын бірден көреміз. Расында, егер  $H$  гамильтонианының дәл өзіндік мәндері  $E_k$  болса және жалпы векторды  $H$  өзіндік векторлары бойынша жіктейтін болсақ

$$\psi = \sum_k a_k |e_k\rangle; \quad H |e_k\rangle = E_k |e_k\rangle, \quad k = 0, 1, \dots,$$

онда

$$\mathcal{E}_\psi = \sum_k E_k |a_k|^2; \quad D_\psi = \sum_k |a_k|^2 E_k^2; \quad \sum_k |a_k|^2 = 1 \quad (10.6)$$

$$\begin{aligned} \sigma &= \sum_k |a_k|^2 E_k^2 - 2\mathcal{E}_\psi \sum_k |a_k|^2 E_k + \mathcal{E}_\psi^2 \sum_k |a_k|^2 \\ &= \sum_k |a_k|^2 (E_k - \mathcal{E}_\psi)^2 \geq 0 \end{aligned}$$

$E_k$  өзіндік мәндерінің арасында  $E_j$  мүшесі  $\mathcal{E}_\psi$  -ға ең жақыны болсын, яғни

$$(E_j - \mathcal{E}_\psi)^2 \leq (E_k - \mathcal{E}_\psi)^2, \quad \forall k \text{ үшін.}$$

Бұдан табамыз:

$$\sigma \geq (E_j - \mathcal{E}_\psi)^2 \sum_k |a_k|^2 = (E_j - \mathcal{E}_\psi)^2.$$

Демек, бірден

$$\mathcal{E}_\psi - \sqrt{\sigma} \leq E_j \leq \mathcal{E}_\psi + \sqrt{\sigma} \quad (10.7)$$

теңсіздігінің орындалатынын көреміз. Осылайша, (10.7) аралығында кем дегенде бір өзіндік мәнін табамыз. Ал  $|a_k|^2$  коэффициенттерін белгісіз параметрлер ретінде қарастырып отырып, егер жуықтауымыз жеткілікті түрде жақсы болса, онда  $\sigma$  қателік мөлшері ретінде қабылдап,  $\mathcal{E}_\psi$  -ді  $E_j$  -дің бағалауы тәрізді қарауымызға болады.

Тиімді әдістердің бірі – Темпл әдісі [Temple (1934)] болып табылады. Анықталғандық болуы үшін энергияның негізгі күйі үшін шектерді қарастырайық. Алдымен  $E_0, E_1$  берілсін және олар  $H$  -тың дәл өзіндік мәндері болсын. Онда

$$\langle (H - E_0)\psi | (H - E_1)\psi \rangle \geq 0, \quad \forall \psi \text{ үшін,} \quad (10.8)$$

теңсіздігін аламыз.  $\psi$  -ді әдеттегідей қатарға жіктеп

$$|\psi\rangle = \sum_k a_k |e_k\rangle, \quad H |e_k\rangle = E_k |e_k\rangle,$$

келесі теңсіздікті табамыз:

$$\begin{aligned} \langle (H - E_0)\psi | (H - E_1)\psi \rangle &= \left[ \sum_{k \neq 0} a_k^* (E_k - E_0) \langle e_k | \right] \left[ \sum_{j \neq 1} a_j (E_j - E_1) | e_j \rangle \right] = \\ &= \sum_{k \geq 2} |a_k|^2 (E_k - E_0)(E_k - E_1) \geq 0. \end{aligned}$$

(10.6) теңдеуіндегі белгілеулерді қолданып, (10.8) теңсіздігінен келесі өрнек шығады:

$$E_0 \geq \mathcal{E}_\psi - \frac{\sigma}{E_1 - \mathcal{E}_\psi}. \quad (10.9)$$

Назар аударыңыздар: (10.6) теңдігін қолдану үшін  $E_1$  -ді бағалануы қажет, оны стандарттық вариациялық әдістен алуымызға болады. (10.9) теңсіздігіндегі екінші мүшені қатенің бағалануы деп қарастыруымыз керек. Егер  $E_1 \sim E_0$  болса, онда бағалау аса дәл бола қоймайды.

Осы әдісті кез келген күй үшін қолдануға болады ([Delves (1972)] қараңыз):

$$E_j \geq \mathcal{E}_\psi - \frac{\sigma}{E_{j+1} - \mathcal{E}_\psi}. \quad (10.10)$$

(10.7) және (10.10) бағалауларын қолданудың мәселелері  $D$  –ның бағалануына өкеледі. Бәрібір ол вариациялық процедуралар кезінде жіберілген қателіктерді бағалуын қарастырады.

### 10.1.2 Қиылған гильберттік кеңістік

Вариациялық процедураның бірінші қадамы - бір немесе бірнеше вариациялық параметрлерге тәуелді функциялар жиынының таңдалуы болып табылады. Сол параметрлерге қатысты минимизациялаудың нәтижесінде толқындық функция, сонымен қатар энергия анықталады.

Осындай ең қарапайым таңдаулардың бірі болып базистік векторлардың арасынан саны шектелгендерін сақтап қалуы табылады, мысалы, кейбір вариациялық параметрлерімен аталған гамильтониандардың өзіндік векторларын айтуымызға болады. Алгебралық тұрғыдан шексіз базалық векторларының арасынан  $n$  функциясын, яғни  $\{\phi_i\}$ ,  $i=1,2, \dots, n$  функцияларын сақтап қалу гильберттік кеңістікті субжиындарға қиюды білдіреді. Қарастырылып отырған есептің гамильтонианын шектіөлшемді матрица тәрізді өрнектейік

$$H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle,$$

онда есептің алгебралық түрге, яғни  $H$  матрицасын диагональдауға өкелетінін көреміз.

Нақты Шредингер теңдеуін қарастырайық

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi + U(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (10.11)$$

және базис ретінде біріне-бірі ортогоналды болуы міндетті емес  $\phi_i$ ,  $i=1 \dots n$ , сызықтық тәуелсіз функцияларының жиынын таңдайық. Біздің сынақ функцияларының жиыны ретінде олардың комбинацияларын таңдаймыз:

$$\Phi = \sum_{i=1}^n c_i \phi_i(x).$$

Вариациялық параметрлері болып  $c_i$  кеңею параметрлері табылады. Энергияның  $\Phi$  күйіндегі орташа мәні болады:

$$Q(c) = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle},$$

ал стационарлық шартынан Шредингер теңдеуі шығатыны біз

көрсеткенбіз:

$$\begin{aligned} 0 = \delta Q &= \\ &= \frac{\langle \delta \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} - \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \frac{\langle \delta \Phi | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \Rightarrow H | \Phi \rangle = E | \Phi \rangle; E \equiv Q(\Phi). \end{aligned} \quad (10.12)$$

Орнына қойып

$$H_{ij} = \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle; \quad N_{ij} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle,$$

және (10.12) теңдеуін  $\langle \varphi_i |$  -ге көбейтіп, табамыз:

$$H_{ij} c_j = E N_{ij} c_j. \quad (10.13)$$

Егер базистік функциялары ортогоналды  $N_{ij} = \delta_{ij}$  болса, онда қосымша ешқандай қиындықтар тумайды. (10.13) теңдеуі – субкеңістікке проекцияланған Шредингер теңдеуі. (10.13) теңдеуінің шешімі  $\tilde{E}_1$  ең төменгі өзіндік мәнді береді, ол дәл өзіндік мәнің  $E_1$  аппроксимациясының көрінісі. Сонымен, (10.13) теңдеуінің жалпы  $n$  өзіндік мәндері бар және оларға  $|\tilde{\psi}_i\rangle$  байланысқан өзіндік векторлары сәйкес келеді:

$$|\tilde{\psi}_i\rangle = \sum_i c_i \varphi_i; \quad H |\tilde{\psi}_i\rangle = \tilde{E}_i |\tilde{\psi}_i\rangle, \quad (10.14)$$

$|\tilde{\psi}_i\rangle$  векторлары әртүрлі өзіндік мәндеріне сәйкес келетін өзіндік векторлары болағандықтан, олар өзара автоматты түрде ортогоналды. Алайда, *априори* ол өздігінен анық болмайды, екінші өзіндік мәні дәл өзіндік мәнінен  $E_2^{th}$  артық болып бағаланады және т.с.с. Расында,  $|\psi_1\rangle$  дәл негізгі күйіне  $\tilde{\Phi}$  ортогоналды болатын кез келген күйді  $\psi_i$ ,  $i \geq 2$  бойынша жіктеуге болады, сондықтан

$$\langle \tilde{\Phi} | H | \tilde{\Phi} \rangle = \sum_{i=2} E \langle \tilde{\Phi} | \psi_i \rangle^2 \geq E_2 \sum_{i=2} \langle \tilde{\Phi} | \psi_i \rangle^2 = E_2. \quad (10.15)$$

өрнегін аламыз. Енді жуықталған күйлердің алғашқы екеуінің  $|\tilde{\psi}_1\rangle, |\tilde{\psi}_2\rangle$  сызықтық комбинациясын қарастырайық

$$|\tilde{\Phi}\rangle = x |\tilde{\psi}_1\rangle + y |\tilde{\psi}_2\rangle$$

Екі  $x, y$  параметрлерін әрқашан да  $|\tilde{\psi}_1\rangle$  күйіне ортогоналды болатындай етіп таңдауымызға болады. Егер нормалау шартын орнататын болсақ, онда екі  $x, y$  айнымалылары бар екі теңдеу аламыз:

$$\langle \psi_1 | \tilde{\Phi} \rangle = x \langle \psi_1 | \tilde{\psi}_1 \rangle + y \langle \psi_1 | \tilde{\psi}_2 \rangle = 0; \quad x^2 + y^2 = 1.$$

Осылайша (10.14) және (10.15) өрнектерін қолданып, табамыз:

$$\langle \tilde{\Phi} | H | \tilde{\Phi} \rangle = \tilde{E}_1 x^2 + \tilde{E}_2 y^2 = \tilde{E}_2 - x^2 (\tilde{E}_2 - \tilde{E}_1) \geq E_2 \Rightarrow \tilde{E}_2 \geq E_2.$$

Соңғы теңсіздікті  $(\tilde{E}_2 - \tilde{E}_1) \geq 0$  салдары болғандықтан алдық. Аналогиялы түрде өзге де (дискретті) күйлеріне өтуге болады.

## 10.2 Қарапайым қосымшалар

Осы идеяларды нақты бірнеше элементарлық мысалдарды қарастыру барысында көрсетеміз.

### 10.2.1 Гармоникалық осциллятор

Гармоникалық осцилляторды қарастырайық ( $\hbar = 1$ ,  $m = 1$  жүйесінде берілген):

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2.$$

Осы жағдайда негізгі күй үшін дәл жауабын біз білеміз:

$$E_0 = \frac{1}{2} \omega; \quad \psi_0 = \left( \frac{\omega}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2} \omega x^2}.$$

Алайда осы есепті вариациялық әдіспен шешіп көрейік.

#### Бірінші жуықтау

Алдымен (нормаланған) сынақ функцияларын

$$\varphi = \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} \alpha x^2} \tag{10.16}$$

түрінде пайымдайық, мұндағы  $\alpha$  - вариациялық параметр. Онда (10.16) күйіндегі  $H$  орташа мәні келесі өрнекпен беріледі

$$E(\alpha) = \frac{\alpha}{4} + \frac{\omega^2}{4\alpha}.$$

Ал  $\alpha$  бойынша  $E(\alpha)$  -ның минимумы төмендегідей анықталады:

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0 \Rightarrow 1 - \frac{\omega^2}{\alpha^2} = 0 \Rightarrow \alpha = \omega$$

және мұны қайта  $E(\alpha)$  үшін өрнегіне апарып қоятын болсақ, онда

$$E(\alpha) \Big|_{\alpha=\omega} = \frac{\omega}{4} + \frac{1}{4} \frac{\omega^2}{\omega} = \frac{\omega}{2}$$

дәл жауабын аламыз.

### Екінші ретті жуықтау

Енді жолымыз тым жеңіл болмас үшін сынақ функциясының түрін төмендегідей етіп таңдайық:

$$\varphi = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}.$$

Функцияның жұптылығын пайдаланып, келесі түрде жаза аламыз:

$$E(\alpha) = 2 \int_0^{\infty} \varphi^* H \varphi dx = \alpha \int_0^{\infty} dx \left\{ \left( \frac{d}{dx} e^{-\alpha x} \right)^2 + \omega^2 x^2 e^{-2\alpha x} \right\} = \frac{1}{2} \left( \alpha^2 + 2\omega^2 \frac{1}{4\alpha^2} \right).$$

Ал  $E(\alpha)$  минимумына  $\alpha^2 = \omega / \sqrt{2}$  мәнінде қабылдайды;  $\alpha$ -ның мұндай мәніне

$$E_{\min} = \frac{\omega}{\sqrt{2}} \simeq 0,707\omega > \frac{\omega}{2},$$

тым нашар нәтиже емес (40%).

### Үшінші ретті жуықтау

Жуықтауды арттырып көрелік:

$$\varphi = (1 + \beta x^2) e^{-\alpha|x|}.$$

Өрнектерді жеңілдету үшін  $\omega = 1$  деп қабылдайық. Онда

$$\frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = \frac{2(\alpha^4 + 2\alpha^8) - 4\alpha^2(-3 + \alpha^4)\beta + (45 + 2\alpha^4)\beta^2}{8\alpha^6 + 8\alpha^4\beta + 12\alpha^2\beta^2}$$

Осы жағдайда минимумды сандық түрінде табамыз:

$$\alpha = -0.0523; \quad \beta = 0.73; \quad E_{\min} = 0.64;$$

өткен жағдайға қарағанда нәтиженің артқанын көреміз.

## 10.2.2 Гелий: элементарлық вариациялық есептеулер

Алдыңғы тарауда гелийдің негізгі күйін ұйтқу теориясының аясында қарастырғанбыз, ал мұнда сол жүйені қарапайым вариациялық

теориясында қайта зерделейміз. Атомдық бірліктерде ұзындық пен энергия  $r_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 1$  және  $\epsilon_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} = 2Ry \approx 27.2 \text{ eV}$ , ал гамильтонианның түрі

$$H = H_1 + H_2 + H_{12} = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|}. \quad (10.17)$$

Ұйтқымаған гамильтонианды  $H_1 + H_2$ , ал оған сәйкес келетін негізгі күйдің ұйтқымаған толқындық функциясын  $\Psi^{(0)} = \psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2)$  түрінде қабылдадық

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} Z^{3/2} e^{-Zr}.$$

Бұл  $Z=2$  гелий атомы үшін орынды. Алайда гелий тәрізді атомдар үшін де формула орынды болғандықтан, есептеулерді жалпы  $Z$  үшін жүргіземіз. Нәтижесінде ұйтқу теориясының бірінші ретінде  $H_{12}$  түрі атомдық бірліктерде төмендегідей болады

$$E_{\text{ұйт}} = Z^2 - \frac{5}{8} Z.$$

Вариациялық процедуралардың (рәсімнің) бірінші қадамы болып сынақ толқындық функциясын таңдау табылады. Біздің жағдайымызда физикалық идеядан келесі тұспалдау туындайды: әрбір электрон ядроның зарядын толығымен «көрмейді», өйткені басқа да қозғалыстағы электрондардың теріс зарядты бұлтымен экрандалады. Сондықтан вариацияланатын толқындық функцияларды төмендегідей етіп қабылдайық:

$$\psi(x_1, x_2) = \varphi(r_1)\varphi(r_2); \quad \varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} Z_1^{3/2} e^{-Z_1 r},$$

мұндағы  $Z_1(Z_1|e|)$  - әрбір электронның эффективті заряды. Есептеу қиын емес, оның түрі сутегі типтес толқындық функциялары, бірақ заряды  $Z$  емес, енді  $Z_1$  болады. Сутегі типтес атомдары үшін  $K$  кинетикалық энергия мен  $U$  потенциалдық энергиялардың арасында қарапайым қатынасы<sup>1</sup> орындалады:

$$\langle K \rangle = -\frac{1}{2} \langle U \rangle = -E.$$

1 Бұл вириал теоремасының дербес жағдайы, оны жуық арада талдайтын боламыз.

Демек,

$$\left\langle \frac{p_1^2}{2} \right\rangle = \frac{Z_1^2}{2}; \quad \left\langle -\frac{Z_1}{r} \right\rangle = -2 \frac{Z_1^2}{2} \Rightarrow \left\langle -\frac{Z}{r} \right\rangle = -ZZ_1;$$

$$\langle H_1 \rangle = \frac{Z_1^2}{2} - ZZ_1 \Rightarrow \langle H_1 + H_2 \rangle = Z_1^2 - 2ZZ_1.$$

Екі электронның кулондық әсерлесуін сипаттайтын мүшенің бағалануы ұйтқу теориясындағы нәтижесімен бірдей болады, айырмашылығы  $Z$ -тің орнына  $Z_1$ -ді алмастыруымыз керек:

$$\langle H_{12} \rangle = \frac{5}{8} Z_1.$$

Осылайша келесі нәтижесін аламыз

$$\langle H \rangle = E(Z_1) = Z_1^2 - 2ZZ_1 + \frac{5}{8} Z_1 = Z_1^2 - 2Z_1 \left( Z - \frac{5}{16} \right). \quad (10.18)$$

Осы теңдікті минимизациялаудан табамыз

$$\frac{dE}{dZ_1} = 0 \Rightarrow Z_1 = Z - \frac{5}{16}; \quad \langle H \rangle_{\text{мин}} = - \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2.$$

Эксперименталдық тікелей мағлұматтарды иондалу энергиясынан аламыз, яғни электрондардың бірін босатуға қажетті энергия. Электронды босатқан соң, қалған байланысқан электрондар үшін  $E_0 = -Z^2 / 2$  болады, демек, иондалу энергиясы  $J(Z) = E_0 - E$  түрінде беріледі. Ұйтқу және вариациялық бағалаулар үшін сәйкесінше тең болады:

$$J_{\text{ұйтқ}}(Z) = \left( \frac{Z^2}{2} - \frac{5}{8} Z \right) \text{ а.б.} = \left( Z^2 - \frac{5}{4} Z \right) Ry;$$

$$J_{\text{вар}}(Z) = \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 - \frac{Z^2}{2} = \left( \frac{Z^2}{2} - \frac{5}{8} Z + \frac{25}{256} \right) \text{ а.б.} =$$

$$= \left( Z^2 - \frac{5}{4} Z + \frac{25}{128} \right) Ry,$$

мұндағы нәтижелер Ридберг бірліктерінде (Ry) келтірілген. Естеріңізге саламыз: 1 а.б. = 2Ry. Ал 10.1-кестесінде гелий тәрізді бірнеше жүйелер үшін ұйтқу, вариациялық және эксперименталдық нәтижелері

көрсетілген.

	$H^-$	$He$	$Li^+$	$Be^{++}$
$J_{\text{үйт}}$	-0.25	1.5	5.25	11.0
$J_{\text{вар}}$	-0.055	1.695	5.445	11.195
$J_{\text{экс}}$	+0.055	1.807	5.560	11.312

**10.1-кесте.** Кейбір атомдардың иондалу потенциалының жуықталған және эксперименттік мәндері

Енді  $J_{\text{экс}} - J_{\text{вар}}$  айырымы  $Z$  – те тұрақты болатынын атап өтейік. Қарастырып отырған ұйтқу теориясы мен қарапайым вариациялық жуықтауы  $H^-$  ионының байланысқан күйінің бар болуын түсіндіре алмайды. Бірақ басқа да элементтер үшін ұйтқу теориясына қарағанда айтарлықтай артықшылығы бар.

### Ескерту

Жоғарыда табылған нәтижелер қызықты қайта түйсінуге әкеледі. (10.17) дәл гамильтонианын қарастырайық және оны «ұйтқыған» гамильтониан және «ұйтқымаған» гамильтонианға төмендегідей жіктейік

$$H = \left[ \frac{1}{2} p_1^2 - \frac{Z_1}{r_1} + \frac{1}{2} p_2^2 - \frac{Z_1}{r_2} \right] + \left[ \frac{1}{r_{12}} + \frac{Z_1 - Z}{r_1} + \frac{Z_1 - Z}{r_2} \right] \equiv H_{Z_1} + V_{Z_1}.$$

Басқаша айтатын болсақ, онда біз фиктивті «ұйтқымаған»  $H_{Z_1}$  жүйесін енгіздік, ал қалғандарының барлығын ұйтқу төрізді қарастырамыз. Бірінші ретінде келесі нәтижелерді аламыз:

$$E(Z_1) = \langle \psi | H_{Z_1} | \psi \rangle + \langle \psi | V_{Z_1} | \psi \rangle.$$

Алайда  $H_{Z_1}$  операторының өзіндік мәні – ол бір жағынан ұйтқымаған толқындық функциясы болса, екінші жағынан – жоғарыда қабылданған сынақ толқындық функциясы. Вариациялық процедурада  $\langle \psi | H_{Z_1} | \psi \rangle$  минималдауға  $H$ -ты жасанды түрде  $H_{Z_1} + V_{Z_1}$  қосындыларына бөлу сәйкес келеді, онымен қоса «ұйтқу» эффектісі мүмкіндігінше кіші болуы керек. Расында соңғысының

$$\langle y | V_{Z_1} | y \rangle = \frac{5}{8} Z_1 + 2(Z_1 - Z)Z_1 = 2Z_1(Z_1 - Z + \frac{5}{6})$$

вариациялық мәні эффективті зарядтың  $Z_1 = Z - (5 / 16)$  үшін болғанда нольге айналады. Басқа сөзбен айтқанда, вариациялық толқындық функциясы дәл негізгі күйдің толқындық функциясын ең жақсы түрде модельдеуді қолдана алады.

### 10.2.3 Вириал теоремасы

3.2-бөлімінде талқыланған вириал теоремасы [координата операторы мен потенциалдық энергияның біртекті болған стационарлық күйінде табылатын] потенциалдық энергиясы мен кинетикалық энергияның орташа мәндерінің арасындағы байланысты орнатады. Ал оның (теореманың) классикалық аналогы көптеген периодтарына қатысты уақыт бойынша орташа мәнімен байланысты. Қызығы сол, теореманы вариациялық қарастырудың көмегімен де дәлелдеуге болады.

Ол үшін  $\nu$ , яғни  $V(kx) = k^\nu V(x)$  болатын біртекті потенциалды қарастырамыз. Мұндағы  $x$  – мәселедегі барлық координата операторларын білдіреді. Кез келген  $\varphi(x)$  күйі үшін

$$N = \int d^D x \varphi^*(x) \varphi(x);$$

$$\langle \varphi | T | \varphi \rangle = \frac{1}{N} \int d^D x \varphi^*(x) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \varphi(x);$$

$$\langle \varphi | V | \varphi \rangle = \frac{1}{N} \int d^D x \varphi^*(x) V(x) \varphi(x);$$

орынды. Енді координата операторын масштабтау жолымен  $\varphi_k(x) = \varphi(kx)$  алынған  $\varphi_k(x)$  басқа күйді қарастырайық.

Масштабталған орташа мәндер үшін

$$\langle T \rangle_k = k^2 \langle \varphi | T | \varphi \rangle; \quad \langle V \rangle_k = k^{-\nu} \langle \varphi | V | \varphi \rangle.$$

Бұл  $\varphi(kx)$  күйіндегі энергияның орташа мәні үшін

$$E(k) = k^2 \langle \varphi | T | \varphi \rangle + k^{-\nu} \langle \varphi | V | \varphi \rangle$$

болатынын білдіреді. Енді  $\varphi(x)$  -ті стационарлық күйдің ақиқат функциясы деп пайымдайық. Осы күйде  $H$ -тың стационарлық болуына байланысты, соның төңірегіндегі толқындық функциясының кез келген модификациясына қатысты  $\langle H \rangle$ -тың вариациясы нольге ұмтылуы қажет. Дербес жағдайда  $x \rightarrow kx$  үшін де орынды, сондықтан

$$\frac{d}{dk} E(k) \Big|_{k=1} = 0;$$

яғни,

$$2 \langle \varphi | T | \varphi \rangle = \nu \langle \varphi | V | \varphi \rangle. \quad (10.19)$$

Негізгі күйге ортогоналды болатын кеңістіктегі өзгерістерді қарастыра отырып, кез келген стационарлық күйінде теореманың

орындалатынын көреміз.

(10.19) формуласын вириал теоремасы деп атайды. Енді  $\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$  теңдігін падаланып,

$$\langle \varphi | T | \varphi \rangle = \frac{\nu}{\nu + 2} E; \quad \langle \varphi | V | \varphi \rangle = \frac{2}{\nu + 2} E$$

теңдіктерін аламыз. Мысалы, кулондық потенциал үшін  $\nu = -1$ , ал гармоникалық осциллятор үшін  $\nu = 2$ . Потенциалдың біртекті мүшелердің қосындысы болатын жағдайында теореманы келесі теңдеуге жалпылауға болады:

$$2 \langle \varphi | T | \varphi \rangle = \sum_k \nu_k \langle \varphi | V_k | \varphi \rangle.$$

### 10.3 Гелийдің негізгі күйі

Гелийдің негізгі күйі энергиясының есептеулері маңызды тарихи ролін атқарды. Жүйені келесі мағынада интегралдау мүмкін емес: ешқандай әсер-бұрыш тәрізді белгілі канондық айнымалылары жоқ, міне сондықтан Бор-Зоммерфельд кванттауын қолдануға мүмкіндік болмайды. Ұйтқу теориясы қанағаттандыратын нәтиже бермеді [Born (1927)]. Вариациялық бағалаудың табысы кванттық механиканың пайда болуындағы асулы кезеңдерінің бірі болды.

Иондалу потенциалдарының (негізгі күйдегі атом электрондарының бірін босату үшін қажетті энергия) эксперименттік нәтижелері 10.2-кестесінде келтірілген. Ондағы өлшем бірліктері  $\text{см}^{-1}$ , спектроскопиялық мәліметтер жиі осы көріністе беріледі. Түрлендіру коэффициенті

$$E(\text{см}^{-1}) = \frac{1}{hc} E.$$

Дербес жағдайда

$$1 \text{ см}^{-1} = 1.23984244(15) \times 10^{-4} \text{ эВ}$$

$$1Ry = 109737.3156 \text{ см}^{-1}; \quad 1\text{а.б.} = 2Ry = 219474.6313 \text{ см}^{-1}$$

$H^-$	$He$	$Li^+$	$Be^{++}$
$6100 \pm 100$	$198\ 310.82 \pm 0,15$	$610\ 079 \pm 25$	$124\ 125\ 5 \pm 100$

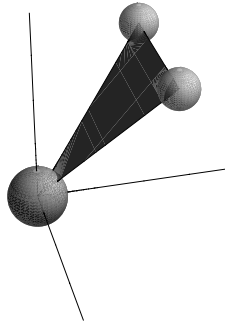
**10.2-кесте.** Гелий және кейбір өзге де иондар үшін иондалу потенциалдары. Мәліметтер  $\text{см}^{-1}$  бірлігінде келтірілген.

Жүйенің гамильтонианы (атомдық бірліктерінде)

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}},$$

мұндағы  $r_1, r_2$  - екі электронның ядродан қашықтығы, ал  $r_{12}$  - олардың салыстырмалы қашықтығы. Осы жүйенің өзіндік күйлері – орбиталдық толқындық функциялары, олар спиндік толқындық функцияларымен байланысқан. Паули принципіне сәйкес орбиталдық толқындық функция симметриялық немесе антисимметриялық болуы тиіс, ол екі электронның толық спиніне (0 немесе 1 мәнін қабылдайды) тәуелді. Біз мұнда симметриялық толқындық функцияларды зерттеумен шектелеміз. Осы дербес жағдайы  $S=0$  күйіне сәйкес келеді және оны *парагелий* деп атайды. Ал  $S=1$  күйіне сәйкес келетін күйі әдетте *ортогелий* деп аталады. Біздің мақсатымызға Шредингер теңдеуінің екі электрондардың алмасуына қатысты симметриялы шешімін іздегенімізге пара-пар:

$$\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1). \quad (10.20)$$



**10.1-сурет.** Үш  $s, t, u$  айнымалыларымен анықталатын инвариантты үшбұрыш

Әрине, негізгі күйдің орбиталдық (демек, толық) бұрыштық моменті ноль болуы орынды да. Өйткені эксперименталдық нәтижелерге сәйкес негізгі күй сәтінемеген болып табылады.

Тәуелсіз айнымалыларды енгізейік (*10.1-суретін қараңыз*):

$$s = r_1 + r_2; \quad t = r_1 - r_2; \quad u = r_{12}$$

және олардың анықталу шектері төмендегідей болады:

$$0 \leq t \leq u \leq s < \infty.$$

Бұларды  $r_i$  айнымалыларының орнына енгіземіз; ендеше түрлендірудің якобианы тең болады:

$$d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 = 2\pi^2 u (s^2 - t^2) ds dt du,$$

біз мұнда бұрыштық айнымалыларды біріктіріп жібердік, себебі сынақ толқын функциясы оларға тәуелді емес. Ал параметрлер облысының анықтауда біз ең алдымен  $t \rightarrow -t$  алмастыруына қатысты функцияның жұп болатындығын ескердік. Осы айнымалыларда қарастырғалы отырған интегралдарымыздың түрлері төмендегідей болады:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ \begin{aligned} & u(s^2 - t^2) \left[ \left( \frac{\partial \psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \psi}{\partial u} \right)^2 \right] + \\ & 2 \frac{\partial \psi}{\partial u} \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \psi}{\partial t} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] - \\ & [4Zsu - s^2 + t^2] \psi^2 \end{aligned} \right\};$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt (s^2 - t^2) \psi^2,$$

мұндағы  $\psi(s, t, u)$  – нақты функция деп пайымдалады.

Вариациялық процедураға ( $\lambda$ ) масштабтың өзгерісі мен  $c_i$  толқындық функция пішінінің өзгерісін сипаттайтын параметрлерді енгізу жолы қарастырылған. Шындыққа жанасатын есептеулерді жүргізу үшін біз түпнұсқалық еңбекке [Hylleraas (1929)] сүйеніп, сынақ функциясының түрін төмендегідей таңдаймыз

$$\psi = \sum_i c_i \tilde{\varphi}_i(\lambda s, \lambda t, \lambda u),$$

мұнда масштабтық параметр

$$\tilde{\varphi}_i = \lambda^6 \varphi_i(\lambda s, \lambda t, \lambda u)$$

түрінде кіреді, ал  $\varphi_i$  функцияларын

$$\begin{aligned} \varphi_{lmn}(s, t, u) &= s^\ell t^{2m} u^n e^{-\frac{s}{2}}, \\ \ell &= 0, 1, \dots, d_s, \quad m = 0, 1, \dots, d_t, \quad n = 0, 1, \dots, d_u. \end{aligned} \quad (10.21)$$

түрінде таңдаймыз. Ал  $t \rightarrow -t$  қатысты симметрия (екі электронның алмасуы) қосымша шарт қояды:  $t$ -ның тек жұп дәрежелері болуы қажет. Біз  $s, t^2, u$  айнымалыларының қасиеттерін сақтап қалу мақсатында табиғи таңдау жасаймыз: барлық тәуелсіз бірмүшелерінде  $N = (d_s + 1)(d_t + 1)(d_u + 1)$  орнатылады. Ал формуладағы пайда болатын  $(\ell, m, n)$  үш индексінің орнына эквивалент болатындай етіп бір  $i$  индексін жазамыз (мұндағы  $i = 1, \dots, N$ ):

$$i = \ell + (d_s + 1) \cdot m + (d_s + 1) \cdot (d_t + 1) \cdot n + 1.$$

Ең қарапайым таңдауы  $N=1$  ( $\ell=m=n=0$ ) 10.2.2-бөлімінде қарастырған элементарлық шешіміне сәйкес келеді:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \lambda^2 \mathcal{M} - \lambda \mathcal{L}, \quad \langle \psi | \psi \rangle = \mathcal{N};$$

мұнда келесі жеңілдететін белгілеуін енгізген болатынбыз:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt &\equiv \int; \\ \mathcal{M} &= \int u(s^2 - t^2) \left[ \left( \frac{\partial \varphi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi}{\partial u} \right)^2 \right] \\ &+ 2 \frac{\partial \varphi}{\partial u} \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \varphi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right]; \\ \mathcal{L} &= \int [4Zsu - s^2 + t^2] \varphi^2; \quad \mathcal{N} = \int u(s^2 - t^2) \varphi^2. \end{aligned}$$

Сынақ функцияларын (10.21) апарып қойғаннан соң,  $\mathcal{M}$ ,  $\mathcal{L}$ ,  $\mathcal{N}$  шамалары  $c_i$ -лерге қатысты квадраттық пішіндеріне келеді:

$$\mathcal{M} = M_{ij} c_i c_j; \quad \mathcal{L} = L_{ij} c_i c_j; \quad \mathcal{N} = N_{ij} c_i c_j,$$

мұнда  $\mathcal{M}$ ,  $\mathcal{L}$ ,  $\mathcal{N}$  матрицалары үшін белгілеулері айдан анық; мысалы:

$$L_{ij} = \int [4Zsu - s^2 + t^2] \frac{1}{2} (\varphi_i \varphi_j + \varphi_j \varphi_i).$$

Енді  $c_i$  және  $\lambda$  параметрлеріне қатысты стационарлық талаптары сәйкесінше

$$\lambda^2 M_{ij} c_j - \lambda L_{ij} c_j = E N_{ij} c_j; \quad E = \frac{\lambda^2 \mathcal{M} - \lambda \mathcal{L}}{\mathcal{M}}; \quad (10.22)$$

$$2\lambda \mathcal{M} - \mathcal{L} = 0; \quad \lambda = \frac{\mathcal{L}}{2\mathcal{M}}, \quad (10.23)$$

өрнектеріне әкеледі. Соңғылары  $M_{ij}$ ,  $N_{ij}$ ,  $L_{ij}$  матрицалық элементтерінің құрама бөліктері. Қажетті интегралдардың түрі төмендегідей болады:

$$A(\alpha, \beta, \gamma) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt s^\alpha t^\beta u^\gamma e^{-s},$$

мұндағы  $\alpha, \beta, \gamma$  -бүтін сандар. Ал интегралдың мәні тіпті қарапайым:

$$A(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{(2 + \alpha + \beta + \gamma)!}{(1 + \beta)(2 + \beta + \gamma)}.$$

Күтілгендей, (10.22) теңдеуіндегі  $E$  өзіндік мәндері мен (10.23) теңдеуіндегі  $\lambda$  мәндері нормалауға тәуелді емес. Назар аударыңыздар:  $E$  шындығында  $\lambda$ -ға тәуелді, ал оның өзі (10.23) теңдігінен  $c_i$ -лар белгілі болғанда ғана бекітіледі. (10.22) және (10.23) жүйесін шешудің ең қарапайым жолы, ол қайта-қайта:

(1)  $\lambda$ -ның бастапқы мәнін таңдау қажет, мысалы 10.2.2-бөліміндегі ұсынылған қарапайым есептеудің мәніне тең етіп қабылдау керек.

(2) (10.22) теңдеуіндегі өзіндік мәндерінің есебін шешу қажет.

(3)  $\lambda$ -ны  $\lambda \rightarrow \lambda + d\lambda$  алмастырып, есептеулерді қайталау қажет. Егер  $\lambda$ -ның жаңа мәнінде  $E$  өзіндік мәні кемитін болса, онда тағы да жаңа  $\lambda$  -ны бекітіп, (1) және (2) процедураларды қайталау қажет; кері жағдайда  $\lambda$  интервалын екі есе қысқартуға  $d\lambda / 2$  тырысу керек: әрбір қадам кезінде нәтиженің жинақтылығын мүмкіндішінше тексерілгені жөн.  $\lambda$  масштабтық параметрін енгізуіміз тек ыңғайлылық үшін жасалған болатын: мақсатымыз  $\phi_i$  функцияларының салыстырмалы аздаған санымен жинақтылықты алу.

### Нәтиже

Жете сандық түрдегі бағалануы осы тараудың соңында берілген есептердің бірінде ұсынылады.<sup>2</sup>

Энергия (атомдық бірліктерде) және  $J$  иондалу потенциалдары үшін ( $\text{см}^{-1}$  бірліктерінде) нәтижелер келесі кестеде берілген (бірінші бағана). Есептеулер  $N = 120$  болатын функциялардың базасын пайдаланып жүргізілген.

	вариациялық	$\delta$ -масса	$\delta$ -поляр.	Біздің нәтиже	
$E$	-2.90372413	0.000 21 8	0.000 021 8	-2.903 304 41	а.б. (10.24)
$J$	198 344.520 8	- 27.180 546 24	-4.78 846 35	198 312. 555 4	$\text{см}^{-1}$

Гелий үшін эксперименталдық мәлімет:

$$J_{MA} = 198\,310.67 [1] \text{ см}^{-1}. \tag{10.25}$$

Вариациялық әдіспен есептелген нәтижелер экспериментпен жақсы үйлесім табады, бірақ керемет деп айтуға келмейді.

Дербес жағдайда, вариациялаудың нәтижесі энергияның жоғарғы шегін, ал иондалу потенциалының төменгі шегін беруі тиіс. Ал біздің есептеулеріміздің нәтижесі тура қарама-қарсы. Алайда осы кезеңдегі

<sup>2</sup> Бағдарлама максималды оңтайландырылудан әлі алыс және  $N = 150$  кейін орнықсыз болады; бұл тек вариациялық әдістің мүмкіншілігін көрсету мақсатында келтірілген.

теория мен эксперименттің айырмашылығының реті  $\Delta J / J \sim 10^{-4}$ , осындай дәлдікте біз ескермеген өзге түзетулердің мағынасы да басқаша болады. Олардың ішіндегі ең маңыздысы – кинематикалық негізі: ол ядроның массасы шекті болуымен байланысқан.

### Ядроның массасы шекті болуымен байланысты түзетулер

Ядроны шексіз ауыр деп қабылдап, нәтижесінде гелийдің негізгі күйі үшін жуықталған мәні табылған болатын: кулондық потенциалдың орталығы координаталар басында бекітіледі. Ядроның массасы шекті болуымен байланысты түзетулерді қалайша ескеру қажеттігіне қысқаша тоқталайық. Атом массасының орталығында

$$\mathbf{P}_N + \sum_{i=1}^Z \mathbf{p}_i = 0 ,$$

кинетикалық мүшені төмендегідей жаза аламыз:

$$\frac{1}{2M} \left( \sum_{i=1}^Z \mathbf{p}_e \right)^2 + \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^Z \mathbf{p}_i^2 = \frac{1}{2\mu} \sum_{i=1}^Z \mathbf{p}_i^2 + \frac{1}{M} \sum_{i<j} p_i p_j ,$$

мұндағы  $M$  және  $m$  – сәйкесінше ядроның және электронның массалары, оған қоса

$$\mu = \frac{mM}{m + M}$$

келтірілген масса.

Екі электрондар жүйесі үшін, демек, эффективті гамильтонианның түрі төмендегідей болады:

$$H = \frac{1}{2\mu} (\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) + V + \frac{1}{M} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 . \quad (10.26)$$

Орталық күштің бекітілуі жағдайынынан айырмашылығы болып екі түзетуі табылады, олар:

- электронның массасы келтірілген массамен алмастырылды. Алдындағы есептеулер атомдық бірліктерінде жүргізілген болатын, онда масса атомдық бірліктің анықтамасына еніп кетті: 1 а.б.  $\propto m$ . Сондықтан осы түзетудің түрін ескеру үшін алдыңғы нәтижені  $\propto / m$  -ге көбейтсек болғаны. Өрине, гелийдің иондалу энергиясын есептегенде, келтірілеген массаны қолдану қажет. Қысқасын айтқанда, түзетудің мұндай түрін жалпыландыруға болады:

$$\Delta_1 E_0 = \left( \frac{\mu}{m} - 1 \right) E_0, \quad \Delta_1 J = \left( \frac{\mu}{m} - 1 \right) J.$$

Назар аударыңыздар: түзетудің беталысы иондалу потенциалының төмендеуіне әкеледі, бұл – дұрыс бағыт.

- Түзетудің екінші түрі (10.26) теңдеуіндегі соңғы мүшемен байланысты. Оны поляризация массасы деп атайды. Бұл кішігірім түзету, оны ұйтқу теориясын қолданып есептеп табуға болады. Оның үлесі

$$\Delta_2 E_0 = \frac{m}{M} \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \left\langle \psi \left| \frac{1}{m} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \right| \psi \right\rangle \equiv \frac{m}{M} \frac{1}{\mathcal{N}} \mathcal{K}. \quad (10.27)$$

Егер толқындық функцияның түрі  $f(r_1)f(r_2)$  көбейтіндісінен құралатын болса, онда поляризациялану массасы үлесін қоспайды, себебі матрицалық элемент (мысалы жұптылықтың) көбейткіштерден құралатын болады, ал оның әрбір мүшесі нольге тең болып қалады. (10.27) теңдеуін бөлшектеп интегралдаған соң, табамыз:

$$\Delta_2 E_0 = \frac{m}{M} \frac{1}{\mathcal{N}} \int (\nabla_1 \psi) \cdot (\nabla_2 \psi) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

мұндағы  $\mathcal{N}$  – алдындағы анықталған квадраттық түрі. Оның жаңа түрін  $s, t, u$  айнымалылары арқылы өрнектеуге де болады, нәтижесінде

$$K(\varphi) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ \begin{aligned} & (s^2 + t^2 - 2u^2) \left[ \left( \frac{\partial \varphi}{\partial s} \right)^2 - \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 \right] u - (s^2 - t^2) u \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 \\ & - 2 \frac{\partial \varphi}{\partial u} \left[ \frac{\partial \varphi}{\partial s} s(u^2 - t^2) + \frac{\partial \varphi}{\partial t} t(s^2 - u^2) \right] \end{aligned} \right\}.$$

Сәйкес келетін  $K_{ij}$  матрицалық элементтері тараудың соңындағы есептерде келтірілген. Соңғы екінші және үшінші түзетулері (10.24) кестесінде ескерілген:

$$\Delta_1 J = -27.18 \text{ см}^{-1}, \quad \Delta_2 J = -4.78 \text{ см}^{-1}.$$

Алдыңғы нәтижеде толықтырылған осы түзетулердің нәтижесін жазайық:

$$J_{\text{біздің}} = J + \Delta_1 J + \Delta_2 J = 198\,312,55 \text{ см}^{-1}, \quad J_{\text{эксп}} = 198\,310,67 \text{ см}^{-1}$$

және экспериментпен жақсы үйлесімде болатынын атап өтейік. Ендібір

мағынада тағы да кішігірім қайшылық бар деп айтуға да болады, оның реті  $\Delta J / J \sim 10^{-6}$  болғандықтан, тым жақсы деп қабылдаймыз. Шындығында, осыған дейін сутегі атомының нәзік құрылымына аналогиялы релятивистік түзетулерді ескерген емеспіз. *Априори*, энергияға түзетудің ретін  $(Z\alpha)^2 \sim 10^{-4}$  деп пайымдауға болады, ал біздің нәтижеміздің дәлдігі түзетудің  $10^{-5}$  жетті.

Демек, негізгі күй үшін нәзік құрылымының түзетуі дәл компенсацияланатын болғаны,<sup>3</sup> оның дәлдігі күтілген нәтижеден асып түсті. Оның негізгі эффектісі болып лэмбтік ығысу болып табылады. Үрдісті есептеу күрделі болғанымен, осы екеуінің үлесі иондалу потенциалын  $-1,90 \text{ см}^{-1}$  шамасына одан әрі ығыстырады.

Осы түзетулерді ескере отырып, біз төмендегідей жазуымызға болады:

$$J_{\text{теор}} = J + \Delta_1 J + \Delta_2 J + \Delta_{\text{релят}} = 198\,310.65 \text{ см}^{-1}; \quad J_{\text{эксп}} = 198\,310.67;$$

ал үйлесімін тамаша деп атауға келеді.

Осы процедураларды басқа элементтер үшін қайталауға мүмкіндік бар. Назар аударыңыздар: дәлдікті арттырудың салдарынан  $H^-$  байланысқан ионы үшін қажетті нәтижені ала аламыз.

$Be^{++}$  үшін нәтижелер келесі кестеде келтірілген:

	$H^-$	$He$	$Li^+$	$Be^{++}$
$J_{\text{эксп}}$	$6100 \pm 100$	$198310.669 \pm 0.001$	$610079 \pm 1$	$124124.2 \pm 5$
$J$	6082.99	198310.65	610076.03	1241247.06
$\delta J_{\text{рел}}$	-0.31	-1.90	8.86	75.00

### Қосымшаларға нұсқаулық

Осы тарауды бірнеше қосымшаларды талдаумен аяқтайық. Кейбір сандық әдістердің: дифференциалдық теңдеулер мен Гаустың интегралдық тәсілдерінің шешімдері үшін спектрлік және псевдоспектрлік әдістерінің қысқаша сипаттамасы келтірілген. Осы әдістер полиномдардың (Лагерраның, Эрмиттің, Чебышевтің, Фурьенің) бірнеше түрлерінің көмегімен құрылған базисте Шредингер теңдеуінің шешімі үшін сандық құралдарын әзірлеуге қолданылады. Әдістің мықтылығы мен

3 Релятивистік түзетулердің есептелуі осы тараудың соңындағы жаттығуларда келтірілген.

оралымдылығының мысалы ретінде NB - 10.10 нәтижелеріне сілтеме жасаймыз, онда ангармоникалық осциллятордың өзіндік мәндерінің 50 –ші (немесе одан да жоғары) дәлдігіндегі есептеулері көрсетілген.

Гелий атомы үшін вариациялық есептердің жеті мысалы келтірілген, олар бірнеше есептеу әдістерімен жүргізілген: Хиллераастың классикалық және Пекеристің (салыстырмалы) жаңа әдістері. Соңғы жағдай үшін энергияның деңгейлерін эксперименталық нәтижелермен салыстырғанда  $10^7$  дәрежесіне дейінгі дәлдікпен есептеулерін көрсеттік.

Осы мысалдардың қысқа нұсқаулығын Guide\_to\_NB.pdf файлынан табасыздар.

### Есептер

- (10.1) Сутегі атомның толқындық функциясына вариациялық әдісті қолданып, гелийдің негізгі күйінің энергиясын есептеп табыңыздар. Қатені бағалау үшін Темпл әдісін қолданыңыздар.
- (10.2) Ангармоникалық осциллятордың вариациялық әдісінде қолданылған масштабтық параметрді айнымалы жиілікпен түсіндіріп көрелік. Сынақтық вариантында қолданылған таңдауымыз Бор-Зоммерфельдтің кванттау шарты болып табылатынын көрсетіңіздер.
- (10.3) Шредингер теңдеуіндегі координаталарды айқын түрде түрлендіруі жолымен гелий атомының гамильтонианына түзетулерді есептеңіздер.
- (10.4) Гелий атомында Хиллераас координаттарының алмастыруын жүргізейік.
- $$s = r_1 + r_2; \quad t = r_1 - r_2; \quad u = r_{12}; \quad 0 \leq t \leq u \leq s \leq \infty.$$

Осы координаталарда бұрылыстарға қатысты инвариантты күйлер үшін Шредингер теңдеуін жазыңыздар.

- (10.5) Хиллераас айнымалыларында сфералық симметриялы күйі үшін гамильтонианың орташа энергиясын жазыңыздар. Вариациялық әдістің нәтижесінде Шредингер теңдеуін табыңыздар және алдындағы есептің нәтижесімен салыстырыңыздар.
- (10.6) Гелийдің  $S$ -күйлеріне релятивистік түзетулері үшін эффективтік гамильтонианын жазыңыздар. Ең қарапайым вариациялық толқындық функцияларын қолданыңыздар, негізгі күйіне өсерін есептеңіздер (жалпы атомдық гамильтониан үшін *14-тарауға қосымшасын қараңыздар*).
- (10.7) Жалпы  $[a,b]$  кесіндісін қарастырайық және осы кесіндіде  $\mu[x] dx$  -ты есептеп табайық. Алдымен барлық моменттері бар, яғни

$x^n$  интегралданады деп есептелік. Онда  $\mathbb{L}^2[\mu; a, b]$  гильберттік кеңістігінде полиномдардың толық базасын анықтауға болады (Вейерштрасс теоремасы).

- (а) Базисті ортогоналдық етіп жасауға, оған қоса  $n$ -ші дәрежелі полиномға (көпмүшеге)  $x$ -ті көбейту арқылы  $n+1$ ,  $n$ ,  $n-1$  дәрежелі полиномдарының сызықтық комбинациясы арқылы өрнектеуге болатынын көрсетіңіздер.
- (ә) Осы қатынасты гильберттік кеңістіктегі  $x$  операторының жүзеге асырылуы (матрицалық жүзеге асырырылуы) ретінде түсіндіруге болады. Шекті бірөлшемді кеңістікте осы көріністі Гаусстың қосындылау формуласымен, яғни интегралдарды абсциссалар және полиномдар класының салыстырмалы үлесі арқылы дәлелдеуге болатынын көрсетіңіздер.

### Сандық талдау

- (10.1) Гармоникалық осциллятор, ангармоникалық осциллятор, сутегі атомы және гелий атомы тәрізді жүйелерді вариациялық әдіспен зерделеу үшін Mathematica бағдарламасындағы NVariationalBound функциясын қолданыңыздар.
- (10.2) Mathematica бағдарламасындағы NVariationalBound функциясын қолданып, He және Li атомдарының S- күйлерін бағалаңыздар.
- (10.3) Mathematica бағдарламасын қолданып Гаустың интегралдау формуласын зерделеңіздер.
- (10.4) Сандық талдау жөніндегі оқулықтары мен Mathematica Help бағдарламасының көмегімен дифференциалдық теңдеулер шешудің псевдоспектрлік әдісін зерттеңіздер.
- (10.5) Дискреттеу әдісі мен вариациялық принцип арасындағы байланысты зерттеңіздер.
- (10.6) Вариациялық әдісімен радиалдық есептерді шешу үшін Лагерра полиномдарын базис ретінде қолданыңыздар.
- (10.7) Лагерра полиномдарын базис ретінде пайдаланып, вариациялық әдістердің орнықтылығы мен дәлдігін зерттеңіздер. Дербес жағдайда,  $-V_0 / \text{ch}(\alpha r)^2$  радиалдық потенциалының негізгі күйін 20-дәрежелі дәлдікпен есептеңіздер.
- (10.8) Лагерра полиномдары мен псевдоспектрлік әдісті қолданып, зерттеулер жүргізіңіздер.
- (10.9) Эрмит полиномдарын қолданып, вариациялық әдісті зерттеңіздер.
- (10.10) Эрмит полиномдарының көмегімен ангармоникалық осциллятордың есебін сандық түрде есептеңіздер. Қос

потенциал жағдайын зерттеңіздер. Өзіндің мәндерін 50-дәрежелік дәлдікпен есептеп көріңіздер.

(10.11) Сыртқы сызықтық потенциалының (электр өрісінің ) қос потенциалға әсерін зерттеңіздер. Фейнман-Гелл-Манн теоремасын тексеріңіздер.

(10.12) Вариациялық есептері үшін Фурье базисін пайдаланыңыздар.

(10.13) Вариациялық есептеулер үшін Чебышев полиномдарын пайдаланыңыздар. Осы базисте псевдоспектрлік әдісін зерттеңіздер.

(10.14) Екіөлшемдік кеңістікте вариациялық процедураларын қолданып

$$V(x, y) = \frac{1}{2} x^2 + \frac{1}{2} y^2 + x^2 y^2$$

потенциалы үшін зерттеңіздер. Осы әдісті Непон потенциалын нормалауын (регуляризациялауын) зерттеу үшін қолданыңыздар:

$$V[x, y] = \alpha(x^2 + y^2)^2 + \beta(x^2 + y^2) + \gamma(x^3 - 3xy^2).$$

(10.15) Гелийді зерттеу үшін Хиллераас және Пекерис координаталар жүйесін пайдаланыңыздар.

(10.16) Төменгі өлшемді базистеріндегі гелийдің s- күйлері үшін вариациялық есебін аналитикалық түрінде зерттеңіздер. Хиллераас және Пекерис координаталарының жүйелерін қолданыңыздар.

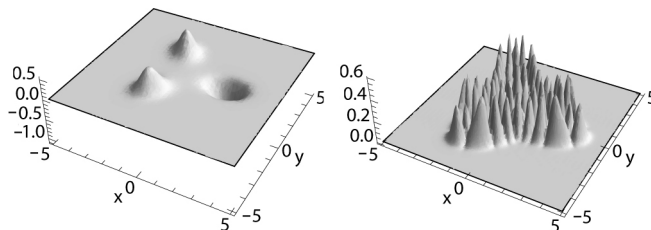
(10.17) Хиллераас координаталарының көмегімен гелийдің негізгі күйін сандық түрде есептеңіздер.

(10.18) Гелийдің қозған күйлерін вариациялық есептеулерін жалғастырыңыздар.

(10.19) Гелий атомының S-күйлері үшін релятивистік түзетулерін есептеңіздер.

(10.20) Гелий атомының S-күйлерін үшбұрыштық (Пекерис) айнымалаларын қолданып есептеңіздер.

(10.21) Гелий атомына релятивистік түзетулерді үшбұрыштық (Пекерис) айнымалаларын қолданып есептеңіздер.



**10.2-сурет.** Непон потенциалындағы төмен және жоғары қозған деңгейлерінің тоқындық функциясы мен тығыздығы, NB-10.14.

# Жартылай классикалық жуықтау

11

11.1 ВКБ жуықтауы

11.2 Бор-Зоммерфельдтің кванттау ережелері

11.3 Туннельдік эффект

11.4 Фазалық ығысу

Тереңірек оқу үшін

Қосымшаларға нұсқау

Есептер

Сандық талдау

Осы тарауда кванттық механиканың  $\hbar \rightarrow 0$  шегін зерделейміз. Кванттық механикадан классикалыққа өтуі осы шектің көмегімен жүргізіледі. Сондықтан кіші  $\hbar$  үшін өзірленген жуықтаулардың схемалары *жартылай классикалық жуықтаулар* ретінде таныс. Жартылай классикалық жуықтаудың ізашары бар, ол – ескі кванттық теориясы. Кванттық және классикалық механикаларына қатысты сұрақтардың көбі кванттық механиканың қалыптасуы 1900-1927 жылдары көтерілген болатын. Алайда қанағаттандыратын жауаптарды әрқашан ала бермейтін.

Өткен ғасырдың екінші жартысына дейін жартылай классикалық әдістер Шредингер теңдеуінің жуықталған түсіндірмесі ретінде өрледі, алайда принциптер тұрғысынан ол қадамдар мардымсыз болды. Дамудың ілгерілеуін арттырған фактілер көпшілік. Бір жағынан кейбір ескі нәтижелерді Эйнштейннің қайта қарауы арқасында классикалық интегралданатын жүйелерді әлдеқайда терең түсінуге мүмкіндік берді. Екінші жағынан, КАМ (Колмогоров, Арнольд, Мозер) теоремасының тұжырымдамасы жаңа, классикалық интегралданбайтын құбылыстарды түсінуге жол ашты. Осы зерттеулердің нәтижесінде, жалпы асимптотикалық жіктеулерді одан әрі зерделеу және вариациялық есептеулердің кейбір жаңа нәтижелерімен бірге классикалық интегралданбайтын жүйелердің жартылай классикалық квантталуын зерттеу мүмкіндігі пайда болды. Оған тіпті хаустық жүйелердің де қосылу мүмкіндігін ескерейік.

Осы тарауда есептің тек бастапқы аспектілері талқыланатын болады. Олар тереңірек осы тараудың Қосымшасында берілген.

## 11.1 ВКБ жуықтауы

Вентцель, Крамерс және Бриллюэн (ВКБ) есімді ғалымдар бір мезгілде бірнеше өзге авторлармен бірігіп,  $\hbar \rightarrow 0$  шегін зерделеуді ұсынған. Осы жуықтау Максвелл теңдеулерінің геометриялық оптикадағы жуықтауына аналогиялы: жарықтың толқын ұзындығының өзгерісі оның жүріп өткен жолының қашықтығынан әлдеқайда кіші болады. Сәуле мен толқындық фронт тұрғысынан электромагниттік толқындардың таралуын сипаттаудың мағынасы болады, ал оның эволюциясы (эйконал теңдеуі) геометриялық оптиканың негізінде құралады.

Енді  $V(x)$  потенциалында қозғалатын бөлшек үшін бірөлшемді Шредингер теңдеуін қарастырайық:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi. \quad (11.1)$$

$\hbar \rightarrow 0$  шегінің сингулярлық болатыны анық: осы шектік жағдайда дифференциалдық теңдеудің реті де өзгереді, сондықтан оны (дифференциалдық теңдеулерді) қанағаттандыратын функциялардың да кластары да өзгереді. Шындығында осы жағдайда дифференциалдық теңдеулердің алгебралыққа өтуі жүргізіледі.

Үдерістің дұрыс құрылуының орындылығына көз жеткізудің қарапайым жолы – еркін бөлшектер. Осы жағдай үшін Шредингер теңдеуінің өзіндік функциялары болып импульстің өзіндік функциялары табылады, ал түрі жазық толқын болады:

$$\psi(x) = e^{ipx\hbar}.$$

$p$ -ның бекітілген мәнінде  $\hbar \rightarrow 0$  үшін функция жылдамырақ тербеледі, ал  $\lambda = h/p$  толқын ұзындығы 0-ге ұмтылады. Әрбір туынды алған сайын әрдайым  $\hbar^{-1}$  коэффициенті пайда болады, ал жылдам тербелістер үшін кинетикалық мүшесінің алдындағы  $\hbar^2$  көбейткіші оны нөлге ұмтылдырады. Біз (11.1) Шредингер теңдеуінің құрылымы міндеттейтін тәртібіне түзетулерді қарастыру арқылы ғана жалпы толқындық функциясының  $\hbar \rightarrow 0$  жуықтауы жөнінде әңгіме қозғауымызға болады.

Сондықтан,

$$\psi(x) = \exp\left(i\frac{\sigma}{\hbar}\right) \quad (11.2)$$

етіп орнатып, одан соң жуықтауды іздеген жөн. Оған қоса  $\psi$ -дің өзін емес,  $\sigma$  шамасын  $\hbar$ -тың қатарына жіктейміз:

$$\sigma(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^k \sigma_k = \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \sigma_2 + \dots \quad (11.3)$$

(11.3) теңдеуіндегі  $1/i$  көбейткіші өрнекті біршама жеңілдету үшін енгізілген. Енді (11.2) теңдігін (11.1) теңдеуіне апарып қойып,

$$(\sigma')^2 - i\hbar\sigma'' = p^2(x) \quad (11.4)$$

болатынын табамыз, мұнда біз «классикалық импульсті» төмендегідей анықтадық:

$$p^2(x) = 2m(E - V(x)).$$

Расында бұл теңдік  $E > V(x)$  болғанда бөлшектің классикалық импульсін береді. Ал (11.3) теңдеуі бастапқы (11.1) теңдеуіне эквивалентті: ол бірінші ретті<sup>1</sup> теңдеу, бірақ  $y = \sigma'$  үшін сызықты емес. (11.1) теңдеуіндегі екі интегралдау тұрақтыларының бірі  $y$ -ті  $\sigma$ -мен алмастырғаннан соң ғана интегралдау тұрақтысы болады. Енді (11.3) жіктеуін (11.4) теңдеуіне қойып, нөлінші ретті жуықтауы үшін табамыз:

$$(\sigma'_0)^2 = p^2; \quad \sigma_0 = \pm \int p(x) dx; \quad p(x) = +\sqrt{2m(E - V(x))}.$$

Соңғы теңдеуді Риккати теңдеуі деп атайды.

Квадраттық түбірдің екі мүмкін болатын таңбаларына екі сызықтық тәуелсіз шешімдері сәйкес келеді. Ал қалған  $\hbar^n$  мүшелері үшін

$$\sum_{k=0}^n \sigma'_k \sigma'_{n-k} + \sigma''_{n-1} = 0 \quad (11.5)$$

болатынын көреміз, мұнда  $\hbar$  -тың әртүрлі дәрежелеріндегі коэффициенттерін нөлге теңестірдік. (11.5) теңдігі  $\sigma_n$  үшін рекурсивті өрнегін береді; шындығында  $\sigma'_n$  тек  $\sigma'_0$ -қа көбейтілетін екі мүшесінде пайда болады:

$$\sigma'_1 = -\frac{1}{2\sigma'_0} \sigma''_0 \Rightarrow \sigma_1 = -\frac{1}{2} \log(p); \quad (11.6a)$$

$$\sigma'_n = -\frac{1}{2\sigma'_0} \left( \sum_{k=1}^{n-1} \sigma'_k \sigma'_{n-k} + \sigma''_{n-1} \right); \quad n \geq 2. \quad (11.6\text{ә})$$

<sup>1</sup>  $\psi$  функциясын белгісіз  $y$  функциясымен алмастырылуы алдындағы стандарттық қатынасымен байланысты:

$$\psi = \exp\left(\int^x y(\xi) d\xi\right)$$

Соңғы теңдеуді Риккати теңдеуі деп атайды.

Мысалы, шешімін  $\sigma'_0 = +p(x)$  етіп таңдасақ, онда

$$\sigma'_2 = -\frac{1}{2p} [\sigma_1'^2 + \sigma_1'] = \frac{1}{4} \frac{p''}{p^2} - \frac{3}{8} \frac{p'^2}{p^3} = -\frac{1}{2p^{1/2}} \frac{d^2}{dx^2} p^{-1/2};$$

$$\sigma'_3 = -\frac{1}{2p} (2\sigma_1'\sigma_2' + \sigma_2'') = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{\sigma_2'}{p}$$

айқын түрлерін табамыз. Ал  $\hbar$  және  $\hbar^2$  реттері үшін

$$e^{\frac{i\sigma}{\hbar}} \approx \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(i \int_{x_0}^x \left[\frac{1}{\hbar} p(x)\right] dx\right);$$

$$e^{\frac{i\sigma}{\hbar}} \approx \frac{1}{\sqrt{p(x) e^{-\frac{\hbar^2 \sigma_2'}{p}}}} \exp\left(i \int_{x_0}^x \left[\frac{1}{\hbar} p(x) + \hbar \frac{1}{2p^{1/2}} \frac{d^2}{dx^2} p^{-1/2}\right] dx\right)$$

теңдіктері сәйкес келеді.

(11.6 ө) теңдеуінің келесі салдарларын аламыз:

- 1)  $n$  тақ болғанда  $\sigma_n$  өрнектері  $p$  үшін жұп болады және (11.3) теңдеуінен  $p(x)$  нақты үшін толқындық функцияның фазасына олардың үлесін қосатынын көреміз.
- 2)  $\sigma_n$  тақ мүшелері  $p$  үшін жұп болады және  $\psi$  -дің амплитудасына үлес қосады.

ВКБ-жуықтауында

$$\psi(x) = b_1 \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx} + b_2 \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x) dx} \quad (11.7)$$

өрнегінің негізгі мүшелері сақталады, мұндағы  $x_0$  – кез келген санақ нүктесі, ал  $b_1$  және  $b_2$  коэффициенттері  $x_0$ -ге сәйкес өзгереді. Егер жуықтауымыз ( $x$  бойынша) бірқалыпты әсер етсе, онда осы есептің жуықталған шешімін табар едік.

Формула орындалуының шартына көз жеткізу үшін оны келесі түрінде қайта жазайық:

$$\exp\left(i \int_{x_0}^x \sigma' dx\right) = \exp\left(i \int_{x_0}^x (\sigma'_0 - i\hbar \sigma'_1 - \hbar^2 \sigma'_2 + \dots) dx\right).$$

Егер келесі теңсіздіктер

$$\hbar^2 \frac{|\sigma'_2|}{|\sigma'_0|} \ll \hbar^2 \frac{|\sigma'_1|}{|\sigma'_0|} \ll 1$$

орындалатын болса, онда жуықтауымыз дұрыс. Екінші теңсіздікті

(11.6) теңдеуінің көмегімен қайта жазуға болады ( $p$ -ны нақты деп қабылдайық)

$$\frac{1}{2} \hbar \frac{p'}{p^2} \ll 1 \Rightarrow \frac{1}{4\pi} \frac{d\lambda}{dx} \ll 1; \quad \lambda = \frac{h}{p}, \quad (11.8)$$

мұндағы  $\lambda$  – де Бройльдің толқын ұзындығы. Ал (11.8) теңсіздігінен жуықтаудың тек толқын ұзындығының өзгерісі өзінен әлдеқайда кіші болғанда ғана орындалатынын көреміз (яғни көптеген тербелістер үшін толқын ұзындығы айқын өрнектеріне ие болады). Бөлшектердің тұрғысынан күйлерді түсіндіру үшін төмендегідей жазайық:

$$p' = \frac{d}{dx} \sqrt{2m(E - V(x))} = \frac{1}{2} 2m \frac{V'}{p} = -m \frac{F}{p},$$

мұндағы  $F$  – классикалық күш. Ал (11.8) теңсіздіктері келесі шартты орнатады

$$m\hbar \frac{F}{p^3} \ll 1.$$

Осы теңсіздіктің кейбір нүктелерде: не  $F$ -тің тым үлкен, не  $p$ -ның кіші мәндерінде, дербес жағдай  $p=0$ , яғни классикалық бұрылыс нүктесінде бұзылатынын анық көреміз.

Аналогиялық түйінді (11.8) теңсіздіктерінің біріншісі үшін де жасауға болады. Назар аударыңыздар: (11.8) теңсіздіктері локальдық шектеулер орнатады, алайда  $\sigma_2$  үшін ол шарттар жеткіліксіз болуы мүмкін. Классикалық рұқсат етілген облыста (мұнда  $p$  – нақты)  $\sigma_0$  және  $\sigma_2$  екеуі  $\psi$  функциясының фазасын құрайды, ал фазаның модулі  $2\pi$  болады. Сондықтан, егер тіпті  $\sigma_2' \ll \sigma_0'$  болса да,  $\sigma_2'$  -мен байланысқан эффектілер  $\sigma_0'$  -мен салыстырғанда маңыздырақ болуы мүмкін.

Сондықтан ВКБ жуықтауының орындалуы үшін

$$\int_{x_0}^x \hbar^3 \sigma_2' dx \ll 1$$

талабы жүзеге асырылуы тиіс және ол классикалық бұрылыс нүктелеріне немесе потенциалдың ерекшеліктеріне мүлдем тәуелсіз.

ВКБ жуықтауы бұзылатын классикалық бұрылыс нүктелері болса, онда координаталарды (11.3) теңдігі тәрізді жуықтау формулалары орындалатындай етіп облыстарға бөлуді қажет етеді. Міне тура сондықтан, осы формулаларды үзіліс нүктелерінің төңірегіне дейін экстраполяциялауға келмейді, (11.7) өрнегі орындалатын көрші облыстардың арасын дұрыс *байланыстыратын формулаларын* орнату есебі тривиалды емес.

### 11.1.1 Байланыстыратын формулалар

Алдымен бұрылыс нүктесі біреу болатын жағдайды қарастырайық. Ол үшін  $E - V(x) = 0$  теңдеуінің түбірі  $x = a$  болсын, ал идеяны бекіту мақсатында  $x > a$  үшін  $V(x) > E$  орындалсын деп пайымдайық. Осы жағдай схемалық түрде 11.1-суретінде көрсетілген.  $x < a$  облысын классикалық рұқсат етілген, ал  $x > a$  облысын классикалық рұқсат етілмеген облысы деп атайық.  $x < a$  облысы үшін екі сызықтық тәуелсіз шешімдері

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w|); \quad \frac{1}{\sqrt{p}} \sin(|w|) \tag{11.9}$$

түрінде беріледі, оған қоса

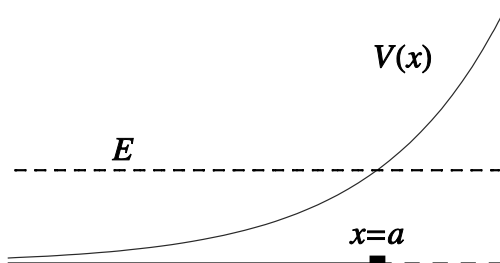
$$w(a, x) = \frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx, \quad p(x) = \sqrt{2m(E - V)}.$$

Ал  $x > a$  облысы үшін

$$\frac{1}{\sqrt{|\tilde{p}|}} e^{-\tilde{w}}; \quad \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{\tilde{w}}, \tag{11.10}$$

мұндағы

$$\tilde{w}(a, x) = \frac{1}{\hbar} \int_a^x \tilde{p}(x) dx, \quad \tilde{p}(x) = \sqrt{2m(V - E)}.$$



**11.1-сурет.** Классикалық бұрылыс нүктесі.  $x < a$  классикалық рұқсат етілген облыс, ал  $x > a$  облысына бөлшек классикалық түрде өте алмайды

Байланыс формулаларын табуының мүмкін әдісі болып  $x = a$  нүктесінің төңірегіндегі сызықтандырылған потенциалы есебінің шешімі табылады. Оған қоса  $a$ -ның екі жағынан да бұрылыс нүктесінен алыс қашықта  $|x - a| \gg 0$  орындалатын жартылай классикалық функциялардың осындай шешімінің асимптотикалық түрін салыстыру керек. Ал  $a$ -ның төңірегінде біз жуықтап  $2m\hbar^{-2}(E - V(x)) \approx \beta^2(a - x)$  түрінде қайта жаза аламыз, онда (11.1)

теңдеуі төмендегідей өзгереді:

$$\psi'' + \beta^2(a-x)\psi = 0.$$

Одан әрі  $(x-a) = \beta^{-2/3}z$  деп қабылдайтын болсақ, онда біздің теңдеуіміздің түрі келесідей болатынын көреміз:

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi - z\psi = 0. \quad (11.11)$$

Осы теңдеудің шешімдері болып Эйри функциялары табылады:  $Ai(z), Bi(z)$ . Оқырман Эйри функцияларының қасиеттері жөнінде 24.1.3-қосымшасында қысқаша ақпаратты таба алады. Ал  $z$ -тің үлкен шамаларында олардың тәртібі

$$\frac{|z|^{1/4}}{\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \xleftarrow{z \rightarrow -\infty} Ai(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2} z^{-1/4} e^{-\frac{2}{3}|z|^{3/2}}; \quad (11.12a)$$

$$-\frac{|z|^{1/4}}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{2}{3}|z|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right) \xleftarrow{z \rightarrow -\infty} Bi(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\pi}} z^{-1/4} e^{+\frac{2}{3}|z|^{3/2}} \quad (11.12ә)$$

болады. Енді импульс пен  $w$  фазаны  $z$  айнымалысы арқылы қайта жазайық:

$$p = \hbar\beta(a-x)^{1/2} = \hbar\beta^{1/3}\sqrt{-z}; \quad w(a,x) = -\frac{2}{3}\beta(a-x)^{3/2} = -\frac{2}{3}|z|^{3/2};$$

$$\tilde{p} = \hbar\beta(a-x)^{1/2} = \hbar\beta^{1/3}\sqrt{z}; \quad \tilde{w}(a,x) = \frac{2}{3}\beta(x-a)^{3/2} = \frac{2}{3}|z|^{3/2}.$$

(11.12) теңдеулерінен екі тәуелсіз шешімдерінің болатынын аламыз:

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(|w(a,x)| - \frac{\pi}{4}\right) \xleftarrow{x \rightarrow -\infty} \psi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{-|\tilde{w}|}; \quad (11.13a)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{p}} \sin\left(|w(a,x)| - \frac{\pi}{4}\right) \xleftarrow{x \rightarrow -\infty} \psi \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{+|\tilde{w}|}. \quad (11.13ә)$$

Осы себепті шешімдерінің жалпы сызықтық комбинацияларын, одан әрі келесі түрде жазылады

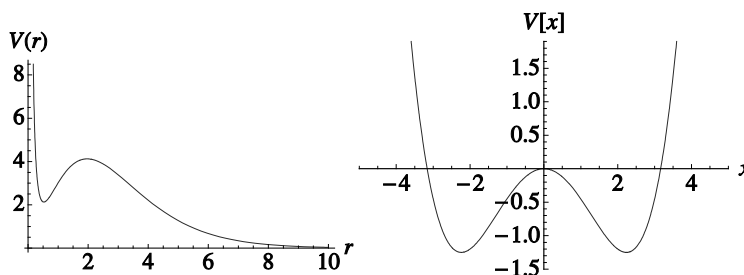
$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w(a,x)| - \frac{\pi}{4} + a) \leftarrow \psi(x) \rightarrow \frac{\sin a}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{|\tilde{w}|} + \frac{1}{2} \frac{\cos a}{\sqrt{\tilde{p}}} e^{-|\tilde{w}|}}. \quad (11.14)$$

Жоғарыдағы формулалар классикалық рұқсат етілген облысында да  $x > a$  орынды. Енді (11.13), (11.14) теңдіктерін осы тарауда

талқылайтын барлық жағдайларды қамту үшін жеткілікті. Осы және келесі формулаларды бір шымшым тұз ретінде қолдануға болатыны айқын: классикалық рұқсат етілген облысындағы  $a$  фазасының кішігірім өзгерісі рұқсат етілмеген облыстағы экспоненциалдық үлкен өзгерістерді тудырады; және керісінше, рұқсат етілмеген облыстағы  $\psi$  -ді экспоненциалдық дәлдікпен білетін болсақ, онда дұрыс  $a$  фазасын аламыз. Расында, (11.14) теңдеуіндегі дәл асимптотикалық өрнекті көрсетілген себептерге байланысты сақтылықпен қолдануымыз қажет. Көп жағдайларда есепті нақтылы шекаралық шарттармен шығару қызықшылық туғызады: ол бізге (11.13) теңдеулерін бірмәнді қолдануымызға мүмкіндік береді. Мысалы, егер барлық  $\infty > x > a$  облысы классикалық рұқсат етілмеген болса, онда осы облыста экспоненциалдық артатын құраушысы қатаң түрде нөлге тең болуы ( $a=0$ ) керек, демек,

$$\frac{1}{\sqrt{p}} \cos(|w(a,x)| - \frac{\pi}{4}) \leftarrow \psi(x) \rightarrow \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-|w|} \quad (11.15)$$

болатынын көреміз. (11.13) теңдеулерін қолдануының негізгі облыстары болып: Бор-Зоммерфельд кванттау шарттарының қорытындысы, туннельдік эффектiнiң жартылай классикалық бағалануы және  $\alpha$ -ыдырауының теориясы табылады. Осы және өзге де көптеген қолдануларын қарастыратын боламыз.



11.2-сурет. Үш және төрт бұрылыс нүктелік потенциалдар

### Параболалық интерполяция

(11.14) байланыс формуласы потенциалды сызықтық түріне келтіріп, одан бұрылыс нүктесінің төңірегіндегі облыстағы жуықтау жолымен алынды. Одан әрі осы формуланы туннельденудің және т.б. амплитудасын алу үшін қайта қолданатын боламыз. Кейбір жағдайларда екі бұрылыс нүктелері біріне-бірі тым жақын орналасып, жақсы жуықтау тек квадраттық потенциалымен қамтамасыз ететін болады. Нақтырақ айтатын болсақ, онда қосарланған бұрылыс нүктелерінің төңірегіндегі облыста Шредингер теңдеуін

$$\psi'' + (b - ax^2)\psi = 0$$

түрінде аппроксимациялауға болады. Оның шешімі болып парабодалық цилиндрлік функциялары табылады; осы тұрғыда олар сызықтандырылған потенциал жағдайындағы қолданылған Эйри функцияларының аналогиялық рөлін атқарады.

Төменде біз екі бұрылыс нүктелері бар үлкен емес классикалық рұқсат етілген облыстың екі жағы да классикалық рұқсат етілмеген облыстары бар мысалдары үшін байланыс формуласын келтіреміз. Қорытып шығаруын *қараңыз* [Berry and Mont (1972)].

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-|w(a_L, x)|) \overleftarrow{\psi} \overrightarrow{\psi} \exp(|w(a_R, x)|) \quad (11.16)$$

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{e}{\tilde{J}} \right)^{\tilde{J}} \Gamma \left( \tilde{J} + \frac{1}{2} \right) \cos(\pi \tilde{J}) \exp(|w(a_R, x)|) + \sin(\pi \tilde{J}) \exp(-|w(a_R, x)|) \right].$$

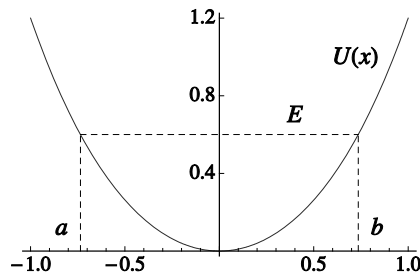
Мұндағы  $a_L, a_R$  – классикалық облысты шектеп тұрған екі бұрылыс нүктелері. Ал  $\tilde{J}$  айнымалының әсерін көрсетеді және  $\hbar$  бірліктерінде жазылған:

$$\tilde{J} = \frac{J}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx = \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\pi} \int_{a_L}^{a_R} p(x) dx. \quad (11.17)$$

(11.16) өрнегіндегі косинусы бар мүшесі классикалық рұқсат етілмеген облыста экспоненциалды артады, ал синусы бар қосынды кемиді. Бұдан

$$\lim_{\tilde{J} \rightarrow \infty} \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{e}{\tilde{J}} \right)^{\tilde{J}} \Gamma \left( \tilde{J} + \frac{1}{2} \right) = 2 \quad (11.18)$$

болатынын ескеру қажет.



11.3-сурет. Бірөлшемді потенциал. Мұндағы  $a, b$  – классикалық бұрылыс нүктелері

## 11.2 Бор-Зоммерфельд кванттауының ережелері

Енді 11.3-суретінде көрсетілген бірөлшемді потенциалды қарастырайық.

Біз Шредингер теңдеуінің  $E_n$  және  $\psi_n$  (мұндағы  $\psi_n \in \mathbb{L}^2$ ) байланысқан күйлерінің қатарын береді деп күтеміз. Шешімдердің жартылай классикалық өңдеуін классикалық бұрылыс нүктелерін анықтаудан бастаймыз:

$$p(x) = 0, \quad E = U(x).$$

Енді  $a$  және  $b$  түбірлері болсын. Біз келесі белгілеуді қолданамыз:

$$w(c, x) = \frac{1}{\hbar} \int_c^x \sqrt{2m(E - V)} dx, \quad \sigma(c, x) = \frac{1}{\hbar} \int_c^x \sqrt{2m(V - E)} dx.$$

Классикалық рұқсат етілген  $x < a$  және  $x > b$  облыстарында шешімнің асимптотикалық жіктеуі

$$\psi \sim \exp\left(\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx\right)$$

болуы қажет. Ал  $\psi_n \in \mathbb{L}^2$  талабы асимптотикада тек экспоненциалдық кемитін функцияларын ғана қолдануға болатынын орнатады; мысалы,  $x > b$  үшін қабылдауға болатын шешімнің түрі төмендегідей болады:

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(b, x)). \quad (11.19)$$

Онда (11.13) байланыс формуласынан  $x < b$  облысындағы толқындық функцияның

$$\frac{C}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(b, x)) \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p|}} \cos\left(w(x, b) - \frac{\pi}{4}\right) \quad (11.20)$$

болуы керектігін аламыз. Мұнда атап өтуді қажет етеді: осы формула толқындық функцияның фазасын бекітеді, бірақ өздігінен энергияның нақтылы мәнін таңдай алмайды.

Тура осындай пайымдаулар сол бұрылыс нүктесіне қолданғаннан соң, келесі шарттарды орнатады:

$$\frac{D}{2} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(x, a)) \rightarrow \frac{D}{\sqrt{|p|}} \cos\left(w(a, x) - \frac{\pi}{4}\right). \quad (11.21)$$

Кванттау шарты классикалық рұқсат етілген  $a \leq x \leq b$  облысындағы толқындық функцияның екі анықтамалары тең болу керектігінің шартынан шығады. Амплитудасы да тең болулары қажет, демек,

$|C|=|D|$  толқындық функцияның нақты мәнін әрқашан да  $D=\pm C$  етіп таңдауға мүмкіндігіміз бар. Фазаларды салыстыру үшін (11.21) теңдеуін келесі түрде жазайық:

$$\cos\left(w(a,x)-\frac{\pi}{4}\right)=\cos\left(w(a,b)-w(x,b)-\frac{\pi}{4}\right)=\cos\left(w(x,b)-w(a,b)+\frac{\pi}{4}\right).$$

Осы анықтама (11.20) теңдігінен  $C$  және  $D$  арасындағы таңбаға сәйкес  $n$ -нің не тақ, не жұп болуына байланысты  $n\pi$ -ға айырмашылығы болуы мүмкін. Демек,

$$-\frac{\pi}{4}=n\pi+\left(-w(a,b)+\frac{\pi}{4}\right)\Rightarrow w(a,b)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi. \quad (11.22)$$

Ал  $n$  мәнінің не тақ, не жұп болуына сәйкес  $D=(-1)^n C$  болатынын аламыз. Әсердің  $J$  классикалық анықтамасын пайдаланып, яғни  $p(x)$ -ті толық период бойынша (біздің осы жағдайымызда  $a \rightarrow b \rightarrow a$ ) интегралы ретінде анықтап, (11.22) теңдеуін келесі түрінде жаза аламыз:

$$J=\frac{1}{2\pi}\oint p(x)dx=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar. \quad (11.23)$$

Кванттаудың осы ережесін Бор-Зоммерфельдтің атымен атайды, бірақ аталған ережеде теңдіктің оң жағындағы қосымша  $\hbar/2$  мүшесі жаңадан пайда болды. Бұл айырмашылық кіші болмағанмен, өте маңызды. (11.23) теңдеуінен  $n$ -ді өзгертіп отырып, әртүрлі деңгейлердің  $E$  энергиясын есептеп табуға мүмкін болады.

Ал  $a$ -дан  $b$ -ға дейін  $x$  артқанда фазаның косинусы:

$$\frac{C}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p(x)dx-\frac{\pi}{4}\right)$$

$-\pi/4$  және  $n\pi-\pi/4$  аралығында өзгереді, яғни оның  $n$  нөлі болады. Демек осцилляторлық теоремаға (3.2.3-бөлімін қараңыз) сәйкес бұл энергиясы  $E_0 \leq E_1 \dots$  болатын  $n$ -ші қозған күйінің толқындық функциясы.

Айтып өткеніміздей, жартылай классикалық жуықтау электромагнетизмдегі геометриялық оптиканың шегіне, яғни толқын ұзындығының есептің өзіне тән ұзындығына қатысты кіші шама болуына сәйкес келеді. Біздің жағдайымызда өзіне тән ұзындық – ол классикалық рұқсат етілген облыс  $L=b-a$ , сондықтан  $n$  артқан сайын  $\lambda=h/p \sim L/n$  кішірейеді, демек, жуықтауымыз жақсарайды. Біз  $n \rightarrow \infty$  шегінде классикалық қалпына келтіре алуымыз керек.

Толқындық функцияны толығымен анықтау үшін  $C$  тұрақтысын бекітіп алуымыз қажет. Өдетте толқындық функцияның алдындағы жалпы тұрақтысы  $\mathbb{L}^2 = 1$  нормалау шартымен анықталады. Классикалық облысынан тыс жерде толқындық функция экспоненциалдық кіші болғандықтан, төмендегідей жазуымызға болады:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \approx \int_a^b |\psi|^2 dx = C^2 \int_a^b \frac{dx}{p} \cos^2 \left( \frac{1}{\hbar} \int_x^b p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right).$$

Жартылай классикалық жуықтауды жүргізу кезінде косинустың көп рет тербелетінін ескеріп, бірінші жуықтауда  $\cos^2(\varphi)$ -дің орнына  $\frac{1}{2}$  алмастыруымызға болады, сонда

$$\frac{C^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{p} = 1. \quad (11.24)$$

Тербеліс периоды:

$$T = 2 \int_a^b \frac{dx}{v} = 2m \int_a^b \frac{dx}{p}$$

тең болғандықтан, және сәйкесінше

$$\frac{C^2}{2} \frac{T}{2m} = 1 \Rightarrow C = 2 \sqrt{\frac{m}{T}} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi}}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}. \quad (11.25)$$

Біз  $C^2$  үшін  $n \gg 1$  деп алып, (11.24) жуықтауында бағалауды анықтадық. Шындығында бұл формулаларды  $n$  үлкен емес жағдайларда (дербес жағдай ретінде негізгі күйді атауға болады) да қолдана береді. 11.15-есемінде оқырман (11.25) теңдеуінің  $n \gg 1$  шартын пайдаланбайтын дәлелдемесін<sup>2</sup> табады.

### 11.2.1 Кванттық күйлерді есептеу

Кванттау шартының (11.23)

$$\frac{1}{2\pi} \oint pdq = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.26)$$

айқын геометриялық мағынасы бар. Классикалық периодтық қозғалыс фазалық кеңістікте тұйық траекторияға сәйкес келеді:

<sup>2</sup> У.Х.Фэри [Furry (1947)] дәлелдеген.

(11.26) теңдеуінің сол жақ бөлігі –  $(q, p)$  жазықтығындағы тұйық контурмен шектелген (бірөлшемді жағдайда) облыс. (11.26) қатынасы әрбір кванттық күй үшін фазалық кеңістіктің  $2\pi\hbar$  облысы сәйкес келетінін бекітеді. Бұл егер  $\Delta p \Delta q$  фазалық кеңістігінің макроскопиялық бөлігін қарастырғанымызда, оған кіретін кванттық күйлердің саны:

$$n = \frac{\Delta p \Delta q}{2\pi\hbar} \quad (11.27)$$

болады. Осы формуланың ең маңызды рөлі статистикалық физикада екендігі белгілі, ондағы маңызды элемент – күйлерді санау болып табылады. Қораптың ішіндегі бөлшек үшін (11.27) теңдігі қуыстың тербеліс модаларын классикалық санауды талап етеді:  $p/\hbar = k = 2\pi/\lambda$  толқындық саны, ал кванттау шарты қораптың мөлшерлері толқын ұзындығының жартысына еселі болуына әкеледі. Осы жағдай үшін жартылай классикалық жуықтауды қолданбауға да болады. Соған қарамастан, осы тұжырымдаманың артықшылығы – потенциалдың параметрлеріне тәуелсіз болуында.

(11.26) өрнегі классикалық және кванттық механиканың арасындағы байланысты түсінуге көмектесетін тағы бір қызықты қатынасты көрсетеді. Егер біз  $n \gg 1$  жүйесін қарастыратын болсақ, онда екі көрші деңгейлер арасының айырымын бағалай аламыз. Ол үшін екі деңгейдің  $\Delta E = E_{n+1} - E_n$  айырымы деп белгілесек, онда оның мәні ( $p = \sqrt{2m(E-U)}$  пайдаланып)

$$\Delta n = 1 = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta E \frac{\partial}{\partial E} \oint \frac{mdx}{p} = \frac{1}{2\pi\hbar} \Delta E T$$

болатынын табамыз, мұндағы  $T$  – классикалық қозғалыс периоды. Қозғалыстың бұрыштық жиілігін  $\omega = 2\pi/T$  белгілеп, табамыз:

$$\Delta E = \hbar\omega. \quad (11.28)$$

Мұның мәні:  $n$ -нің мәні үлкен болғанда, деңгейлердің арасы бірқалыпты болады, ал екі энергия деңгейлерінің айырымы екеуінің арасындағы өту жиілігіне сәйкес және классикалық тербелістің негізгі жиілігіне еселі болып табылады. Сонымен қатар, жартылай классикалық жуықтауда күйдің эволюциясы

$$\psi(x, t) \sim \sum_k \psi_k(x) e^{-ik\omega t}.$$

Бұл периоды  $T$  болатын периодты функцияның тек пішіні, басқаша айтатын болсақ, қарапайым Фурье-қатары.

Жүйенің классикалық сипатталуы фазалық кеңістіктегі дәл локальдығына сәйкес келеді деп күтіледі, яғни классикалық шекті алу үшін өзіне тән  $n$  кванттық саны үлкен болуы қажет. Бірақ мәндері таралуының ені жеткілікті дәрежеде кіші болуы керек, сонда  $\Delta p \Delta q$  көлемі нақтылы анықталады, сонымен қатар кванттық түйіршіктіктен  $2\pi\hbar$  әлдеқайда артық болады. Басқаша айтқанда, классикалық күй

$$1 \ll \Delta n \ll n$$

жағдайына сәйкес келеді. Егер осындай күйді жартылай классикалық өзіндік функциялар бойынша жіктейтін болсақ

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n,$$

онда  $c_n$  – қандай да  $\bar{n} \gg 1$  төңірегіндегі еңсіз  $n$  аралығында таралған коэффициенттері. Енді қарастырылғалы отырған  $f$  уақыт бойынша өзгеретін болсын<sup>3</sup>

$$\bar{f}(t) = \langle \Psi(t) | f | \Psi(t) \rangle = \sum_{m,n} c_n^* c_m f_{mn} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t}.$$

Осы қосындылауға кіретін барлық деңгейлер үшін біз (11.28) формуласын қолдана аламыз, демек

$$E_m - E_n = (m - n)\hbar\omega.$$

Айнымалыны алмастырып және  $m = n + k$  деп анықтап, келесі өрнекті аламыз:

$$\bar{f}(t) = \sum_n \sum_k c_{n+k}^* c_n f_{n+k,n} e^{ik\omega t} = \sum_k \tilde{f}_k e^{ik\omega t}.$$

Мұндай өзгеріс, яғни периоды  $T = 2\pi / \omega$  болатын классикалық қозғалыстың күтілген дамуы болатын. Классикалық Фурье құраушылары зерделенуші кванттық элементтерге сәйкес келетінін көреміз.

Гейзенберг тарихта кванттық механикаға келудің тура қарама-қарсы жолын таңдаған болатын. Классикалық бақыланатын элементтердің Фурье-құраушылары кванттық секірістермен, яғни Гейзенберг үшін зерттеудің негізгі шамасы болған  $F(n+k, n)$ -ның санымен байланысты болуы қажет-тін. Спектроскопиядағы Ритц ережелеріне аналогиялық түрде Гейзенберг  $F$  шамасына көбейту ережелерін ұсынды. Артынша осы ереже – жалпы жағдайда шексіз өлшемді матрицаларды көбейтудің ережесі болып қабылданды.

<sup>3</sup> Мұнда [Landau and Lifshitz (1976)] кітабындағы талқылауды қолдандық.

### 11.2.2 Тек $x > 0$ үшін анықталған потенциалдар

Егер алдындағы талдауды, яғни қозғалысы жартылай ось бойымен шектелген бөлшек үшін жалпыландыратын болсақ, онда басқа да әртүрлі қосымшаларда қолдану үшін пайдалы болар еді. Мысалы,  $s$ -толқынды бөлшектің  $V(r)$  сфералық симметриялы потенциалындағы радиалдық қозғалысы. *11.4-суретті қараңыз.* Онда толқындық функция  $\Psi(0)=0$  шектеуін қанағаттандыруы қажет. Формальді түрде кеңістікті  $x < 0$  облысына дейін кеңейтіп, әрі  $V(x)=V(|x|)$  пайдаланып, мұндай жағдайлар үшін кванттаудың шарттарын анықтау жеңіл болады. Онда классикалық бұрылыс нүктелері  $\pm a$ ; ал  $x=0$  шектеулері жаңа потенциалдағы тақ күйлерінде автоматты түрде қанағаттандырады, демек,

$$\begin{aligned} w(-a, a) = 2w(0, a) &= \left[ (2n+1) + \frac{1}{2} \right] \pi = \\ &= \left( 2n + \frac{3}{2} \right) \pi \Rightarrow w(0, a) = \left( n + \frac{3}{4} \right) \pi \end{aligned} \quad (11.29)$$

орындалады. Басқаша айтатын болсақ,  $J$  әсер интегралының тұрғысынан

$$\boxed{J = \frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx \equiv \frac{1}{2\pi} 2 \int_0^a p(x) dx = \left( n + \frac{3}{4} \right) \hbar.} \quad (11.30)$$

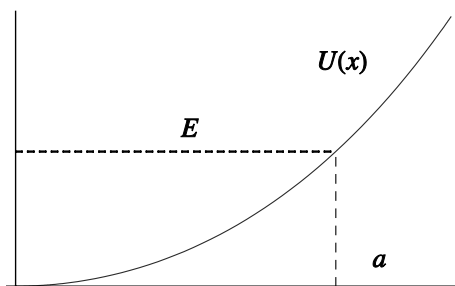
Осы нәтижені тікелей басқа да жағдайлар үшін өнегелік маңызы бар. Сәйкестік шарты мен  $\psi \in L^2$  талабы осы жағдай үшін

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\sigma(a, x)) \rightarrow \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \cos\left(w(x, a) - \frac{\pi}{4}\right)$$

әкеледі. Ал  $x=0$  нүктесінде функцияның нөлге тең болуы келесі қосымша талапты орнатады:

$$w(0, a) - \frac{\pi}{4} = n\pi + \frac{\pi}{2} \rightarrow w(0, a) = n\pi + \frac{3\pi}{4},$$

мұның өзі (11.29) шарты болып шығады.



11.4-сурет.  $x > 0$  облысымен шектелген бірөлшемді потенциал.  $0, a$  – бұрылыс нүктелері

### 11.2.3 $\hbar \rightarrow 0$ шегінің мәні

Байқампаз оқырман уақыттың бір моментінде келесі сұраққа жауап іздейтіні анық:  $\hbar \rightarrow 0$  шегін қарастыру дегеніміз нені білдіреді? Себебі  $\hbar$  – өлшемі бар шама болып табылады. Оның өлшемі әсердің өлшемімен бірдей, демек, ВКБ жуықтауының әділеттілігі жөніндегі сұрақ, енді есептің қарапайым әсері мен  $\hbar$  арасындағы салыстыруға байланысты болмақ. Квантталу шартының түріне қарап ((11.23) теңдеуі), жуықтаудың жалпы  $\hbar/J \ll 1$  жағдайында, яғни  $n$ -нің үлкен мәндерінде жүзеге асырылатынын көреміз. Жоғарыда атап өткеніміздей, осы жағдай геометриялық оптиканың аналогиясы тәрізді. Осылайша, формальдық түрде жартылай классикалық жуықтау  $J$  тұрақты немесе дәрежесін  $1/n$  бойынша жіктеу жағдайы орындалғанда,  $\hbar \rightarrow 0$  шегінде анықталады. Біздің пайымдауымызша, ВКБ жуықтауына түзетулердің түрі төмендегідей болады:

$$\frac{J}{\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(x) dx = n + \frac{1}{2} + \frac{c_1}{n} + \dots$$

(11.23) теңдеуін  $1/n$  бойынша жіктеуінің доминанттық және бірінші субдоминанттық мүшелері тәрізді түсіндірілуі керек. Оған қоса ВКБ жуықтауындағы «орналасқан» («жеңілдетілген») шарттар жөніндегі кез келген сұрақ, осындай кеңейтудің тізбектей шарттары тұрғысынан қарастырған жөн. Мысалы, ВКБ жуықтауы сутегі атомының және гармоникалық осцилляторының спектрін дәлме-дәл қайта орнына келтіретінін міндетті түрде көрсетеміз. Ол үшін түзетулердің нөлге айналуы көрсетілмейінше, мұндай бекінімдер өздігінен ешқандай мағынаға ие бола алмайды. Еске сақтау керекті тағы бір момент бар. Ол  $\hbar$ -тың  $\hbar^2 d^2/dx^2$  кинетикалық мүшесінен басқа, толық гамильтонианның өзге қосындыларында, яғни потенциалында пайда болу мүмкіндігі. Жартылай классикалық жуықтаудың ерекшелігіне сәйкес, толқын ұзындығының

қысқалығына негізделген жуықтауларда потенциалдың қосылғыштарын ескермеуге болады.

Осы ережелерден ауытқулар сингулярлық потенциалдардың, мысалы,  $\hbar/x$  түріндегі потенциалдың мүшесі пайда болғанында туындайды. Оларды  $x=0$  ерекше нүктесінің төңірегінен басқа облыстарда ескермеуге де болады. Мұндай жағдайларда ВКБ жуықтауы жұмыс жасамайды және толқындық функцияның нақтылы түрі сингулярлықтың сипаттамасын анықтайды: бұл жағдай (11.14) теңдеуінде көрсетілген жалпы формуладағы  $\alpha$  фазасының бұрылыс нүктесінің төңірегіндегі толқындық функциясы тәртібінің тәуелділігіне ұқсайды. Мұндай мәселе, мысалы, келесі бөлімде қарастырылатын бұрыштық айнымалыларды өңдеу кезінде туындайды.

### 11.2.4 Бұрыштық айнымалылар

Енді Шредингер теңдеуінің бұрыштық айнымалыларға тәуелді болатын жағдайын қарастырамыз. Ең қарапайым жағдай  $L_z$ -пен байланысты. Азимуттық қозғалысы үшін Шредингер теңдеуінің түрін жазамыз:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}, \quad (11.31)$$

мұндағы  $\varphi$  – азимуттық бұрыш,  $f$  – толқындық функция және  $\lambda$  – өзіндік мәні. (11.31) теңдеуінің дәл шешілетіні анық; дегенмен, жартылай классикалық жуықтау тұрғысынан оны массасы  $\frac{1}{2}$  және энергиясы  $\lambda$  болатын бөлшек үшін бірөлшемді Шредингер теңдеуі ретінде қарастыруымызға да болады. Классикалық импульс  $\varphi$  құраушысының түйіндесі  $p_\varphi = \pm\sqrt{\lambda}$  -ге тең. Екі мүмкін болатын  $p_\varphi$  үшін анықтамалары екі классикалық шешімдерге сәйкес болады:

$$f = C \exp\left[\pm \frac{i}{\hbar} \int_0^\varphi p_\varphi d\varphi\right] = C \exp\left(\pm \frac{i}{\hbar} p_\varphi \varphi\right). \quad (11.32)$$

Қызықты факт:  $\varphi$  периоды болғанымен,  $p_\varphi$  тұрақты және нөлге тең емес, оған қоса бұрылыс нүктесі жоқ және (11.32) жартылай классикалық шешімі барлық жерде орынды. Квантталу шарты  $\varphi$ -дің периодтылығы шартынан туындайды:

$$f(\varphi + 2\pi) = f(\varphi); \Rightarrow p_\varphi = \hbar m; \quad m \in \mathbb{Z}$$

жүйенің дәл шешімі.

Назар аударыңыздар: тербеліс жағдайынан айырмашылығы - осы жағдайда кванттау шартында жартылай бүтін түзетулері болмайды. Қозғалыстың осы екі түріне ескі кванттық теорияда айналмалы және тербелмелі қозғалыстары сәйкес келеді және сәйкесінше кванттау шарты да ( $\hbar/2$  не бар, не жоқ) орнатылады.

ВКБ толқындық функциясының нормалау өрнегі:

$$f(\varphi) = \frac{C}{\sqrt{|p_\varphi|}} \exp(im\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\varphi).$$

Нормалау тұрақтысының (11.25) теңдеуіндегіден айырмашылығы: нақты тригонометриялық функцияның орнына мұнда комплекстік экспоненциалдық функцияны қарастырып отырмыз. Үшөлшемді жағдайда бұрыштық айнымалылары үшін теңдеудің түрі күрделірек:

$$-\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\} \psi = \Lambda \psi. \quad (11.33)$$

Бұрыштық моменттің теориясынан белгілі: оның дәл шешімі  $\Lambda = \hbar^2 \ell(\ell+1)$  болғанда, өзіндік функциялары анықталады. Енді осы есептің жартылай классикалық әдісінде шешілетінін көрсетейік. Есепті жеңілдету мақсатында  $m=0$  деп пайымдалық, яғни  $\varphi$ -ге қатысты мүшенің туындысынан «құтылу» керек. Сонымен, (11.33) теңдеуінің дәл шешімі:

$$\psi(\theta) = P_\ell(\cos\theta); \quad \ell \in \mathbb{N}; \quad \psi(0) = 1. \quad (11.34)$$

$\psi(\theta) = f(\theta) / \sqrt{\sin\theta}$  айнымалыны алмастырудан соң, (11.33) теңдеуін

$$\hbar^2 \left[ \frac{d^2 f}{d\theta^2} + \left( \frac{1}{4} + \frac{1}{4\sin^2\theta} \right) f \right] + \Lambda f = 0; \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad (11.35)$$

түріне келтіру қиын емес.

«Классикалық импульс»

$$p_\theta = \sqrt{\Lambda + \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^2}{4\sin^2\theta}}. \quad (11.36)$$

(11.35) теңдеуінің жартылай классикалық жуықтаудың орындалу шарты облыс шекарасының төңірегінде бұзылады.  $\theta \sim 0$  төңірегінде де Бройль толқынының ұзындығы  $\lambda_\theta = \hbar / p_\theta \sim \theta$  болады, ал  $\theta \sim \pi$  облысы үшін  $-d\lambda_\theta / d\theta \sim 1$ . Осы облыстардан қашықта шекті  $\Lambda$  және

$\hbar \rightarrow 0$  үшін біз  $1/\sin^2 \theta$  мүшесін ескермеуімізге болады. Онда  $\lambda = \sqrt{\Lambda + \hbar^2/4}$  деп пайымдап, жартылай классикалық шешімді жазайық:

$$f(\theta) = A \cos(\lambda\theta - \alpha), \quad (11.37)$$

мұндағы

$$\frac{\hbar}{\sin \theta} \ll \lambda; \quad \text{яғни } \theta \gg \frac{\hbar}{\lambda} \quad \text{және} \quad \theta \ll \pi - \frac{\hbar}{\lambda}.$$

Әдетте,  $\alpha$  фазасы сәйкестену шартынан анықталады, бірақ осы жағдайда (11.15) теңдеуін тікелей қолдануға болмайды, себебі сингулярлықтың қатысы бар: сәйкестікті сингулярлықтың төңірегіндегі дәл шешімін табу жолымен жасау қажет және оны (11.37) теңдеуімен байланыстыру қажет. Ал  $\theta \ll 1$  үшін (11.35) теңдігінің түрі

$$\frac{d^2 f}{d\theta^2} + \left( \frac{\lambda^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4\theta^2} \right) f = 0 \quad (11.38)$$

болады, оның шешімінің түрі қарапайым:

$$f(\theta) \sim \sqrt{\theta} J_0\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta\right); \quad \theta \ll 1, \quad (11.39)$$

мұндағы  $J_0$  – нөлінші ретті Бессельдің функциясы. (11.39) теңдігінің нормалануы (11.34) теңдігін қанағаттандыру үшін арнайы осылайша таңдалады және  $J_0(0) = 1$  пайдаланылады.  $\lambda \gg 1$  үшін  $\hbar/\lambda \ll \theta \ll 1$  облысының айналасында (11.39) теңдігі (11.37) теңдігімен қиылысу облысына ие болады.

Осы анықталу облысында келесі асимптотикалық кеңейтуді <sup>4</sup> қолданайық:

$$J_0\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta\right) \sim \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda\theta}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta - \frac{\pi}{4}\right) \quad (11.40)$$

және (11.37) теңдеуіндегі екі  $A$  және  $\alpha$  тұрақтыларын бекітеді:

<sup>4</sup> Осы кеңейтуді интегралдық көріністегі тоқымдық нүкте әдісімен алуға болар еді:

$$J_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta \cos(z \sin \theta).$$

$$f(\theta) = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta - \frac{\pi}{4}\right).$$

Қарастырылған жағдайларға байланысты, рәсім  $\lambda$  -ның мәнін бекітпейді, ол  $f(\theta)$  функциясының бірмәнділігінен шығуы керек болатын. Кіші  $\theta$  үшін бағалауды  $\theta = \pi$  екінші сингулярлық нүктесінің төңірегінде қайталауға болады: ол үшін айнымалыларды алмастырып және  $x = \pi - \theta$  етіп бекітуі жеткілікті. Осылайша  $f$  үшін екінші өрнекті табамыз:

$$\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}(\pi - \theta) - \frac{\pi}{4}\right) = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi\lambda}} \cos\left(\frac{\lambda}{\hbar}(\theta - \pi) + \frac{\pi}{4}\right).$$

Екі анықтама таңбаның белгісіне дейінгі дәлдікпен бірдей болуы қажет, сондықтан

$$\left(\frac{\lambda}{\hbar}\theta - \frac{\pi}{4}\right) - \left(\frac{\lambda}{\hbar}(\theta - \pi) + \frac{\pi}{4}\right) = \pi\ell \quad \lambda = \hbar\left(\ell + \frac{1}{2}\right); \quad \ell \in \mathbb{N},$$

бұдан  $\Lambda = \lambda^2 - \hbar^2/4 = \hbar^2\ell(\ell + 1)$  және толқындық функцияны табамыз:

$$P_\ell(\cos\theta) = J_0((\ell + 1)\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi\ell\theta}} \cos\left(\left(\ell + \frac{1}{2}\right)\theta - \frac{\pi}{4}\right), \quad (11.41)$$

мұнда  $\lambda/\hbar \gg 1$  шарты  $\ell$ -ден  $\ell \gg 1$  дейінгі аралықта орынды.

Біз  $L^2$ -тің өзіндік мәндері үшін дәл нәтижесін алғанымыздың өзі кішігірім қулықтың барын білдіреді: ол (11.36) теңдеуіндегі  $\hbar^2/4$  мүшесінің сақталуынан шығады. Біздің зерделеп отырған жартылай классикалық  $\hbar^2 \rightarrow 0$  шегінде бекітілген  $\Lambda$ -ның мәні үшін қандай да еркін тәртіп бар: қатаң айтатын болсақ, біз ондай мүшелерді сақтап қалуымызға құқығымыз жоқ, ал стандарттық жартылай классикалық жуықтауының туындыларынан көбеймейтін,  $\hbar$ -қа пропорционал барлық мүшелерді лақтырып тастаудан құралады. Қалған талқылауларымыз дұрыс,  $\ell$ -дің үлкен шектерінде  $\Lambda = \hbar^2(\ell + 1/2)^2$  теңдігін алар едік. Ал ол жоғарыда табылғанмен, кез келген жағдайда бірдей.

Бұдан келесі сұрақ пайда болады:  $\ell$ -дің кіші мәндерінде, дербес жағдайда  $S$ -толқын үшін формуланы қайда қолдануға болады? Осы жағдай үшін жуықтаудың сапасы жүйеге тәуелді болып қалады: үшөлшемді кулондық потенциалы үшін  $\Lambda \rightarrow \hbar^2(\ell + 1/2)^2$  алмастыруы көңілге қонымды жуықтауды беретінін көреміз.

### 11.2.5 Радиалдық теңдеулер

Жалпы потенциалда сингулярлық нүктелері болса, онда аналогиялық талқылауларды қолдануға болады. Егер бұрылыс нүктелері бірдей болса немесе сондай сингулярлық нүктелерінің төңірегінен табылатын болса, онда жоғарыда табылған байланыс формулаларына сәйкес түрде өзгерістер енгізу қажет. Біз бөлшектің  $r \geq 0$  жартылай осінде «орналасқан» жағдайындағы радиалдық теңдеуін қарастырған болатынбыз. (11.23) кванттау шартының (11.30) теңдеуіне өзгергенін көрдік. Мәселе  $r=0$  нүктесінде потенциал сингулярлық болатындығында, мысалы кулондық потенциал немесе  $1/r^2$ -ге тәуелді орталықтан тебу потенциалы үшін өзекті болады.

Енді  $U(r)$  сфералық симметриялы потенциалында қозғалатын бөлшекті қарастырайық. Келтірілген толқындық функциясы  $\varphi = R(r)/r$  үшін Шредингердің радиалдық теңдеуінің түрі:

$$\hbar^2 \frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \left[ 2m(E-U) - \frac{L^2}{r^2} \right] \varphi = 0; \quad L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1) \quad (11.42)$$

болады. Жалпы жағдайда, жартылай классикалық жуықтауы орындалуының шарты

$$\frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar}{|p|} \right) \ll 1; \quad p = \sqrt{2m(E-U) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \ell(\ell+1)}.$$

Түрі  $V \sim Cr^{-\alpha}$  болатын сингулярлық потенциалы үшін  $r \rightarrow 0$  жағдайында  $|p| \sim \sqrt{2mV} \sim r^{-\alpha/2}$  болады, яғни

$$\frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar}{|p|} \right) \sim \frac{\alpha \hbar}{2\sqrt{2mC}} r^{\alpha/2-1} \ll 1.$$

Жартылай классикалық шарты  $\alpha < 2$  үшін басында-ақ бұзылады, дербес жағдайда  $S$ -толқынындағы кулондық потенциал үшін, ал  $\alpha = 2$  жағдайында (мысалы,  $\ell \neq 0$  үшін кулондық потенциал) шекарадағы мәнін табамыз. Бұл да жалпы жағдай, өйткені орталықтан тебу потенциалы доминантты болып табылады:

$$\frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar}{|p|} \right) \sim \frac{1}{\sqrt{\ell(\ell+1)}}.$$

Күткеніміздей, жуықтауды тек  $\ell \gg 1$  үшін қолдануға болады.

Енді  $U = -Ze^2/r$  кулондық потенциалдың қызықты жағдайын талдайық. Екі есепті жеке-жеке қарастырамыз:

## (а) Спектрдің жартылай классикалық бағалануы

Осы жағдай үшін Бор-Зоммерфельдтің кванттау шартын тізбектей қолданамыз. Рәсімге сәйкес бұрыштық бөлігі төмендегідей квантталады:

$$L = \hbar \left( \ell + \frac{1}{2} \right).$$

Осы өрнекті  $p_r$  радиалдық импульсін есептеу үшін пайдаланайық:

$$p_r(r) = \sqrt{2m \left( E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left( \ell + \frac{1}{2} \right)^2 \right)}$$

және (11.23) кванттау шартын қолданайық.  $p_r = 0$  теңдеуінің  $E < 0$  үшін екі түбірі бар, олар екі  $r_1$  және  $r_2$  бұрылыс нүктелері болып табылады:

$$\frac{1}{r_{1,2}} = \frac{(\ell + 1/2)^2}{a_0} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{2|E|}{\varepsilon_0} (\ell + 1/2)^2} \right),$$

мұндағы

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{Zme^2}; \quad \varepsilon_0 = \frac{Ze^2}{a_0}.$$

(11.23) шартын төмендегідей жаза аламыз:

$$J_r = \frac{1}{2\pi} \oint p_r(r) dr = \frac{1}{\pi} \int_{r_1}^{r_2} p_r(r) dr = \hbar \left( n_r + \frac{1}{2} \right). \quad (11.43)$$

Интегралдауды жүргізе отырып, біз

$$J_r = \hbar \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{2|E|}} - \hbar \left( l + \frac{1}{2} \right) = \hbar \left( n_r + \frac{1}{2} \right) \quad n_r = 0, 1, \dots$$

теңдігін аламыз, демек, энергия деңгейлерінің түбірлерін төмендегідей жазамыз:

$$E_n = -|E| = -\frac{\varepsilon_0}{2n^2}; \quad n = n_r + l + 1 = 1, 2, \dots$$

Бұл дәл жауабымен бірдей болады. Толығырақ 11.3-есебін қараңыз.

## (ә) Толқындық функция үшін жартылай классикалық жуықтау

Дербес жағдайында,  $p_r$  және энергияның деңгейлері үшін кванттау шарттарын қалпына келтіргіміз келеді. Осы жағдайда толқындық функция үшін жақсы жуықтауды табу қажет, ал оның жоғарыда аталған мәселелері баршылық. Мысал ретінде атап өтейік,  $\ell > 0$  үшін  $r \sim 0$  облысы классикалық тыйым салынған зонасында табылады және ВКБ рәсімі функцияның тәртібіне төмендегідей талап орнатады:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\int |p(r)| dr} \sim \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\pm \sqrt{\ell(\ell+1)} \int \frac{dr}{r}} = r^{1/2} r^{\pm \sqrt{\ell(\ell+1)}}.$$

Сонымен қатар, бұл (11.42) теңдеуінен шығатын  $\varphi \sim r^{\ell+1}$  қарапайым талап.

Біз (11.23) кванттау ережесінің  $L^2 \rightarrow \hbar^2 \ell(\ell+1)$  жағдайы үшін дұрыс емес нәтижесін беретінін тексеруді оқырманның өзіне қалдырамыз.

(11.42) радиалдық теңдеуіндегі  $\hbar \rightarrow 0$  шегін тізбектей өңдеу әдісі [Langer (1937)] ұсынылған болатын. Әдістің идеясы: сингулярлық нүктені шексізге жылжытып, ал ВКБ формуласын бүкіл нақты осінде қолдануға болатындай етіп айнымалыларды алмастыруды жүргізу. Нәтижесі болып тағы да  $\ell(\ell+1) \rightarrow (\ell+1/2)^2$  алмастыруы табылады, оны Лэнжер түзетуі деп атайды.

### Лэнжер түзетулері

Айнымалыларды алмастыру өрнектерін жазайық:

$$r = e^x; \quad \varphi = e^{x/2} u(x). \quad (11.44)$$

Бұларды (11.42) теңдеуіне қоятын болсақ, онда

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \ell(\ell+1) + \frac{1}{4} \right) u + (Ee^{2x} + Ze^2 e^x) u = 0$$

өрнегін аламыз. Ал  $E < 0$  үшін эффективтік импульсіміз тең болады:

$$p(x) = e^x \sqrt{2m \left( Ze^2 e^{-x} - |E| - \frac{\hbar^2 (\ell+1/2)^2}{2m} e^{-2x} \right)}.$$

Осылайша алмастырып қойғаннан кейін, ВКБ жуықтауы бұрылыс нүктелерінің төңірегі және потенциалдың сингулярлық нүктесінде шексізге бағытталған облыстарынан басқа жерлерде, нақты осьтің бойымен қолдануға келеді. Бұрылыс нүктелері алдыңғы жағдайдағы

тәрізді  $e^{-x}$  -ті  $1/r$  -мен алмастырамыз, онда Бор-Зоммерфельдтің кванттау шарттары:

$$\hbar \left( n_r + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\pi} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \hbar (\ell + 1/2) \int_{x_1}^{x_2} e^x \sqrt{\left( e^{-x} - \frac{1}{r^2} \right) \left( \frac{1}{r_1} - e^{-x} \right)} dx.$$

Бұл  $r = e^x$  айнымалысын алмастырған соң, (11.43) теңдеуімен бірдей болады. Демек, сутегі тәрізді атомдардың спектрін дұрыс береді.

Ал  $x \rightarrow \infty$  шегінде импульстің тәртібі  $|p(x)| \rightarrow \hbar(\ell + 1/2)$  болғандықтан, кіші  $r$  үшін табамыз:

$$u \sim \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\int \frac{|p|}{\hbar} dx} \rightarrow e^{(\ell+1/2)x},$$

ал келтірілген функция:

$$\varphi = e^{x/2} u \rightarrow e^{(\ell+1)x} = r^{\ell+1}.$$

Мұның өзі  $r \rightarrow 0$  нүктесіндегі дұрыс тәртібі болып табылады.

Ланжер түзетулерін кез келген сфералық симметриялық потенциал жағдайында қолдана беруге болады.

## 11.2.6 Мысалдар

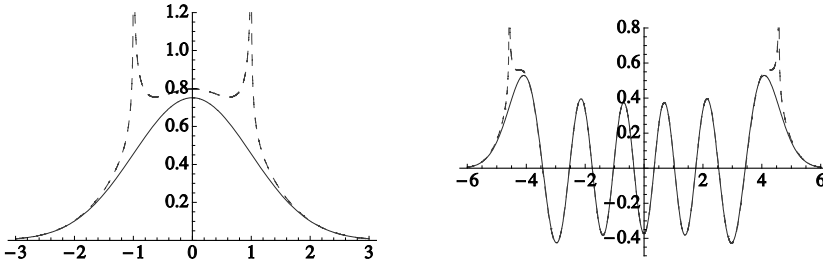
### Гармоникалық осциллятор

ВКБ формуласын гармоникалық осцилляторға қолданғанда

$$\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\pi} \sqrt{2mEa} \int_0^1 \sqrt{1-z^2} dz = \frac{2E}{\omega\pi} \frac{\pi}{2} = \frac{E}{\omega}$$

теңдігін беретіні мәлім және энергияның деңгейлері үшін дәл мәнін аламыз. Егжей-тегжейін қарастыруды оқырманға жаттығу ретінде қалдырамыз.

Мүмкін толқындық функция үшін нәтижесі мәлім болмас. *11.5-суретте* негізгі және  $n=10$  күйлері үшін дәл толқындық функция мен жартылай классикалық толқындық функциялары салыстырылған:  $n=10$  үшін бұрылыс нүктелерінің төңірегінен басқа облыстарда жуықтау таңғаларлықтай жақсы екендігі көрініп тұр.



**11.5-сурет.** Гармоникалық осцилляторлардың  $n=0$  және  $n=10$  күйлері үшін ВКБ толқындық функциясы (үздіксіз сызық) және дәл толқындық функция (үздікті сызық)

Анықтама ретінде ВКБ толқындық функцияларының айқын түрін береміз:

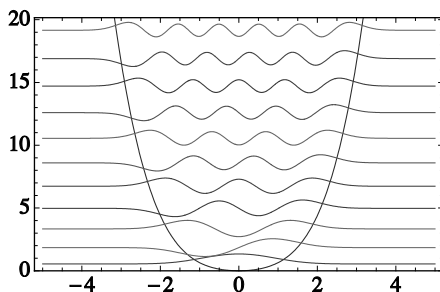
$$C = \sqrt{\frac{4m}{T}}; \quad a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}; \quad E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right); \quad p(x) = \sqrt{2mE}\sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}$$

және

$$\begin{aligned} 0 < x < a: \quad \psi(x) &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{2\pi}{4} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\pi}{4} + \int_0^x \frac{p(x)}{\hbar} dx\right) = \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\frac{n\pi}{2} + \frac{E}{\hbar\omega} \left[ \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) + \frac{x}{a} \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} \right]\right); \\ a < x: \quad \psi(x) &= \frac{C}{2\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{E}{\hbar\omega} \left[ \frac{x}{a} \sqrt{\frac{x^2}{a^2} - 1} - \arg \operatorname{ch}\left(\frac{x}{a}\right) \right]\right). \end{aligned}$$

Классикалық бұрылыс нүктелеріндегі үзілістер жалпы шектеулерді білдіреді. Дәлірек жуықтауларды жүргізуге де болады (NB-11.9 қараңыз). ВКБ жуықтауы тіпті өтудің классикалық нүктесінде толқындық функцияны бірқалыпты жақындатады.

Төртінші дәрежелі осцилляторлар үшін мысалды 11.6-суретінен көресіз.



11.6-сурет. Ангармоникалық осциллятордың алғашқы бірнеше күйлері үшін бірқалыпты ВКБ жуықтауы

### Төртінші дәрежелі потенциал

Потенцилдың төртінші дәрежесіне  $U = \frac{g}{2}x^4$  тривиалды дерлік жағдай келеді:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}gx^4\psi = E\psi. \quad (11.45)$$

Одан әрі  $x = \lambda z$  түрлендіруін жасап, мұндағы  $\lambda = (\hbar^2 / mg)^{1/6}$ , (11.45) теңдеуінің

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{1}{2}z^4\psi = \frac{\epsilon}{2}\psi; \quad \frac{\epsilon}{2} = E \left( \frac{m}{\hbar^2} \right)^{2/3} g^{-1/3} \quad (11.46)$$

түріне айналатынын көреміз. (11.46) теңдеуінің өзіндік мәндері қандай да параметрлерге тәуелді емес, демек, оларды зерделеу жеткілікті. Соңғы өрнектен табамыз:

$$E_n = \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^{2/3} g^{1/3} \frac{\epsilon}{2}. \quad (11.47)$$

(11.46) теңдіктері үшін бұрылыс нүктелері болып  $z = \pm a = \pm \epsilon^{1/4}$  табылады және кванттау шарттарын төмендегідей етіп қайта жазуымызға болады<sup>5</sup>:

$$n+1 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\epsilon} 2 \int_{-a}^a \sqrt{1 - \left(\frac{z}{a}\right)^4} dx = \frac{2}{\pi} a \sqrt{\epsilon} I, \quad I = \frac{1}{4} B\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}{8 \Gamma\left(\frac{7}{4}\right)} = 0.8740192,$$

бұдан:

<sup>5</sup>  $B(p, q)$  – Эйлердің бета-функциясы.

$$\varepsilon_n = \left[ \frac{\pi}{2I} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3}.$$

ВКБ жуықтауы мен дәл деңгейлерінің нәтижелері (оларды алдыңғы тарауда қарастырылған вариациялық әдіспен табуға болады) арасындағы салыстыру төменде көрсетілген:

$n$	$\varepsilon_n$	$\varepsilon_n^{WKB}$	$\delta\varepsilon / \varepsilon$
0	1.06036	0.86715	0.18222
1	3.79967	3.75192	0.01257
2	7.45570	7.41399	0.01257
3	11.64475	11.61153	0.00285
4	21.23837	16.23361	0.00173
5	21.23837	21.21365	0.00116

Көрініп тұрғандай,  $n$  артқан сайын жуықтау бірте-бірте жақсарады, негізгі күйі үшін де көңілге қонымды.

### 11.3 Туннельдік эффект

Кванттық механикаға тән қасиеттердің бірі – туннельдік эффект: классикалық тұрғыда – ол кеңістіктің бөлігімен бөлінген екі зонаның арасындағы бөлшектің тыйым салынған өтуі. Осындай жағдай *11.7-суретінде* көрсетілген: бөлшек потенциалдың максималдық биіктігінен кіші энергиямен сол жақтан потенциалдық тосқауылға соқтығысады. Бөлшек үшін классикалық жалғыз мүмкіндік – кейін қарай серпілуі болады; ал кванттық механика тұрғысынан, бөлшек нөлге тең емес амплитудасымен тосқауылдан өтеді. Осы үдерістерді қарапайым бір өлшемді есептерді *3-тарауда* талқылаған болатынбыз; мұнда құбылыстың жартылай классикалық сипаттауын көрсетеміз. Үдерістің ассимптотикада сипаттайтын стационарлық толқындық функциясы:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k}} [e^{ikx} + re^{-ikx}] & x \rightarrow -\infty \\ \frac{1}{\sqrt{k'}} te^{ik'x} & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (11.48)$$

мұндағы  $k$  және  $k'$  – түсуші және шығатын бөлшектердің толқындық сандары:

$$p = \hbar k; \quad p' = \hbar k'.$$

Потенциал үшін  $x \rightarrow \pm\infty$  жағдайларындағы шектік мәндері сәйкесінше  $0$  және  $V_0$  болсын, оған қоса олардың импульстері:

$$p = \sqrt{2mE}; \quad p' = \sqrt{2m(E - V_0)}.$$

Ток тығыздығының өрнегінен:

$$j = \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{d}{dx} \psi - \psi \frac{d}{dx} \psi^* \right),$$

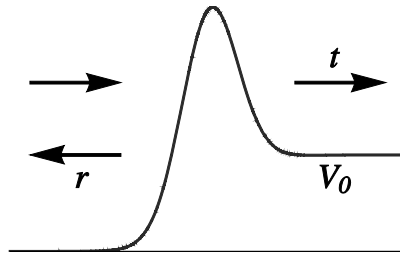
(11.48) толқындық функциясының бірлік түсуші ағыны, ал  $|r|^2$  шағылған бөлшектердің ағынына және  $|t|^2$  потенциалдық тосқауылдан өтетін ағынға сәйкес келеді. Басқа сөзбен айтатын болсақ, шағылудың және туннельдеудің ықтималдылықтары сәйкесінше  $|r|^2$  және  $|t|^2$  болады. 11.7-суретте көрсетілген есебімізге қайта оралатын болсақ, онда  $V_0 \leq E \leq V_{\max}$ . Ең қарапайым жағдай  $V_0 = 0$  болғанда, ал келесі формулалар осы соңғы жағдай үшін қатысты.

Мұнда екі  $a, b (a < b)$  бұрылыс нүктелері бар, олар  $p(x) = 0$  теңдеуінің шешімі болып табылады. Шекаралық шарттарды келесідей орнатамыз: өтуші толқындар тек  $x \rightarrow +\infty$  облысында табылады (түсуші бөлшек сол жағынан бағытталады), жартылай классикалық толқындық функциялардың түрлері  $x < a$  және  $x > b$  облыстарында

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} e^{i\omega(a,x)} + R(E) \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-i\omega(a,x)}, \quad \psi(x) = T(E) \frac{1}{\sqrt{p}} e^{i\omega(b,x)}$$

болады, мұндағы фазалар (11.10) формуласымен анықталған. Нәтижесінде  $R$  және  $T$  коэффициенттері үшін:

$$T(E) = \frac{e^{-w(a,b)} e^{i\delta(E)}}{(1 + e^{-2w(a,b)})^{1/2}}, \quad R(E) = \frac{e^{i\delta(E)}}{(1 + e^{-2w(a,b)})^{1/2}}, \quad (11.49)$$



**11.7-сурет.** Туннельдік эффектінің сызбалық суреттемесі: сол жақтан түсуші толқын өтуші (t) және шағылушы (r) толқындарының пайда болуына әкеледі

мұндағы

$$\tilde{w}(a,b) = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(x)| dx.$$

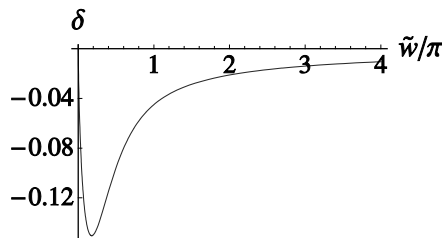
Ал  $|T|^2$  туннельденудің ықтималдылығын береді:

$$P(\text{туннель}) = |T|^2 = \frac{e^{-2\tilde{w}(a,b)}}{1 + e^{-2\tilde{w}(a,b)}} \approx e^{-\frac{\hbar}{2} \int_a^b |p(x)| dx}.$$

Осы атақты кванттық механикалық формулаға сәйкес туннельденудің ықтималдылығы экспоненциалды кемиді, классикалық тыйым салынған облыста ( $\hbar$  бірліктерінде) экспонента екі еселенген  $\tilde{w}(a,b)$  «келтірілген әсері» болып табылады.

Фазаны да  $\delta(E)$  анықтауға болады:

$$\delta(E) = \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar} \log \left| \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar e} \right| + \arg \Gamma \left( \frac{1}{2} - i \frac{\tilde{w}}{\pi\hbar} \right), \quad (11.51)$$



**11.8 – сурет.**  $\delta(E)$  фазасы  $\tilde{w}/\pi$ -дің функциясы ретінде.

мұндағы  $\Gamma$  – Эйлердің гамма функциясы. Біз бұл нәтижені жиі қолданбаймыз, бірақ назар аударыңыздар: осы фазаның мәні әрдайым өте аз болады, ол *11.8-суретінде* көрсетілген. (11.50)

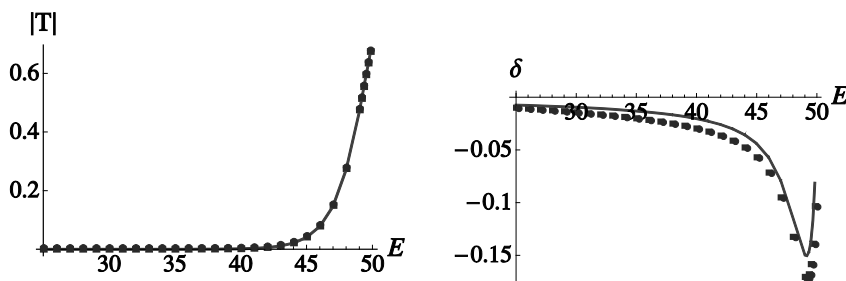
формуласының дәлелдемесі болып, байланыс формуласының қарапайым қолданылуы табылады. Расында, потенциалдың оң бөлігінен бастап:

$$\begin{aligned}
 e^{i\left(w(b,x)-\frac{\pi}{4}\right)} &= \left[ \cos\left(w(b,x)-\frac{\pi}{4}\right) + i \sin\left(w(b,x)-\frac{\pi}{4}\right) \right] \rightarrow \left[ \frac{1}{2} e^{-\tilde{w}(x,b)} - i e^{\tilde{w}(x,b)} \right] \simeq \\
 &\simeq -i e^{\tilde{w}(x,b)} = -i e^{\tilde{w}(a,b)} e^{-\tilde{w}(a,x)} \rightarrow -i e^{\tilde{w}(a,b)} 2 \cos\left(w(x,a)-\frac{\pi}{4}\right) = \\
 &= e^{-\frac{i\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} \left[ e^{i\left(w(x,a)-\frac{\pi}{4}\right)} + e^{-i\left(w(x,a)-\frac{\pi}{4}\right)} \right] = \\
 &= e^{-\frac{i\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} \left[ e^{i\left(-w(x,a)+\frac{\pi}{4}\right)} + e^{i\left(w(x,a)+\frac{\pi}{4}\right)} \right].
 \end{aligned}$$

Ал екі жағының қатынасынан  $\omega \gg 1$  үшін келесі өрнектерді табамыз:

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{e^{-\frac{i\pi}{4}}}{e^{-\frac{i\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} e^{\frac{i\pi}{4}}} = e^{-\tilde{w}(a,b)}; \\
 \frac{R}{T} &= \frac{e^{-\frac{i\pi}{2}} e^{\tilde{w}(a,b)} e^{\frac{i\pi}{4}}}{e^{-\frac{i\pi}{4}}} = -i e^{\tilde{w}(a,b)} \Rightarrow R = -i.
 \end{aligned}$$

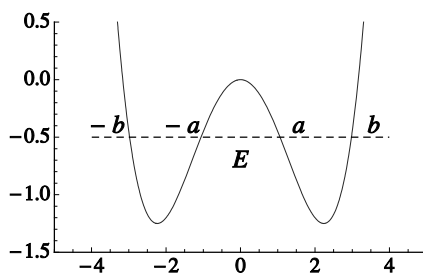
Бұл (11.49) өрнектерімен сәйкес келеді (осы шекте  $\delta(E) = 0$  болатынын ескертеміз). Көрнектілік мақсатында ВКБ формуласымен есептелген және дәл (сандық) нәтижелерінің салыстырмасы 11.9-суретінде көрсетілген (осы тараудағы NB-11.5 қараңыз)



**11.9-сурет.**  $V_0 e^{-x^2/\Delta^2}$  потенциалы үшін  $|T|$  және  $\delta(E)$ -дың энергияға тәуелділігі. Үздіксіз қисығы ВКБ жуықтауындағы нәтиже, ал нүктелер – дәл (сандық) нәтижелер

### 11.3.1 Қос шұңқыр

Кванттық механиканың қарапайым қолдануларының ең қызықты мысалдарының бірі болып терең қос потенциалдық шұңқырдағы энергияның деңгейлерін (11.10-суретін қараңыз) зерделеу болып табылады. Мұның қызықты болуының себебі, жартылай классикалық жуықтауында симметрияның классикалық және кванттық механикадағы түрлі қасиеттерімен ерекшелене алатындығын нақты көрсетуге мүмкіндік береді. Осы қарастырылып отырған жағдай үшін мәселе  $x \rightarrow -x$  шағылуындағы симметрияда (бірөлшемді жұптылықтың түрі) болып тұр. Классикалық бөлшек бірөлшемді потенциалдың минимумдарының бірінде қозғалады, ал жүйенің симметриясы жұптылықтың әсерінен, былайша айтқанда, фактілік шешімін бұзады. Оң жақтағы шұңқырдағы тербелетін бөлшектің сол шұңқырда табылуының ықтималдылығы нөлге тең, және керісінше.



11.10-сурет. «Қос шұңқыр» потенциалы. Бұрылыс нүктелерінің екі жұбы  $x=\pm a$  және  $x=\pm b$

Ал кванттық механикалық жағдай сапалық түрде өзгеше. Біздің 2-, 3-тарауларынан білетініміз:

- (i) Жүйенің тек дискреттік спектрі болады: энергияның барлық өзіндік күйлері байланысқан күйлеріне сәйкес келеді;
- (ii) Бірөлшемді дискреттік деңгейлері үшін (3.4) «сетінемеу теоремасының» салдарынан, байланысқан күйлердің әрбірі сетінемеген;
- (iii) Энергияның әрбір сетінемеген  $\psi$  өзіндік күйі гамильтониан симметриясының өзіндік күйі болуы қажет:

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x),$$

яғни жұптылықтың өзіндік күйі: не тақ, не жұп болады;

- (iv) (3.5) осцилляция теоремасына сәйкес жұптылықтың өзіндік күйлері энергияның артуымен кезектесулері қажет: негізгі күйдің жұптылығы – жұп (түйінсіз), ал бірінші қозған күйдің жұптылығы – тақ, екінші қозған күйдің жұптылығы – жұп, т.с.с.

Екінші жағынан, орталық тосқауылмен салыстырғанда энергиясы артық терең қос шұңқыр үшін төменгі деңгейлердегі физикалық жағдай екі шұңқырдың бірінде қозғалатын бөлшекке жақын болуы қажет. Расында, жоғарыда сипатталған классикалық жағдай  $\hbar \rightarrow 0$  шегінде қалпына келтірілуі тиіс.

Осы екі айқын түріндегі қарама-қарсы талаптарды қалай үйлестіруге болады? Негізгі эффект болып екі шұңқырдың арасындағы туннельдену табылады. Оң және сол шұңқырларда жинақталған екі локальданған  $\phi_+$  және  $\phi_-$  толқындық функцияларына сәйкес келетін негізгі мен бірінші қозған күйлерін қарастырайық. Орталық тосқауылдың биіктігі шексіздікке ұмтылған жағдайда,  $\phi_+$  және  $\phi_-$  функциялары оң немесе сол шұңқырлардың біріндегі негізгі күйді сипаттайтын болсын. Егер одан жоғары деңгейлерін ескермейтін болсақ, онда жүйені сапалық түрде мынадай

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -\epsilon \\ -\epsilon & E_0 \end{pmatrix}$$

эффективті гамильтонианмен сипатталатын екі деңгейлі жүйе ретінде сипаттауға болады, оған қоса  $\phi_+$ ,  $\phi_-$  базисінде жазылады. Ал  $\epsilon \propto e^{-\tilde{w}}$  – екі шұңқырдың арасындағы туннельдену амплитудасы. Мұндай гамильтонианды диагональдық түрге келтіру ақиқат негізгі күйі мен бірінші қозған күйін бірден береді:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_+ + \phi_-), \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_+ - \phi_-),$$

ал осы нәтиже жоғарыда айтылған жалпы кванттық механикалық нәтижелермен үйлеседі. Энергиялар айырымын  $\Delta E = E_2 - E_1 \propto \epsilon$  табуға болады. Егер бөлшек  $t=0$  уақыт моментінде оң шұңқырда болса, онда

$$\varphi_+(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(0)e^{-E_1 t/\hbar} + \psi_2(0)e^{-E_2 t/\hbar}), \quad (11.52)$$

мұннан

$$\left| \langle \varphi_- | \varphi_+(t) \rangle \right|^2 = \sin^2 \frac{\Delta E t}{2\hbar}.$$

Демек,  $T \sim \pi\hbar / \Delta E$  уақыт аралығында бөлшек тосқауылдың арғы жағындағы басқа шұңқырдан табылады. Осы қарапайым есептеу бөлшектің  $t \ll T$  қысқа уақыт аралығында локальданатындығын көрсетеді, ал одан көбірек уақыт аралықтарында туннельдік эффектін ескермеуге болмайды. Ал  $\epsilon \propto e^{-S/\hbar}$ , мұндағы  $S$  – тыйым салынған облыстағы «классикалық әсер», егер  $S \gg \hbar$  болса, онда шұңқырдың бірінде бөлшек ұзақ уақыт локальданатын болады. Алайда стационарлық күй үшін сол уақыт моментін шексіз ұзақ деп есептеуге болады, демек, бөлшек мүлде локальданбаған болып шығады да, біз симметриялы (немесе антисимметриялы) толқындық функцияларын табамыз.

Енді сандық түрде бағалайық. Симметриялық  $U(-x) = U(x)$  потенциалын қарастырайық және екі сәтінген дерлік күйлеріне сәйкес келетін  $\psi_1, \psi_2$  екі өзіндік күйлері болсын:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1 + U(x) \psi_1 &= E_1 \psi_1, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_2 + U(x) \psi_2 &= E_2 \psi_2, \end{aligned}$$

Онда

$$E_{1,2} = E_0 \pm \frac{\Delta E}{2}, \quad \Delta E = E_2 - E_1 = \frac{\hbar\omega}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^a df |p(x)|}, \quad (11.53)$$

мұндағы  $\omega = \frac{2\pi}{T}$  классикалық (бұрыштық) жиілік, ал  $T = m \int_{-a}^a dx / |p(x)|$

бізге таныс.

(11.53) теңдеуін табудың бірнеше жолдары бар. Мұнда біз байланыс формулаларын қолданып, қарапайым әдісін көрсетейік. Алдымен

$$w(x_1, x_2) = \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} |p(x)| dx$$

теңдігін жазайық.  $x > b$  үшін классикалық толқындық функциясы экспоненциалдық кемитін болуы қажет:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)}.$$

Біз байланыс формулаларын тізбектей қолданып, әрбір рет нақтылы қарастырып отырған өтулер үшін сәйкесінше бұрылыс нүктелерін өзгертуге тырысамыз. Сондағы мақсатымыз:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)} &\rightarrow \frac{2}{\sqrt{|p|}} \sin\left(w(x,b) + \frac{\pi}{4}\right) = \frac{2}{\sqrt{|p|}} \sin\left(w(a,b) - w(a,x) + \frac{\pi}{4}\right) = \\ &\frac{2}{\sqrt{|p|}} \left\{ \sin(w(a,b)) \cos\left(w(a,x) - \frac{\pi}{4}\right) - \cos(w(a,b)) \sin\left(w(a,x) - \frac{\pi}{4}\right) \right\} = \\ &\frac{2}{\sqrt{|p|}} \left\{ \sin(w(a,b)) \cos\left(w(a,x) - \frac{\pi}{4}\right) + \cos(w(a,b)) \cos\left(w(a,x) + \frac{\pi}{4}\right) \right\} \rightarrow \\ &\frac{1}{\sqrt{|p|}} \left\{ \sin(w(a,b)) e^{-w(x,a)} + 2 \cos(w(a,b)) e^{w(x,a)} \right\} = \quad (11.54) \\ &\frac{1}{\sqrt{|p|}} \left\{ \sin(w(a,b)) e^{-w(0,a)+w(0,x)} + 2 \cos(w(a,b)) e^{w(0,a)-w(0,x)} \right\} \end{aligned}$$

теңдеулерін алу керек.

Негізгі күй мен бірінші қозған күй үшін функция сәйкесінше не жұп, не тақ болуы қажет: екі жағдайда  $\text{ch}(w(0,x))$  және  $\text{sh}(w(0,x))$  функциялары оларды кемітуі қажет. Сондықтан негізгі күй үшін біз келесі қатынасты аламыз:

$$\frac{\cos(w(a,b))}{\sin(w(a,b))} \equiv \frac{1}{2} K,$$

мұндағы

$$K \equiv e^{-2w(0,a)} = e^{-w(-a,a)}$$

– ВКБ жуықтауындағы туннельденудің амплитудасы.  $K \rightarrow 0$  үшін (туннельденудің жылдамдығы төмен)  $w(a,b)$  шамасы  $n/2$ -ге ұмтылады. Онда,  $w(a,b) = \pi/2 - \mu$  деп қабылдап, табамыз:

$$\sin \mu \approx \mu = \frac{1}{2} K.$$

Сондықтан бізде

$$w(a,b) = \frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(E-U)} dx = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} K$$

кванттау шарты бар.

Ал  $K=0$  болғанда  $E_0$  үшін жартылай классикалық жуықтаудың

теңдігі бар;  $K \neq 0$  үшін  $E = E_0 + \delta E$  деп қабылдап және кіші мәндеріне жіктеп, табамыз:

$$\frac{1}{2} 2m\delta E \frac{1}{\hbar} \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2m(E-U)}} dx = \delta E \frac{T}{2\hbar} = -\frac{1}{2} K,$$

мұндағы  $T$  – шұңқырлардың біріндегі тербелістің классикалық периоды. Осылайша

$$\delta E = -\frac{\hbar\omega}{2\pi} K; \quad E_1 = E_0 - \frac{\hbar\omega}{2\pi} K$$

болатынын көреміз және аналогиялы

$$E_2 = E_0 + \frac{\hbar\omega}{2\pi} K,$$

бұл  $\Delta E = E_2 - E_1$ <sup>6</sup> үшін (11.53) нәтижесін береді.

### Экспонента алдындағы көбейткіш жөнінде ескерту

Экспонента алдындағы  $K$  көбейткішін дәлірек бағалау үшін (11.14) теңдеуін екі рет қолданғаннан гөрі, (11.16) теңдеуі сияқты күрделі байланыс формуласын пайдалану қажет. Сол және оң тыйым салынған облыстарды байланыстыратын екі формула:

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)} \leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left\{ \sin(w(a,b)) e^{-w(x,a)} + 2 \cos(w(a,b)) e^{w(x,a)} \right\},$$

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-w(b,x)} \leftrightarrow \left\{ \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{e}{J} \right)^J \Gamma \left( \tilde{J} + \frac{1}{2} \right) \cos(\pi \tilde{J}) e^{w(x,a)} + \sin(\pi \tilde{J}) e^{-w(x,a)} \right\},$$

мұндағы екіншісі екі бұрылыс нүктесінің облысындағы параболалық жуықтаудың көмегімен алынған формула. Терең шұңқырда өте қозған күйлері бар, олар үшін  $J \rightarrow \infty$ . Онда (11.18) шегін алып, (11.53) теңдеуін қайта қалпына келтіреміз. Ең төменгі күйлер үшін және  $K$ -ның кіші мәндері үшін  $w(a,b) = \pi \tilde{J} = \pi / 2 - \mu$ . Сондықтан  $\mu$  бойынша бірінші ретінде біз

<sup>6</sup> Басқа әдісті [Landau and Lifshitz (1976b)] кітабының §50 табуға болады. Шындығында,  $U(x)$ -ке тәуелді болатын  $\Delta E$  –дегі экспонентаның алдындағы көбейткіштің дәлірек анықтамасы мұқият қарастыруды талап етеді. Осы есептің жете қарастыруын Коулман лекцияларынан табуға болады [Coleman (1979)]; төмендегі ескертуді де қараңыз.

$$\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{e}{\tilde{J}}\right)^{\tilde{J}} \Gamma\left(\tilde{J} + \frac{1}{2}\right) \cos(\pi\tilde{J}) \rightarrow 2\sqrt{\frac{e}{\pi}} \sin \mu$$

қолдана аламыз, демек

$$\Delta E = \sqrt{\frac{e}{\pi}} \frac{\hbar\omega}{\pi} \text{К}$$

теңдігіне өкеледі. Ал  $\sqrt{\pi/e} \sim 1.075$  болғандықтан, нәтижесінде, түзету шамамен 7% жетеді.

### 11.3.2 Ыдырау үдерістерінің жартылай классикалық өңделуі

Физикадағы көптеген қызықты жүйелер тек жуықталған түрде орнықты: олар метаорнықты. Ол жүйелердің тәртібі белгілі уақытқа дейін орнықты жүйе тәрізді болғанымен, уақыттың бір моментінде әртүрлі күйлерге бөлінеді. Осындай үдерістердің мысалы ретінде атомдардың қозған күйлерінің, орнықсыз ядролардың немесе бөлшектердің соңғы өнімдерінің негізгі күйлеріне ыдырауларын атауға болады. Қозған атом бір немесе бірнеше фотондарды шығарып кем энергиялы атомға ыдырауы мүмкін; ядролар әртүрлі ұрпақтық ядроларға бөліне отырып,  $\alpha$ -бөлшектерді (гелийдің ядросы), бета-ыдырауына (электрондар), гамма-сәулелерін және нейтриноларды шығара алады.

Осы мәселелердің кейбірін ұйтқу теориясының тұрғысынан қарастырғанбыз (*9-тарауды қараңыз*), одан басқа *13-тарауда* зерттейтін боламыз. Мұнда оларды жартылай классикалық көзқараспен талқылаймыз. Біз *9-тарауда* көргеніміздей, егер жүйе уақыт моментінде  $|i\rangle$  метаорнықты күйінде болса,  $t$  уақыт аралығынан соң тура сол күйде табылуының ықтималдылығы мынадай өрнекпен анықталады:

$$P_i(t) = e^{-\gamma t}, \quad (11.56)$$

мұндағы  $\tau = 1/\gamma$  шамасын *орташа өмір сүру уақыты* деп атайды. Жиі  $\Gamma = \hbar\gamma \equiv \hbar/\tau$  белгілеуі кездеседі:  $\Gamma$ -ның өлшемі энергия және ол *деңгейдің ені* деген атымен танымал.

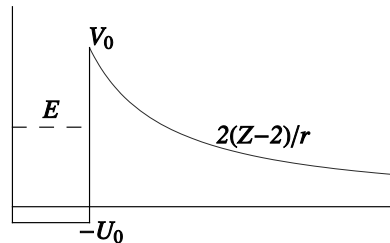
Біздің жартылай классикалық формулалардың қолдануының мысалы ретінде ядролардың бөлінуін қарастырайық. Әдетте,  $\alpha$ -бөлшегі – екі протоннан және екі нейтроннан құралатын гелий атомының ядросы:

$$m(\alpha)c^2 - 2(m_p + m_n)c^2 \approx -26.06 \text{ МэВ.}$$

Массалардың атомдық бірліктерінде  $u \approx 931.494 \text{ МэВ} / c^2$ :

$$m_p = 1.007276470u; \quad m_n = 1.008664904u; \quad m(\alpha) \approx 4.00390.$$

Ядро моделінің дәрекілеу жуықтауында  $\alpha$ -бөлшегін нуклондардың (протондар мен нейтрондардың) орташа өрісіндегі қозғалысы ретінде қарастыруымызға болады. Соңғысы тереңдігі  $-U_0$  және ені  $r_0$  болатын сфералық симметриялық тікбұрышты потенциалына жуықталуы мүмкін.  $\alpha$ -бөлшегі мен заряды  $Z-2$  болатын ядроның қалған бөлігінің арасында ядролық күштерден басқа кулондық тебілу күштері бар. Жағдайдың жалпы мәселелері 11.11-суретінде көрсетілген.



11.11-сурет.  $\alpha$ -бөлшек үшін сфералық шұңқыр мен кулондық тебілу потенциалының сызбалық түрі

Суреттен ядродағы  $\alpha$ -бөлшегі  $E > 0$  кулондық энергиясының арқасында байланысатынын көреміз. Алайда осы күйлер тек метаорнықты болады:  $\alpha$ -бөлшегі кулондық тосқауылдан туннельденуі мүмкін, содан ядро бөлінеді. Бөлінудің жылдамдығын жартылай классикалық жуықтаудың көмегімен төмендегідей бағалауға болады. Егер  $P$  тосқауыл арқылы туннельденудің ықтималдылығы болса, онда уақыт бірлігіндегі ыдыраудың ықтималдылығы мынадай болады:

$$\gamma = N \times P,$$

мұндағы  $N$  – бір секундтағы  $\alpha$ -бөлшектерінің тосқауылға түсуінің саны. Стационарлық күйді классикалық түрде периоды  $T$  болатын қозғалыс ретінде қарастыруымызға болады: бөлшек қорап қабырғаларының біріне  $1/T$  жиілігімен соқтығысады, демек,

$$\Gamma = \hbar \gamma = \frac{\hbar}{T} P. \quad (11.58)$$

Осыны қаталырақ, бірақ  $N = 1/T$  шамасына эквиваленттілігін көрсетейік. Ол үшін  $S$  толқынының (қиылған) радиалдық функциясын  $\chi = A \sin(kr)$  қарастырайық. Нормалау шартын пайдаланып,  $A$ -ны анықтайық:

$$1 = \int_0^{r_0} A^2 \sin^2(kr) \sim \frac{A^2}{2} r_0 \Rightarrow A^2 = \frac{2}{r_0}$$

Толық функцияның

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{A}{r} \sin(kr) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{A}{2ir} [e^{ikr} - e^{-ikr}]. \tag{11.59}$$

болатынын көреміз. Осы шешім сфералық толқындардың пашыраңқылығы мен жинақтылығын сипаттайды. Токтың тығыздығы:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*].$$

(11.59) теңдеуіндегі кеңейетін толқынды қолданып, радиусы  $r_0$  болатын бет арқылы ағынның мөлшері

$$j_r = \frac{\hbar}{m} k \frac{1}{4\pi} \frac{A^2}{4r^2}, \quad \Phi = 4\pi r^2 j_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{A^2}{4} = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{2r_0} = \frac{v}{2r_0},$$

болатынын көреміз, мұндағы  $\hbar k/m = v$  – бөлшектің жылдамдығы. Ақырында  $v/2r_0 = 1/T$  теңдігін аламыз.

Z(A)	T <sub>1/2</sub>	E(МэВ)	Z(A)	T <sub>1/2</sub>	E(МэВ)
Po(212)	3.0×10 <sup>-7</sup> сек	8.95	Th(219)	0.11×10 <sup>-6</sup> сек	9.34
Po(214)	1.5×10 <sup>-4</sup> сек	7.83	Th(220)	10.×10 <sup>-6</sup> сек	8.79
Po(215)	1.8×10 <sup>-3</sup> сек	7.50	Th(221)	2.8×10 <sup>-3</sup> сек	7.98
Po(216)	0.158 сек	6.89	Th(224)	1.05 сек	7.085
Th(212)	0.03 сек	7.92	Th(225)	8.72 м	6.47
Th(213)	0.14 сек	7.69	Th(226)	30.6 м	6.28
Th(214)	0.10 сек	7.68	Th(227)	18.72 κ	5.92
Th(215)	1.2 сек	7.46	Th(228)	1.91 жс	5.38
Th(217)	0.25×10 <sup>-3</sup> сек	9.25	Th(229)	7340 жс	4.91
Th(218)	0.11×10 <sup>-6</sup> сек	9.67	Th(230)	77×10 <sup>3</sup> жс	4.65
			Th(232)	14.1×10 <sup>9</sup> жс	3.98

**11-кесте.** α-ыдырауларының мысалдары. Кестеде аналық ядролары, жартылай бөлінудің уақыты (сек = секундтар, м = минуттар, κ = күндер, ж = жылдар) және α-бөлшектердің энергиясы көрсетілген. Кейбір бөлшектер үшін орташа энергиясы берілген

(11.58) теңдеуіндегі  $P$  туннельденуінің мүмкіндігі болып тосқауыл арқылы өтуінің коэффициенттері табылады. Ал  $r_0$  және  $r_1$  бұрылыс нүктелерінде, мұндағы

$$\frac{2(Z-2)e^2}{r_1} = E = \frac{p^2}{2m}, \Rightarrow r_1 = \frac{2(Z-2)e^2}{E}$$

және  $P$  берілген

$$P = \exp[-2\sigma(r_0, r_1)] = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m\left(\frac{2(Z-2)e^2}{r} - E\right)} dr\right].$$

Осы теңдеуді жеңілдету үшін кулондық әсерлесуін қосымша  $C/r$  түрінде жазайық, мұндағы

$$C = 2(Z-2)e^2.$$

Айнымалыны алмастыру әдісіне сәйкес  $r = r_1 x$  деп жазып, оған қоса  $\sqrt{2mCr_1} = 2C/v$  болатынын қолданып, интегралдың

$$I = \sqrt{r_1 2mC} \int_{\frac{r_0}{r_1}}^1 dx \sqrt{\frac{1}{x} - 1} = \frac{2C}{v} \left[ \arccos\left(\sqrt{\frac{r_0}{r_1}}\right) - \sqrt{\frac{r_0}{r_1} \left(1 - \frac{r_0}{r_1}\right)} \right]$$

болатынын көреміз. Көптеген жағдайларда  $r_0/r_1 \ll 1$  болғандықтан, жіктеуді келесі түрде жазайық:

$$I \approx \frac{2C}{v} \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right) = \frac{\pi C}{v} - 2\sqrt{2Cmr_0}.$$

Онда

$$P = \exp\left(-\frac{2\pi C}{\hbar v} + 4\frac{\sqrt{2Cmr_0}}{\hbar}\right)$$

теңдігін аламыз. Енді  $q_1, q_2$  зарядтарын  $e$  бірліктерінде және нәзік құрылымның тұрақтысын  $\alpha = e^2/\hbar c$  белгілеп, тәуелділіктің келесі түрін аламыз:

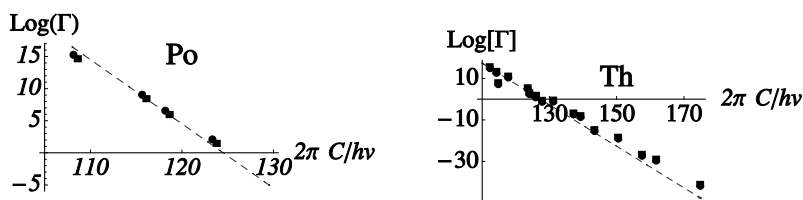
$$P \propto \exp\left[-\frac{2\pi\alpha q_1 q_2}{v/c}\right].$$

Жылдамдыққа күшті (экспоненциалдық) тәуелділігі, демек, ыдыраудың осы түрі үшін  $\alpha$ -бөлшектерінің энергиясынан тәуелділігінің тән қасиеті. Бұдан, энергияның кіші өзгерісі өмір

сүру уақытының елеулі өзгерісіне әкелетіні шығады. Мұндай болжам 11.1-кестесінде келтірілген эксперименттік мағлұматтармен үйлесімде болатынын көреміз.

11.12-суретінде иллюстрация ретінде полоний (Po) мен торийдің (Th) екі жиыны үшін  $\log(\Gamma)$  -ді  $2\pi C / \hbar v$  функциясы ретінде толықтай қанағаттандыратынын көреміз.

Келесі бөлімде (11.58) теңдеуін Гамов-Зигерт теоремасына сәйкес формальдық жуықтауынан аламыз.



11.12-сурет. Полоний және торий үшін  $\log(\Gamma)$  шамасы  $2\pi C / \hbar v$ -дің функциясы ретінде. Пунктирлік сызықтары (11.60) өрнегінен шығатын көлбеулігінен аламыз

### 11.3.3 Гамов - Зигерт теориясы

Егер энергияның  $E - i\Gamma/2$  комплекстік өзіндік мәндеріне сәйкес келетін стационарлық күйлері бар болса, онда (11.56) теңдеуін қанағаттандырар еді. Сол жағдайында ықтималдылық:

$$P(t) = \left| \langle \psi | \psi(t) \rangle \right|^2 = \left| \langle \psi | e^{-iEt/\hbar - \Gamma t/2\hbar} | \psi \rangle \right|^2 = e^{-\Gamma t/\hbar} \quad (11.61)$$

болып анықталып, (11.56) теңдеуін қайта қалпына келтіретіні көреміз.

Өлбетте,  $H$  өзіне түйіндес және оның өзіндік мәндері нақты; екінші жағынан, бізді қызықтыратын күйлер орнықсыз. Математикалық түрде  $H$  операторы функциялар кеңістігінде өзіне түйіндес, ал ол функциялар  $r \rightarrow \infty$  болғанда шектеулі функция; егер біз осы шартты “жұмсартатын” болсақ, формальдық түрде  $H$ -тың өзіндік мәндері комплекстік бола алады. 13-тарауда осындай таңдауымыз нені білдіретінін көреміз, ал қазір Гамов пен Зигерт әдісіне бет бұрайық. Метаорнықты күйі  $\exp(ikr) / r$  түріндегі сфералық толқындық функциясымен өрнектеледі; сондықтан Шредингер теңдеуінің

$$H\psi = E\psi$$

шешімдерін келесі шекаралық шарттарын қанағаттандыратындай етіп іздестіреміз: функция нөлде регулярлық шешімге, ал шексіздікте оның тәртібі  $e^{ikr} / r$  функциясына ұқсас болады.

қарапайым болуы үшін сфералық симметриялық потенциалдың және  $S$ -толқынымен шектелейік. Есепті редукцияланған радиалдық функциясы  $\varphi = r\psi$  үшін қарастырайық:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \varphi + V(r)\varphi = E\varphi; \quad \varphi(0) = 0; \quad \varphi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp(ikr), \quad (11.62)$$

мұндағы  $k = \sqrt{2mE}$ . Жалпы, (11.62) теңдеуі  $E$ -нің нақты мәндері болатындай шешімдеріне рұқсат бермейді. Оның екі тәуелсіз шешімі бар, оларды нақты етіп таңдап алуға болады, себебі  $V(r)$  нақты, оған қоса нөлдегі шекаралық шартына әсер етіп және нақты регулярлық шешімінің фазасын таңдап, асимптотикалық түрін табамыз  $\cos(kr + \delta)$ .

Егер  $E$ -нің мәні  $E = E_0 - i\Gamma/2$  түріндегі комплексті бола алатын жағдайда, онда шешімі болып табылады. Осы жағдайда толқындық функцияның нақты болуының шарты жоқ және (11.62) теңдеуінің шешімі бола алады. Комплекстік өзіндік мәннің қалайша анықталатынын көру үшін  $r=0$  нүктесінен басталатын еркін нормаланған, яғни  $\varphi(0) = 0, \varphi'(0) = 1$  шартын қанағаттандыратын (11.62) теңдеуінің шешімі болады деп пайымдайық. Бұл әрбір  $E$  үшін жалғыз шешімі болып табылатын  $\varphi_L$  Коши есебі. Осы процедураны  $r \rightarrow +\infty$  шекаралық шартынан бастап қайталайық, және оның нормасы да еркін болсын:

$$\varphi - Ae^{ikr} \rightarrow 0; \quad \varphi' - ikAe^{ikr} \rightarrow 0,$$

онда оның шешімі де  $\varphi_R$  болып табылады. Аралық нүктесіндегі екі шешімнің үйлесімділігі төмендегі теңдікпен беріледі:

$$\frac{\varphi'_L}{\varphi_L} = \frac{\varphi'_R}{\varphi_R}.$$

Бұл теңдік нормалануына тәуелсіз  $E$ -нің (комплекстік) мәнін анықтайды.

Жоғарыда сипатталған әдіспен (11.62) теңдеуін сандық түрде шешуге болады. Осылайша анықталған күйлерді *резонанстар* деп атайды. Потенциал  $V(r) = 7.5r^2 e^{-r}$  болғандағы (есептерді қараңыз) резонанс

$$E = 3.4264, \quad \Gamma = 0.0255 \quad (11.63)$$

мәнін қабылдайды.

**ВКБ жуықтауындағы Гамов – Зигерт теориясы**

Енді Гамов-Зигерт есебінің шешімін ВКБ жуықтауының шеңберінде іздестірейік. Ең алдымен (11.62) теңдеуін  $\varphi^*$ -ға көбейтіп, одан оның комплекстік түйіндесін алыптастағаннан соң, табамыз:

$$2i \operatorname{Im}(E) |\varphi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \left( \varphi^* \frac{d}{dr} \varphi - \varphi \frac{d}{dr} \varphi^* \right).$$

Енді 0-ден  $r$ -ге дейін интегралдап, оған қоса  $\varphi(0) = 0$  шекаралық шартын ескеріп, есептеп аламыз:

$$2 \operatorname{Im}(E) \int_0^r |\varphi|^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2mi} \left( \varphi^* \frac{d}{dr} \varphi - \varphi \frac{d}{dr} \varphi^* \right). \quad (11.64)$$

Егер  $r$  үлкен мәндері үшін  $\varphi = |\varphi| \exp(i\theta)$  түрінде жазатын болсақ, онда

$$2 \operatorname{Im}(E) \int_0^r |\varphi|^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2m} 2 \frac{d}{dr} \theta(r)$$

аламыз. Осылайша, артатын фаза  $\operatorname{Im}(E) < 0$  сәйкес келеді де, (11.62) шекаралық шартын тізбектей қанағаттандырады.

Енді  $\varphi = \varphi_1 + i\varphi_2$ ,  $E = E_1 + iE_2$  түрінде жазып, (11.62) өрнегі төмендей қайта жазуға болады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_1'' + V(r)\varphi_1 = E_1\varphi_1 - E_2\varphi_2; \quad (11.65a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_2'' + V(r)\varphi_2 = E_2\varphi_1 + E_1\varphi_2. \quad (11.65\text{ә})$$

Егер туннельдік эффект болмайтын жағдайында біз  $E_2 = 0$  және  $\varphi_2 = 0$  нәтижелерін алар едік. Толқындық функция координаталар басында жинақталып, классикалық тыйым салынған облыста нөлге ұмтылатын болады. (11.65) теңдеулерін шешу жолындағы идеямыз шамамен төмендегідей:  $E_2 \ll E_1$  үшін сипатталған жалпы жағдай тым көп өзгеріс енгізбейді. Содан соң классикалық тыйым салатын облыста нақты бөлігі кеміп, ал жорамал бөлігі артатындай етіп фазаны таңдай аламыз. Жағдай 11.13-суретінде көрсетілген.  $\varphi_2$  функциясы мәндерінің реті екінші бұрылыс  $r = b$  нүктесінің төңірегінде  $\varphi_1$  функциясымен шамалас болады.

Егер туннельдік эффектін ескермейтін болсақ, онда (11.62) теңдеуінің  $a < r < b$  облысындағы ВКБ шешімінің түрі

$$\frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\tilde{w}(a,r)) \equiv \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\tilde{w}(a,b) + \tilde{w}(r,b)) \quad (11.66)$$

болар еді, мұндағы

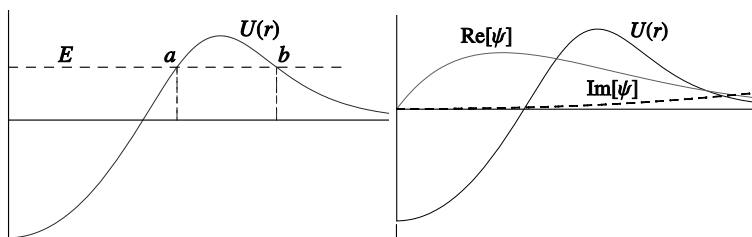
$$\tilde{w}(a,x) = \frac{1}{\hbar} \int_a^x \tilde{p}(x) dx, \quad \tilde{p}(x) = \sqrt{2m(V-E)}$$

бұрынғыдай, классикалық тыйым салынған облыста «әсер» болып қала береді. Әдетте  $C \sim \mathcal{O}(1)$  байланысқан күйінің нормалау шартымен анықталады. Егер жорамал бөлігі кіші мәндерге ие болып, ал  $r$  артқан сайын

$$\varphi = \frac{C}{2\sqrt{|p|}} \exp(-\tilde{w}(a,b) + \tilde{w}(r,b)) + i \frac{D}{\sqrt{|p|}} \exp(-\tilde{w}(r,b)) \quad (11.67)$$

теңдігін аламыз. Одан әрі  $r > b$  облысындағы жалғасын (11.13) жалпы байланыс формуласынан таба аламыз:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ -\frac{C}{2} e^{-\tilde{w}(a,b)} \sin\left(w(b,r) - \frac{\pi}{4}\right) + i2D \cos\left(w(b,r) - \frac{\pi}{4}\right) \right] = \\ = i2D \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[ \cos\left(w(b,r) - \frac{\pi}{4}\right) + i \frac{C}{4D} e^{-\tilde{w}(a,b)} \sin\left(w(b,r) - \frac{\pi}{4}\right) \right]. \end{aligned} \quad (11.68)$$



**11.13-сурет.** Ыдырауды сипаттаудағы жартылай классикалық шешімінің нақты және жорамал бөліктерінің сапалық тәртібі

Фазаның артуына сәйкес келетін  $\exp(+i w(b,r))$  шешімінің талабынан келесі шартты аламыз:

$$4D = C \exp(-\tilde{w}(a,b)), \quad (11.69)$$

ал  $r \geq b$  үшін (11.68) шешімі төмендегідей болады:

$$\varphi = i \frac{C}{2\sqrt{|p|}} e^{-\tilde{w}(a,b)} e^{i\left(w(b,r) - \frac{\pi}{4}\right)}.$$

(11.64) теңдеуін  $r \geq b$  жағдайы үшін қолданып, оған қоса  $w' = p / \hbar$  екендігін есте сақтап, аламыз:

$$2 \operatorname{Im}(E) \int_0^r |\varphi|^2 dr = -\frac{\hbar^2}{2mi} \frac{C^2}{4p} e^{-2\tilde{w}(a,b)} 2i w' = -\frac{\hbar}{4m} C^2 e^{-2\tilde{w}(a,b)}. \quad (11.70)$$

Экспоненциалдық байланысқан мүшелерінен басқа  $\varphi$  функциясы  $r < b$  классикалық рұқсат етілген облыста жинақталған; демек, бірінші мүшесіндегі интегралдың шегін шексізге дейін кеңейтуге болады, алайда  $\varphi$  -дің өтуші бөлігінсіз жартылай классикалық өрнегін сақтаймыз. Сондықтан интегралдау функцияның нормалануын береді. Бізде әлі де  $C$ -ны анықтау мәселесі шешілмеген: оны  $r < b$  облысында шұңқыр есебіне әкелу жолымен реттеуге болады. Осы облыста  $\varphi$  -дің жорамал бөлігі мардымсыз болғандықтан, толқындық функцияның пішіні (11.66) түріне келтіріледі. Ал толқындық функцияның  $r < b$  ішкі облысындағы қосылуы бізге белгілі:

$$r < a: \quad \varphi \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(w(r,a) - \frac{\pi}{4}\right).$$

Осыған қоса, біз мұндай толқындық функция энергияның жартылай классикалық деңгейлеріне әкелетінін білеміз ((11.30) теңдеуін еске саламыз):

$$J = \frac{1}{2\pi} \oint p(r) dr = \hbar \left( n + \frac{3}{4} \right); \quad n = 0, 1, \dots,$$

бұдан энергияның деңгейлері нақты бөлігін беретінін аламыз. Енді  $\varphi$  толқындық функциясын потенциалдық шұңқырдың ішінде нормалап, 11.2-бөліміндегідей етіп табамыз:

$$1 = \int_0^a \frac{C^2}{p} \cos^2(w) dx \approx \frac{C^2}{2} \int_0^a \frac{dx}{p} = \frac{C^2}{4m} T \Rightarrow C^2 = \frac{4m}{T},$$

мұндағы  $T$  – қозғалыстың классикалық периоды. (11.70) теңдеуінен

$$\boxed{2 \operatorname{Im}(E) = -\Gamma = -\frac{\hbar}{T} \exp(-2\tilde{w}(a,b))} \quad (11.71)$$

теңдігі шығады. Осы формула алдыңғы жете қорытып шығару кезіндегі нәтижемен бірдей.

### 11.4 Фазалық ығысу

Одан әрі жартылай классикалық жуықтауында резонанстардың (метаорнықты күйлер) шашырау үдерістеріндегі әсер етуін қарастырамыз. Ал осы үдерістердің жалпы талқылауы 16-тарауда берілген.

#### Жалпы ескертулер

Нақтылық үшін бөлшектің  $V(r)$  сфералық симметриялық потенциалдындағы қозғалысын қарастырайық, мұндағы  $r \rightarrow \infty$  шегінде  $V(r) \rightarrow 0$  потенциал нөлге ұмтылады.  $E \geq 0$  болғанда,  $H$  операторының спектрі үздіксіз болады (бұрыс өзіндік мәндері) және  $E < 0$  болғанда байланысқан күйлер болуы мүмкін. Соңғы жағдайда өзіндік мәндері мен өзіндік функциялары Шредингердің радиалдық теңдеуінен анықталады:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[ V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m r^2} \right] \chi(r) = E \chi(r). \quad (11.72)$$

Осы теңдеу екінші ретті дифференциалдық теңдеуі болғандықтан, оның екі тәуелсіз шешімі бар. Координаттар басындағы шешімнің  $\chi(0) = 0$  регулярлық болуының шарты олардың регулярлық шешімінің комбинациясын орнатады, бірақ нормалануды емес. Егер  $V(r)$  потенциалы шексіздікте  $1/r^2$ -тан жылдамырақ артатын болса (біз осы пайымдау орындалады деп қабылдайық), онда  $r$ -дің үлкен мәндерінде теңдіктің түрі еркін бөлшек үшін тәрізді болады: регулярлық шешімнің тәртібі екі осындай шешімнің сызықтық комбинациясынан құралады. Жеңіл болу мақсатында  $S$  толқыны үшін шешімнің асимптотикалық түрін жазайық:

$$\chi(r) = A(E) \exp\left(-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r\right) + B(E) \exp\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} r\right). \quad (11.73)$$

Бұл шешім жалпы нормаланбайды;  $B(E)$  коэффициенттерінің нөлдерінде  $E_0 < 0$  болғанда нормаланатын шешімі болады. Бұл, әрине, әдеттегі талапқа сай келеді, яғни толқындық функцияның  $\chi \in L^2$  шартын қанағаттандыруы, оның асимптотикадағы шекті болуын қамтамасыз етеді.

Енді  $E > 0$  үздіксіз спектрін қарастырайық. (11.72) дифференциалдық теңдеуі  $E$  үшін аналитикалық шешіледі, демек, дифференциалдық теңдеудің жалпы шешімі де аналитикалық болуы тиіс. Дербес жағдайда,  $E$  бірмәнді болса, онда комплексті айнымалы ретінде қарастырамыз.  $\sqrt{-E}$  функциясының нақты оң осьтің

бойында қиығы болады: сондықтан  $E > 0$  үшін  $A(E), B(E)$  коэффициенттерінің де қиығы болуы тиіс, яғни  $\chi$ -тің аналитикалық шешімі бар. Ал  $\sqrt{-E}$  функциясының Риман беті  $E > 0$  қиығының бойымен тігілген екі беттік комплексті жазықтықтары.  $\chi$ <sup>7</sup> функциясының аналитикалық тәртібі  $A$  және  $B$  функцияларының сол Риман бетінде табылуын қамтамасыз етеді. Бірінші бетті осы тұрғыдан *физикалық бет* деп атайтын боламыз.  $E < 0$  жағдайында  $E \in \mathbb{R}$  үшін біз әрқашан нақты шешімін таңдай аламыз: бұл  $E < 0$  үшін  $A(E), B(E)$  функцияларының нақты болатынын білдіреді. Ал  $A, B$  функцияларының комплекстік жазықтағы жалғасын Шварцтың шағылу принципін қолданып орындай аламыз:

$$A(E^*) = A^*(E) \quad B(E^*) = B^*(E).$$

Егер екеуінің бірі  $E$ -нің нақты теріс  $E = -|E|$  мәнінен шығатын және сағат тілінің бойымен жартылай шеңбердің бойымен қозғалатын болса, онда өзгесі жоғарғы шегіне  $E = |E|$  жетеді. Ал

$$\sqrt{-E} = \sqrt{|E|} \rightarrow \sqrt{e^{-i\pi} |E|} = -i\sqrt{|E|} \equiv -ik; \quad k^2 = 2mE; \quad (E > 0 \text{ үшін})$$

болғандықтан, функция қиындының жоғары жағындағы мәнін қабылдайды:

$$\chi = A(E + i\varepsilon)e^{ikr} + B(E + i\varepsilon)e^{-ikr}. \quad (11.74a)$$

Кері жағдайда, қиындының төменгі жағына сағат тіліне қарсы бағытта жеткенінде

$$\chi = A(E - i\varepsilon)e^{-ikr} + B(E - i\varepsilon)e^{ikr} \quad (11.74b)$$

аламыз. Сондықтан толқындық функцияның бірмәнділігін қамтамасыз ету мақсатында  $A$  және  $B$  қиындыда төмендегідей болулары қажет:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} A(E + i\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} B(E - i\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} B^*(E + i\varepsilon), \quad (11.75)$$

<sup>7</sup> Мәселені толыққанды түсіну үшін, атап өтелік: (11.73) асимптотикасы барлық физикалық бетте нақты болады, егер  $V(r)\exp(\sqrt{-2mEr}/\hbar)$  кіші болса, яғни осы шартты ескермеуге болатын жағдайларда. Демек,  $V$  шекті болуы қажет. Ал егер  $V$  экспоненталық түрде кемитін болса, онда асимптотикасы нақты осьте жататын жолаққа сәйкес келеді. Мұның өзі біздің мақсатымыз үшін жеткілікті.

бұдан  $A(E)$  комплексті функция және оның жорамал бөлігі  $B$  байланысқан болатындығы шығады, өз кезегінде функцияның координаталар басындағы регулярлық болуынан анықталады.

$E > 0$  үшін асимптотикалық тәртібі

$$\chi(r) = C \sin(kr + \delta)$$

болады.  $C$  тұрақтысы толқындық функцияның нормалануына тәуелді; ал  $\delta$  фазасы  $r = 0$  нүктесіндегі регулярлық дербес шешімнің біреуін таңдауынан соң бекітілген болады. Синус функциясын (11.74a) теңдеуінде қайта жазатын болсақ, онда

$$-\frac{A}{B} = \exp(2i\delta) \quad (11.76)$$

болатынын көреміз. Расында, (11.76) теңдеуі  $\delta$ -ның толқындық функцияның нормалануына тәуелсіз екендігін және (11.75) теңдеуіне сәйкес келетінін дәлелдейді. Бұдан нақты осьте  $|A| = |B|$  болатыны шығады. Ал  $\delta$ -ны *фазалық ығысу* немесе *шашырау фазасы* деп атайды. Мұны еркін бөлшек үшін шешімімен салыстырып, шындығында еркін жағдайына қатысты  $\delta$  асимптотикалық толқындық функция фазасының ығысуын сипаттайтынына көз жеткіземіз. Біз серпімді шашырауға арналған тарауда (16-тарау)  $\sin \delta$  шамасы шашыраудың қимасымен, яғни бақыланыатын шамамен тікелей байланыста болатынын көреміз.

Осыған дейін талқылау жалпы жағдайда жүргізілді, енді қандай да резонанстар (метаорнықты, квазибайланысқан күйлер) қатысатын жағдайлар үшін қорытындылап көрейік. Гамов-Зигерт теориясы резонанстық күйін таза кеңейетін сфералық толқынымен байланыстырады, ал оның өзі  $E_0 - i\Gamma/2$  комплексті өзіндік күйіне сәйкес келеді. Олай болса, (11.74a) теңдеуінен өзіндік мәнінің  $B(E)$  функциясының нөліне сәйкес келеді, дәлірек айтқанда екінші римандық бетінің нөліне:

$$B\left(E_0 - i\frac{\Gamma}{2}\right) = 0.$$

Екінші беттегі нөлдің пайда болуы бірінші бетте  $\text{Im } E < 0$  болуымен байланысты,  $B$  толқындық функциясының бірінші беттегі бөлігінің тәртібі шағылу принципіне сәйкес  $B^* e^{+ikr}$  тәртібі тәрізді болады, яғни кеңейетін сфералық функциясы сияқты (осы функцияның қатысуы міндетті). Мұның орнына Гамов-Зигерт теориясы сфералық функцияның жинаңқы бөлігінің резонанста нөлге айналуын талап етеді. Ендеше екінші облыстың  $\text{Im } E < 0$  аймағы бірінші беттегі оң

нақты ось қиығының жоғары шетіне тікелей жақын орналасқанын еске салайық.

Енді резонанстық күйі бар және  $\Gamma \ll E$  деп пайымдайық. В функциясының нөлін  $V = b \left( E - \left( E_0 - i \frac{\Gamma}{2} \right) \right)$ , түрінде жазуға болатынын білдіреді, мұндағы  $b$  – резонанс төңірегінде нөлге тең емес. (11.75) теңдеуіндегі толқындық функцияның бірмәнділігі

$$\chi(r) = b^* \left[ E - \left( E_0 + i \frac{\Gamma}{2} \right) \right] e^{ikr} + b \left[ E - \left( E_0 - i \frac{\Gamma}{2} \right) \right] e^{-ikr}$$

шартын орнатады. Ал  $E - E_0 \gg \Gamma$  резонанстан қашықта  $E$  үшін (11.76) теңдеуінен келесі теңдікті аламыз:

$$e^{2i\delta^0(E)} = -\frac{b^*}{b}. \quad (11.77)$$

Бұл  $E$ -де «регулярлық» функциясы болып табылады.

Резонанстың төңірегінде фазалық ығысу шұғыл өзгереді. Ал (11.76) және (11.77) теңдеулерінен

$$e^{2i\delta} = e^{2i(\delta^0 + \delta_R)} = -\frac{b^*}{b} \frac{E - \left( E_0 + i \frac{\Gamma}{2} \right)}{E - \left( E_0 - i \frac{\Gamma}{2} \right)} = -\frac{b^*}{b} \frac{1 + i \frac{\Gamma}{2(E_0 - E)}}{1 - i \frac{\Gamma}{2(E_0 - E)}}$$

теңдігін аламыз. Бірдейлікті пайдаланып

$$e^{2i \arctg \alpha} = \frac{e^{i \arctg \alpha}}{e^{-i \arctg \alpha}} = \frac{1 + i\alpha}{1 - i\alpha},$$

келесі теңдікті аламыз:

$$\boxed{\delta = \delta^0 + \arctg \frac{\Gamma}{2(E_0 - E)}}. \quad (11.78)$$

Демек, энергияның артуы резонанс энергиясынан өткенде  $\delta$  фазалық ығысуы  $\pi$ -ге артуына ұшырайды, ал  $\Gamma \ll E_0$  болса, онда  $\delta$ -ның өзгерісі еніз (тар) облыста болады. Егер  $\delta(E)$ -ның туындысын қарастыратын болсақ, онда жағдай одан сайын айқынырақ болады: резонанстың төңірегінде

$$\delta'(E) = \delta^{(0)'} + \frac{\Gamma/2}{\frac{\Gamma^4}{4} + (E - E_0)^2}. \quad (11.79)$$

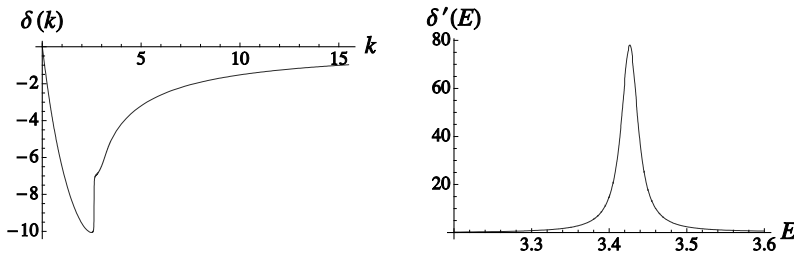
Мысал ретінде

$$V(r) = V_0 r^2 e^{-r}; V_0 = 7.5 \text{ (атомдық бірліктерде)} \quad (11.80)$$

потенциалы үшін  $\delta(E)$  -нің сандық есептеу нәтижесі 11.14-суретте келтірдік.  $k \sim 2.5$  нүктесінің төңірегіндегі фаза ығысуының өзгерісін айқын көреміз. Екінші суретте  $\delta'(E)$  туындысы салынған, одан ((11.79) теңдеуінің көмегімен) келесі параметрлерді алуға болады:

$$E_0 = 3.4266; \quad \Gamma = 0.026.$$

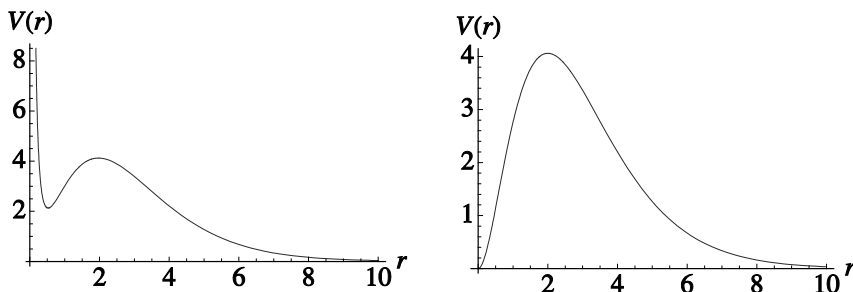
Бұл нәтижелер алдыңғы (11.63) теңдігімен анықталатын Гамов-Зигерт әдісімен есептеп табылған мәндерімен жақсы үйлесімділікте.



**11.14-сурет.** (11.80) потенциалы үшін шашыраудың фазалық ығысуы  $k$ -ның функциясы ретінде. Екінші суретте резонанстың төңірегінде  $\delta'(E)$  энергия бойынша туындысы көрсетілген

### $\delta(E)$ үшін ВКБ жуықтауы

Алдыңғы тұжырымдаманың жартылай классикалық жуықтауда қалайша байқауға болатынын талдау өте пайдалы болар еді. Нақтылық болуы үшін (11.80) теңдеуін  $S$  толқыны үшін қарастырайық. Осыған сәйкес Лэнжердің түзетуін қолдану немесе қолданбау жөнінде екі график аламыз, олар 11.15-суретінде көрсетілген. Бірінші жағдайда  $r = c$  бұрылыс нүктесі болады және ол орталықтан тебу потенциалына сәйкес келеді. Қандай да потенциалда энергия үшін  $r = a, b$  бұрылыс нүктелері болып табылады және ол  $V$ -ның локальдық минимумы және энергияның локальдық максимумы  $\min(V) < E < \max(E) = E_{\max}$  арасында жатады.



11.15-сурет. Лэнжер түзетуімен және түзетуісіз (11.80) потенциалы ( $S$  толқынындағы  $1/8r^2$  потенциалы)

Енді Лэнжер түзетулерін ВКБ жуықтауында қарастырайық. Байланыс формуласын жүйелі қолданудың арқасында (11.14) теңдеуінен

$$E > E_{\text{макс}} : \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(w_{cr} - \frac{\pi}{4}\right); \quad (11.81a)$$

$$E_{\text{мин}} < E < E_{\text{макс}} : \quad (11.81\text{ә})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(w_{cr} - \frac{\pi}{4}\right); \quad c < r < a \\ \frac{1}{\sqrt{|p'|}} \left\{ \sin\left(\frac{\pi}{2} - w\right) e^{\sigma_{ar}} + \cos\left(\frac{\pi}{2} - w\right) e^{-\sigma_{ar}} \right\}; \quad a < r < b \\ \frac{1}{\sqrt{p}} \left\{ 2 \cos(w) e^{\sigma} \cos\left(w_{br} - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{1}{2} \sin(w) e^{-\sigma} \sin\left(w_{cr} - \frac{\pi}{4}\right) \right\}; \quad b < r \end{array} \right.$$

$$E < E_{\text{мин}} : \frac{1}{\sqrt{p}} \cos\left(w_{cr} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (11.81б)$$

Жазылуы ықшамды болуы үшін, әртүрлі бұрылыс нүктелерін индекстері ретінде қолдандық, мысалы:

$$w_{cr} \equiv w(c, r) = \frac{1}{\hbar} \int_c^r p(r) dr; \quad \sigma_{ar} \equiv \tilde{w}(a, r) = \frac{1}{\hbar} \int_a^r |p(r)| dr$$

және т.с.с., одан басқа:

$$w = \frac{1}{\hbar} \int_c^a p(r) dr; \quad \sigma = \frac{1}{\hbar} \int_a^b |p(r)| dr.$$

Жеткілікті биік тосқауыл үшін  $\sigma \gg 1$  болады, ал (11.81) теңдеулерінен толқындық функцияның асимптотикалық фазасы

әрқашанда  $\cos(w - \pi/4)$  көбейткішімен бекітілетінін шығады. Сыртқы  $b$  бұрылыс нүктесін көрсетіп, оған сәйкес келетін еркін бөлшектің фазасын алып тастайық. Онда фазалық ығысуды ( $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ) алатын боламыз:

$$\delta = \int_b^\infty \sqrt{k^2 - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} - \frac{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2}} dr - \int_{b_0}^\infty \sqrt{k^2 - \frac{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2}} dr. \quad (11.82)$$

Біз толық бұрыштық моменті үшін формуласын жаздық. Назар аударыңыздар: еркін бөлшек үшін бұрылыс нүктесі  $b_0 = k / \left(\ell + \frac{1}{2}\right)$ , ал тек жоғары энергияларда шамамен  $b$ -ға тең болады.

Формула тек  $w = \pi \left(n + \frac{1}{2}\right)$  үшін орындалмайды, бұл Бор-Зоммерфельдтің кванттау шартына дәлме-дәл сәйкес келеді. Осы жағдайдың асимптотикалық шегінде фазаны төмендегідей жазуға болады:

$$w(b, r) - \frac{\pi}{4} + \operatorname{arctg} \left( \frac{e^{-2\sigma}}{4} \operatorname{tg}(w) \right),$$

мұнда резонанстан өтуі кезіндегі  $\pi$ -ге секірісі өрнектелген.

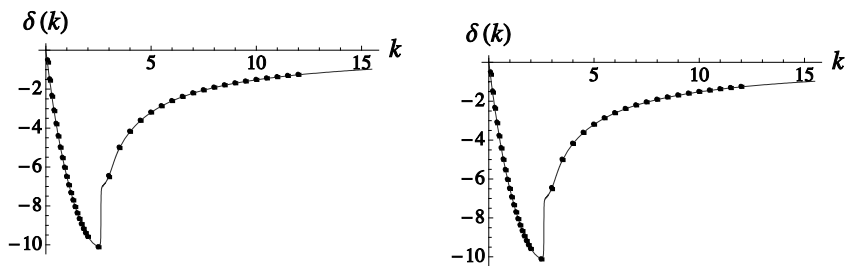
11.16-суретіндегі фазалық ығысуы (11.80) потенциалы үшін жартылай классикалық жуықтауындағы есептеуі көрсетілген, оны (11.82) теңдеуін қолдану арқылы алған болатынбыз. Үйлесімділік Лэнжердің түзетуімен және түзетуінсіз үшін де қанағаттандырарлықтай. (11.81) теңдеуінен жартылай классикалық әдісінде де резонанстың табылуы жөнінде айқын түрінде көреміз. Энергияның барлық мәндері үшін дерлік шұңқырдың сырты мен ішіндегі (бөлшектің шектелген бөлігі) тығыздығының реті төмендегідей:

$$\frac{|\Psi_{\text{сыртқы}}|^2}{|\Psi_{\text{ішкі}}|^2} \sim \cos^2(w) e^{2\sigma} \sim e^{2\sigma},$$

бұл интуитивті түрде бөлшектің тұрақтай алмайтынын (резонанстық емес күйі) білдіреді. Резонанстық энергияда  $\cos(w) = 0$ , енді жоғарыда көрсетілген коэффициентіміз:

$$\frac{|\Psi_{\text{сыртқы}}|^2}{|\Psi_{\text{ішкі}}|^2} \sim e^{-2\sigma}.$$

Бұл потенциалдың ішкі облысындағы шектелген бөлшекке сәйкес келеді.



**11.16-сурет.** (11.80) потенциалы үшін жартылай классикалық фазаның ығысуы (нүктелер) және дәл нәтиже (үздіксіз қисық). Екінші сурет Лэнжер түзетуінсіз стандарттық ВКБ жуықтауынан аламыз

### Тереңдетіп оқу үшін

Осы сұрақ жөнінде көптеген жақсы әдебиеттер баршылық. Сұрақты тереңірек түсінуді бастау үшін [Berry and Mount (1972)] мақаласымен танысқан жөн. Оған қоса Лез-Уштері М.В.Берридің [Berry (1983)] лекцияларын қарауды ұсынамыз. Осы саладағы соңғы жаңалықтарды ғылыми биік дәрежедегі [Gutzwiller (1990)] кітабынан табасыздар.

### Қосымшаларға нұсқаулық

21.5-қосымшада біз еркіндік дәрежесі  $n$ -ге тең жүйелер үшін жартылай классикалық жуықтаудың жалпы жағдайларының қысқаша мазмұндамасын бердік. Біз тек интегралданатын жүйелермен ғана шектелеміз, оларды ЭКБ (Эйнштейн, Келлер, Брюллиэн) кванттауының рәсімі деп атайды. Жалпы жүйелердің, негізінде квази-интегралданатын жүйелердің жартылай классикалық квантталуы бірнеше ескертулерімен толықтырылған. Мәселе классикалық механикамен тығыз байланысты болғандықтан, қажетті принциптер жөнінде қысқаша мағлұматтар келтірілген. Оқырман NB-11.10 файлында интегралданбайтын жүйелердің ЭКБ квантталуының екі мысалын табады, ал NB-11.11 файлында каустикалар мысалдарының бірнешеуі келтірілген. ВКБ жуықтауы жөніндегі кейбір техникалық тетіктері осы тараудың ескертулері мен есептерінің арасында қарастырылған. Қоса берілген компакт-дискіде оқырман ВКБ нәтижелері жөнінде файлды табады, онда бірқалыпты жуықтаудың негізгі элементтері көрсетілген (NB-11.9

қараңыз). Өту коэффициенті ((11.51) қараңыз) үшін фазаны есептеуді 11.14-есебінен табасыздар.

11.9- және 11.11-есептерінде қос шұңқырдағы жіктелген деңгейлердің кіші байланысқан тәртібіне жете жүргізілген талдаулары келтірілген. Ал 11.12-есебінде аналогиялық есеп инверттелген потенциалы үшін шығарылған. Осы есептеулер инстантондар және ұйтқу теориясының жоғары реттерінің тәртібі үшін өзекті (8-тарауды қараңыз).

$\hbar$ -тың жоғары реттері үшін 11.10-есебінде шығарылған.

## Есептер

- (11.1) Коши теоремасын қолданып, екі бұрылыс нүктелері бар жағдайы үшін жартылай классикалық кванттаудың шарттарын жазыңыздар. Екі бұрылыс нүктелерінің арасында  $p(x)$  бір қиылу нүктесі бар және комплекстік жазықтықта ешқандай сингулярлық нүктелері болмайды деп пайымдаңыздар.
- (11.2) Гармоникалық осциллятор үшін жартылай классикалық кванттаудың шарттарын жазыңыздар. Нәтижесін таза  $x^N$  осцилляторы үшін жалпы түрін жазыңыздар, мұндағы  $N$  – жұп.
- (11.3) Орталық өріс үшін жартылай классикалық кванттаудың шарттарын жазыңыздар. Бор-Зоммерфельд кванттауының шарттарын қолданып, сутегі спектрінің ерекшеліктерін табыңыздар.
- (11.4) Гармоникалық осциллятор есебін ВКБ жуықтауының төменгі ретінде шешіңіздер.
- (11.5)  $x^N$  потенциалы үшін спектрін ВКБ жуықтауының төменгі ретінде есептеңіздер, мұндағы  $N$  – жұп деп қабылдаңыздар. Кванттық сандардың үлкен мәндеріндегі шегін зерттеңіздер.
- (11.6) Массасы  $m$  бөлшекті бірөлшемді потенциалында

$$V(x) = g\delta(x-a) + g\delta(x+a)$$

қарастырайық. Метаорнықты күйлердің энергиясы мен ендерін жартылай классикалық жуықтауында есептеңіздер. Нәтижелерін Гамов-Зигерттің шекаралық шарттары үшін Шредингер теңдеуінің шешімдерімен салыстырыңыздар. Осы есепті «радиалдық», яғни  $x > 0$  жартылай жазықтығында анықталған тосқауыл үшін шешіңіздер.

(11.7) Ангармоникалық осциллятордың  $\frac{1}{2}(\lambda_2 x^2 + \lambda_4 x^4)$  спектрін ВКБ жуықтауының ең төменгі реттерінде есептеңіздер, мұндағы  $\lambda_2$  – оң. Ұйтқу теориясының нәтижелерімен салыстырыңыздар.

(11.8) Екі сөгінеген абсолюттік минимумы бар  $V(x)$  жалпы жұп потенциалын қарастырыңыздар. Туннельденудің кіші амплитудаларына қатысты негізгі күй мен бірінші қозған күйдің арасындағы жіктелу екі минимумда құрылған екі квазиклассикалық шешімдердің негізінде вариациялық есептеулермен алуға болатынын көрсетіңіздер.

(11.9) Қос шұңқырдағы ең төменгі екі күйлердің арасындағы жіктелу энергиясын ВКБ жуықтауының ең төменгі реттерінде есептеңіздер.

(11.10)  $V(x)$  потенциалы үшін Шредингер теңдеуін қарастырайық. Егер  $V(x)$  аналитикалық деп пайымдайтын болсақ, онда теңдеуді комплекссті облысында жіктеуге болады. Енді

$$\psi(x) = \exp\left(i \frac{\sigma(x)}{\hbar}\right)$$

деп орнатайық; мұндағы  $\sigma(x)$  классикалық бұрылыс нүктелеріндегі жалпы тармақталу нүктелері болады. Ондай нүктелердің тек екеуі ғана бар деп пайымдайық. Монодромиялық шарты  $\psi$ -ға шектеу орнатады:

$$\frac{1}{\hbar} \oint \sigma(x) dx = 2\pi n.$$

Бұл Бор-Зоммерфельд кванттауының шартына әкелетінін және ВКБ кванттауының рәсіміне  $\hbar$ -тың жоғары реттеріндегі түзетулерді есептеуге мүмкіндік беретінін көрсетіңіздер.

(11.11) Қос шұңқырдың ең төменгі екі күйлерінің арасындағы энергияның жіктелуін  $g \rightarrow 0$  шегінде есептеңіздер.

(11.12) Келесі

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}gx^4; \quad g > 0$$

потенциал үшін  $\text{Im}(E)$  жорамал бөлігін  $g \rightarrow 0$  шегінде есептеңіздер.

(11.13)  $V(x) = -F|x|$  потенциалы үшін шағылу және өту коэффициенттерін дәл есептеңіздер.

(11.14)  $V(x) = -\frac{1}{2}\beta x^2$  потенциалы үшін шағылу және өту коэффициенттерін дәл есептеңіздер.

(11.15) Егер кванттау шарты орындалатын болса, онда бірөлшемді жартылай классикалық байланысқан күйі үшін нормалау шарты  $C = 2\sqrt{m/T}$  төменгі кванттық күйлері үшін де орынды болатынын көрсетіңіздер.

(11.16) (а) Координаталық түрлендірулерді және жалпы канондық түрлендірулерді қолданып,

$$I_1 = \oint p_i dq_i \quad I_2 = \sum_i \oint p_i dq_i$$

түрлендірулерінің қасиеттерін зерттеңіздер.

(ә) Еркіндік дәрежесі  $n$  болатын жүйеде саны  $n$ -нен артпайтынын функционалдық тәуелсіз қозғалыс интегралдарының болатындығын көрсетіңіздер.

(б) Интегралданатын жүйелер үшін Лиувилль теоремасының гипотезасында торусқа жанама бойымен бағытталған  $n$  жанама вектордың болатындығын көрсетіңіздер және оларды құрыңыздар. Қозғалыстың өзіндік интегралдарының инволюциясы  $S$ -тың локальдық және оның түрі  $\nabla S = \mathbf{p}$  болатынын пайымдайды.

(в) Интегралданатын жүйедегі траекториялардың  $n-1$  параметрлік әулетін қарастыралық. Осы әулетті айналып өтетіндер каустикамен дәл келетінін көрсетіңіздер.

(11.17) Шредингер теңдеуінде

$$\psi = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)$$

алмастыруын жасап,  $\hbar \rightarrow 0$  шегін табыңыздар.

### Сандық талдау

(11.1) Гармоникалық және ангармоникалық осцилляторлар энергияларының деңгейлерін және толқындық функцияларын ВКБ жуықтауында сандық түрде зерттеңіздер.

(11.2) Қос шұңқырдағы ангармоникалық осцилляторды ВКБ жуықтауында зерттеңіздер; вариациялық есептеулердің нәтижелерімен салыстырыңыздар. Дербес жағдайда, кіші байланыс шегінде зерделеңіздер.

(11.3) Ангармоникалық потенциалдың шешімін эллипстік интегралдары арқылы жазып, ВКБ жуықтауында зерттеңіздер.

(11.4) Келесі

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{g}{2}x^4; \quad g > 0$$

потенциалындағы метаорнықты күйлердің табылуын зерттеу үшін ВКБ жуықтауын қолданыңыздар.

(11.5) Өту және шағылу коэффициенттері жөніндегі есепті ВКБ жуықтауында зерттеңіздер, дербес жағдайларын

$$V_1(x) = \frac{V_0}{2} \left( 1 + \cos \left( 2\pi \frac{x}{\Delta} \right) \right) \theta \left( \frac{\Delta}{2} + x \right) \theta \left( \frac{\Delta}{2} - x \right)$$

$$V_2(x) = V_0 \exp(-x^2 / \Delta)$$

қарастырыңыздар.

(11.6) Радиалдық потенциалы үшін:

$$V(r) = V_0 r^2 \exp(-r); \quad V_0 = 7.5$$

метаорнықты күйлерін ВКБ жуықтауында зерттеңіздер.

(11.7) Радиалдық потенциалы

$$V(r) = V_0 r^2 \exp(-r); \quad V_0 = 7.5$$

үшін  $S$ -толқынының шашырау фазасын энергияның функциясы ретінде есептеңіздер. ВКБ жуықтауының нәтижесімен салыстырыңыздар.

(11.8) Радиалдық потенциалындағы

$$V(r) = V_0 r^2 \exp(-r); \quad V_0 = 7.5$$

метаорнықты күйлерінің уақыт бойынша дамуын сандық түрде есептеңіздер.

$$V(r) = V_0 r^2 \exp(-r); \quad V_0 = 7.5.$$

(11.9) Осциллятордың төртінші дәрежесіне бірқалыпты жуықтау әдісін қолданыңыздар.

(11.10) ВКБ кванттауының рәсімдерін

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2) + \lambda x(y^2 + \eta x^2);$$

$$V(x, y) = \frac{\omega^2}{2}(x^2 + y^2) + \frac{g}{2}x^2(x^2 + y^2)$$

потенциалдары үшін зерттеңіздер.

(11.11) Біртекті гравитациялық өрісі және екі дененің гравитациялық есебі үшін каустикалық қисықтарын зерттеңіздер.

## Пәндік көрсеткіштер

- $\alpha$ -ыдырауы, 371
- $\beta$ -ыдырауы, 318
- $\hbar$  дәрежелері бойынша жіктеу, 366
- K-мезон, 174
- $\delta$  функция, 206, 313, 319
- СРТ-теорема, 170
- СР-бұзылуы, 170
- n-нүктелік корреляциялық функциялары, 264
- p-көрінісіндегі гармоникалық осциллятордың өзіндік күйлері, 215
- S-матрица, 115
- Адиабаталық, 306
- Адиабаталық инвариант, 20
- Ангармоникалық осциллятор, 361
- Аниондар, 179
- Анти унитарлық оператор, 169
- Антибөлшек, 155
- Анықталмағандық қатынастары, 241
- Анықталмағандық принципі, 32, 35
- Аралас күйлер, 212
- Асқын өткізгіштік, 180
- Атом
  - қабықшалары, 185,
  - мультиплеттері, 144,
  - орбиталары, 5
- Байланыс формуласы, 371
- Бессельдің сфералық функциялары, 192
- Бірөлшемді дельта потенциалы, 104
- Бозе-Эйнштейн конденсаты, 176
- Бор, 7
  - атомдық моделі, 17
  - сәйкестік принципі, 18
  - радиусы, 19
- Бор-Зоммерфельд кванттауы, 19
- Бор-Зоммерфельд кванттауының шарттары, 19
- Бөлшектің потенциалдағы қозғалысы, 251
- Бра, 27
- Бұрылыс матрицасы, 147
- Бұрыштық момент, 126
- $L_3, L_+, L_-$  операторларының өзіндік мөндері формулалары матрицалық элементтері, 124-129
- Берри фазасы, 415
- Вайскопф-Вигнер жуықтауы, 318
- ВКБ, 331
- Лэнжер түзетуі, 386
  - кванттау шарттары, 386
- ВКБ жуықтауы, 386
- ВКБ кванттық осцилляторы, 387
- Вейльдің критерийлері, 227
- Галилей түрлендіруі, 170
- Гелий атомының шекті болуының түзетулері, 363
- Гильберттік кеңістігі, 27
  - толықтық, 216
  - сеперабельділік, 216
- Гиромагниттік қатынас, 140
- Грин функциясы, 254
  - еркін бөлшектің, 256
- Де Бройль толқыны, 20
- Де Витт бірмәнділік еместігі, 251
- Дельта-функция, 52
  - үзілістік шарты, 98
- Динамикалық айнымалылар, 37
  - операторлар, 37
- Дипольдік жуақтау, 325
- Домен, операторды *қараңыз*
- Дуальдылық
  - бөлшектік-толқындық, 4
- Екінші реттік кванттау, 185
- Жарату және жою операторлары, 91
- Жарықтың жұтылуы, 326
- Жұптылық, 109
  - оператордың айқын түрі, 334
- Импульстік жуықтау, 307
- Индукцияланған сәулеленуі, 332
- Инстантон, 277
- Иондалу потенциалы, 357
- Иргелі группа, 179
- Казимир эффектісі, 89
- КАМ (Қолмогоров - Арнольд - Мозер) теоремасы, 364
- Канондық коммутациялық қатынастар, 44
- Квантталу
  - бұрыштық моменттің, 129
- Кванттық өту, 303
- Кванттық сан, 43
  - негізгі, 190
- Кванттық шатасу, 29
- Келтірілген масса, 189
- Келтірілген матрицалық элемент, 175
- Кеңістік, 179
- Кет, 27

- Классикалық вириал теоремасы, 67  
Клебш-Гордан коэффициенттері, 145  
Когеренттік емес жарық, 328  
Ритц ережесі, 18  
Коммутациялық қатынастар  
    канондық, 44  
Комплекстік жазықтығы, 53  
Комптон эффектісі, 17  
Континуумға өтуі, 312  
Коши тізбегі, 218  
Көрініс, 210  
     $p$ -көрінісі, 211  
     $q$ -көрінісі, 211  
Күй  
    аралас, 241  
    таза, 241  
Күйдің нормалануы, 26, 217  
Күйлердің тығыздығы, 314  
Қара дененің сәулеленуі, 11  
Ландау деңгейлері, 42, 122  
Лаплас-Бельтрами операторы, 251  
Лежандр полиномдары  
    ассоциацияланған, 136  
Локальданған толқындық функция, 110  
Лагерраның полиномдары  
    ассоциацияланған, 202  
Лагерраның полиномдарынан  
    генерацияланатын функциялары, 202  
Малюс заңы, 31  
Матрицалық механика, 121  
Метаорнықты күйлердің ендері, 318,  
    408  
Миликен, фотоэлектрлік эффект, 17  
Монохроматтық сәулелену  
    кең алқапты, 327  
Монте-Карло әдісі, 282  
Намбу-Голдстоун теоремасы, 163  
Нәзік құрылым, 299  
Нәзік құрылым тұрақтысы, 205  
Нәлдік модалар, 280  
Нәлдік тебеліс энергиясы, 89  
Нормаланған функциялар, 26  
Нормалану шарты, 75  
Оң анықталған өлшемдік операторы,  
    145  
Оператор, 158  
    аннигиляция, 91  
    анти-унитарлық, 169  
    байланысқан, 210  
    жарату, 238  
    эрмиттік, 239  
    өзіне түйіндес, 240  
    спектрі, 293  
    симметриялы, 169  
    унитарлық, 169  
Оператордың өзіндік мәндері, 234  
Орбиталдық, 354  
Осциллятор, 75  
    үшөлшемді, 99  
Өзіндік вектор, 211  
Өзіндік мәні, 211  
Өту коэффициенті, 99  
Өтудің матрицасы, 104  
Параболалық интерполяция, 371  
Паули матрицалары, 139  
Паулидің тыйым салу принципі, 184  
Периодтық потенциал, 251  
Планк таралуы, 333  
Поляризация, 359  
    Фотонның  
        поляризациялануы, 245  
Поляризациялық масса, 359  
Потенциалдық тосқауыл, 390  
Пуассон жақшалары, 49  
Раби жиілігі, 311  
Резольвента, қалық, 227  
Резонанстар, 404  
Резонанстық тербелістер, 317  
    потенциалдық шұңқыр, 8  
Релей-Джинс формуласы, 12  
Ридберг тұрақтысы, 18  
    формуласы, 19  
Симметрия, 154  
    үздіксіз, 155  
    себепті сегінеу, 160  
    жұптылық, 163  
Симметриялар, 159  
сақталу заңы, 159  
Симметрияның әсерінен сақталу заңы,  
    159  
Симметрияның спонтандық бұзылуы,  
    169  
Спектр  
    өзіне түйіндес оператор, 222  
Спектрлік ағын, 72  
Спектрлік жіктеу, 226  
Спектрлік сызықтардың ендері, 318  
Спектрлік теорема, 224  
Спектрлік терм(дер), 18  
Спектрлік тығыздық, 13  
Спин

- айнымалы магнит өрсіндегі, 134  
 Спин мен статистика, 182  
 Спинорлық (проекциялық) көрініс, 147  
 Спиральділік, 328  
 Спонтандық магнит моменті, 157  
 Спонтандық сәулелену, 331  
 Стандарттық модель, 157  
 Статистикалар  
   Бозе-Эйнштейннің, 176  
   Ферми-Дирақтың, 176  
 Супертаңдау ережелері, 253  
 Суперсимметрия, 206  
 Сутегі атомы, 199  
   сетінген деңгейлері, 298  
   радиалдық өзіндік функциялары, 203  
 Сфералық гармоникалар, 326  
 Сфералық потенциал, 164  
 Сфералық тензор, 174  
 Сфералық толқын, 194  
 Таза күй, 242  
 Таңдау ережелері, 325  
 дипольдік өту үшін ережелері, 326  
 Тектес бөлшектер, 176  
 Теорема  
 Хеллинггер және Тёплицтің, 222  
 Фон Нейманның  
 коммутациялайтын операторлар үшін, 231  
 Вигнердің, 170  
 Вигнер-Эккарттың, 173  
 Ток тығыздығы, 66  
 электормагниттік өрісте, 66  
 Топологиялық кванттау, 73  
 Траектория бойынша интеграл, 264  
 Троттер формуласы, 262  
 Туннельдік эффект, 7  
 траектория бойынша интеграл, 264  
 Тығыздық матрицасы, 241  
 Стокс параметрлері, 246  
 Уақыт бойынша эволюция, 237  
 Гейзенберг көрінісі, 49  
   уақытқа тәуелсіз  $H$ , 48  
 Уақыт тілшігі, 170  
 Уақыттың кері бұрылуы, 169  
 Унитарлық группалары, 199  
 Унитарлық түрлендірулер  
 уақытқа тәуелді, 221  
 Үзіліссіздік теңдеуі, 66  
 Үшбұрыш теңсіздіктері, 218  
 үшбұрыш шарты, 218  
 Ұйытқу, 280  
 Шекаралық шарттардың өзгеруі, 280  
 периодты, 280  
 Фабри-Перо интерферометрі, 106  
 Фаза геометриялық,  
 Фазалық ығысу, 408  
 ВКБ әдісі, 365  
 Фейнман диаграммалары, 254  
 Фейнман ережелері, 263  
 Фейнман теоремасы, 263  
 Фермидің алтын ережесі, 313  
 Фермион, 176  
 Фок көрінісі, 185  
 Фотонның поляризациясы, 245  
 Фотоэлектрлік эффект, 15  
 Франк-Герц, 19  
 Функционалдық интеграл, 267  
 Ханкельдің сфералық функциялары,  
   193  
 Хиггс механизмі, 157  
 Хронологиялық көбейтінді, 263  
 Шағылу коэффициенті, 99  
 Шатасу, 29  
 Шашырау  
 дельта-функция потенциалы, 206  
 тектес бөлшектер үшін түрлендірулер,  
   157  
 Шашырау амплитудасы, 206  
 Шварц теңсіздігі, 218  
 Шекаралық шарт, 257  
 Шредингер көрінісі, 211  
 Шредингер теңдеуі, 216  
 Штарк эффектсі, 297  
 Штерн-Герлах, 133  
 Ыдырау, бөліну, 315  
 Эйнштейн  
 фотоэлектрлік эффект, 15  
 Эйнштейн коэффициенттері, 333  
 Эйри функциясы, 370  
 Электормагниттік өтулер, 322  
 Электрондық конфигурациялар, 185  
 Электормагниттік, 15  
 Эренфест теоремасы, 64  
 Эрмиттік оператор, 39  
 Эффекті  
   Ааронов-Бом, 73  
 Холлдың кванттық эффектсі, 180  
 Зеeman, 327  
 Якоби тепе-теңдігі, 41  
 Янг-Милс теориясы, 156

## Сілтемелер

- Abers, E. S., and Lee, B. W. (1973). *Phys. Rep.*, **9**, 1.
- Abragam, A. (1961). *The Principles of Nuclear Magnetism* (Oxford: Clarendon).
- Abramowitz, M., and Stegun, I. A. (1964). *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover).
- Agarwal, G. S., and Arun Kumar, S. (1991). *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 3665.
- Aguilar, J., and Combes, J. M. (1971). *Comm. Math. Phys.*, **22**, 269.
- Aharonov, Y., and Bohm, D. (1959). *Phys. Rev.*, **115**, 485.
- Akhiezer, N. I., and Glazman, I. M. (1966). *Theory of Linear Operators in Hilbert Space* (New York: Dover).
- Amati, D., Ciafaloni, M., and Veneziano, G. (1989). *Phys. Lett.*, **B216**, 41.
- Arnold, V. I. (1997). *Mathematical Methods of Classical Mechanics* tr. Weinstein, A., and Vogtman, K. (Berlin/Heidelberg: Springer). [Russian original: *Matematicheskie Metody Klassiceskoj Mekhaniki* (Moscow: Nauka, 1974).]
- Aspect, A., Grangier, P., and Roger, G. (1981). *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 91.
- Aspect, A., Dalibard, J., and Roger, G. (1981). *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 1804.
- Ballantine, L. E. (1998). *Quantum Mechanics: A Modern Development* (Singapore: World Scientific).
- Balsa, R., Plo, M., Esteve, J. G., and Pacheco, A. F. (1983). *Phys. Rev.*, **D28**, 1945.
- Bardou, F., Bouchaud, J-P., Aspect, A., and Cohen-Tannoudji, C. (2002). *Levy Statistics and Laser Cooling: How Rare Events Bring Atoms to Rest* (Cambridge: Cambridge University Press).
- Bell, J. S. (1964). *Physics*, **1**, 195.
- Bell, J. S. (2004). *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics* (Oxford: Clarendon).
- Bell, J. S. (1990). Against Measurement *Phys. World* 3:33-40 CERN- TH-5611-89.
- Bender, C. M., and Wu, T. T. (1973). *Phys. Rev.*, **D7**, 1620.
- Berestetskii, V. B., Lifshitz, E. M., and Pitaevskii, L. (1980). *Quantum Electrodynamics*, Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics, Vol. 4 tr. by J.B. Sykes and J.S. Bell (Oxford, Pergamon).
- Berry, M.V., and Mount, K. E. (1972). *Reps. Prog. Phys.*, **35**, 315.
- Berry, M.V. (1984). *Proc. R. Soc. Lond.*, **A 392**, 45.
- Berry, M.V. (1980). *Eur. J. Phys.*, **1**, 240.
- Berry, M.V. (1983). Semiclassical Mechanics of regular and irregular motion, in *Les Houches Lecture Series Session XXXVI*, ed. G. Looss, H. G. Helleman and R. Stora (Amsterdam: North Holland), 171.
- Bethe, H. A., and Jackiw, R. (1986). *Intermediate Quantum Mechanics* (Reading MA: Addison Wesley).
- Bethe, H. A., and Salpeter, E. E. (1977). *Quantum Mechanics of One And Two-Electron Atoms* (New York: Plenum).
- Bjorken, J. D., and Drell, S. (1964). *Relativistic Quantum Mechanics* (New York: MacGraw-Hill).
- Bjorken, J. D., and Drell, S. (1965). *Relativistic Quantum Fields* (New York: MacGraw-Hill).
- Bogoliubov, N. N., and Shirkov, D. V. (1959). *Introduction to the Theory of Quantized Fields* (New York: Wiley-Interscience).
- Bohm, D. (1952). *Phys. Rev.*, **85**, 166.
- Bohr, A., and Mottelson, B. R. (1969). *Nuclear Structure*, Vol. I (New York: Benjamin).
- Bohr, A., and Mottelson, B. R. (1975). *Nuclear Structure*, Vol. II (New York: Benjamin).
- Bonneau, G., Faraut, J., and Valent, G. (2001). *Am. J. of Phys.*, **69**, 322.
- Born, M., Heisenberg, W., and Jordan, P. (1926). *Z. f. Phys.*, **35**, 557.
- Born, M. (1989) (8th edn). *Atomic Physics*, 8th edn (New York: Dover).
- Born, M. (1927). *Mechanics of the Atom* (London: Bell). [German original: *Vorlesungen über Atommechanik* (Berlin: Springer, 1925).]
- Boyd, J. P. (2001). *Chebyshev and Fourier Spectral Methods* (New York: Dover).
- Brenner, M. P., Hilgenfeldt, S., and Lohse, D. (2002). *Rev. Mod. Phys.*, **74**, 425.
- Brillouin, L. (1938). *Les Tenseur en Mé-*

- canique et en Élasticité*, Libraires de l'académie de médecine. (Paris: Masson), Chap. IX.
- Burgers, A., Vintgen, D., and Rost, J. M. (1995). *JPhys.*, **B 28**, 3163.
- Cardy, J., and Calabrese, P. (2004). *J. Stat. Mech.*, **0406**, P002.
- Chiao, Y., Kwiat, P. G., and Steinberg, A. M. (1995). *Quantum Nonlocality in Two Photon experiments at Berkeley*. ArXiv: quantph/9501016;
- Chiao, Y. (1993). Faster than Light? *Sci. Am.* Aug 1993, 38.
- Christensen, J. H., Cronin, J. W., Fitch, V. L., and Turlay, R. (1964). *Phys. Rev. Lett.*, **13**, 138.
- Clauser, J. F., Holt, R. H., Horne, M. A., and Shimony, A. (1969). *Phys. Rev. Lett.*, **23**, 880.
- Cohen-Tannoudji, C., Dupont-Roc, J., and Grynberg, G. (1988). *Precessus d'Interaction entre Photons et Atoms*, Editions du CNRS.
- Cohen-Tannoudji, C. (1968). *Optical Pumping and Interaction of Atoms with the Electromagnetic Field*, Cargese Lectures in Physics, Vol. 2 ed. M. Levy (New York: Gordon and Breach).
- Colella, R., Overhauser, A. W., and Werner, S. A. (1975). *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 1472.
- Coleman, S. (1979). The uses of instantons, Erice Lectures 1977, in *the Whys of Subnuclear Physics* (New York: Plenum).
- Condon, E. U., and Shortley, G. H. (1935). *The Theory of Atomic Structure* (Cambridge: Cambridge University Press).
- Cooper, F., Khare, A., and Sukhatme, U. (2002). *Supersymmetry in Quantum Mechanics* (Singapore: World Scientific).
- Correggi, M., and Morchio, G. (2002). *Ann. of Phys.*, **296**, 371.
- Courant, R., and Hilbert, D. (1989). *Methods of Mathematical Physics*, Vol.1,2 (New York: Wiley-Interscience).
- Dalfovo, F., Giorgini, S., Pitaevkii, L., and Stringari, S. (1999). *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 463.
- Dalgarno, A., and Lewis, J. T. (1955). *Proc. Roy. Soc.*, **A233**, 70.
- Davydov, A. S. (1965). *Quantum Mechanics* (Oxford: Pergamon).
- Delves, J. M. (1972). *J. Phys. A*, **5**, 1123.
- DeWitt, B. S. (1957). *Rev. Mod. Phys.*, **29**, 377.
- Di Giacomo, A. (1992). *Lezioni di Fisica Teorica* (Pisa: Edizioni ETS).
- Dingle, R. B. (1973). *Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation* (New York: Academic).
- Dirac, P. A. M. (1931). *Proc. Roy. Soc.*, **A 133**, 60. Dirac, P. A. M. (1948). *Phys. Rev.*, **74**, 817.
- Dirac, P. A. M. (1958). *Principles of Quantum Mechanics*, 4th edn. (Oxford: Clarendon).
- Dodonov, V. V., and Man'ko, V. I. (1978). *Phys. Rev.*, **A20**, 550.
- Dyson, F. J. (1952). *Phys. Rev.*, **85**, 631.
- Einstein, A., Podolsky, B., and Rosen, N. (1935). *Phys. Rev.*, **47**, 777. Erdelyi, A. (1956). *Asymptotic Expansions* (New York: Dover).
- Everett, H., III. (1957). *Phys. Mod. Phys.*, **29**, 454.
- Ezawa, J.F. (2008). *Quantum Hall Effects: Field Theoretical Approach and Related Topics 2nd edn.* (Singapore: World scientific).
- Fermi, E. (1927). *Atti Accad. Naz. Lincei*, **6**, 602. Fermi, E. (1928). *Atti Accad. Naz. Lincei*, **7**, 342.
- Fermi, E., and Amaldi, E. (1934). *Memorie Accad. d'Italia*, **6**, 119.
- Feynman, R. P. (1948). *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367.
- Feynman, R. P., and Hibbs, A. R. (1965). *Quantum Mechanics and Path Integrals* (New York: McGraw-Hill).
- Feynman, R. P., Leighton, R. B., and Sands, M. (2005). *The Feynman Lectures on Physics*, 2nd edn., Vol.3 (Reading MA: Addison- Wesley).
- Fischer, C., Brage, T., and Jonsson, P. (1997). *Computational Atomic Structure* (Bristol: IOP).
- Fradkin, E. (1986). *Phys. Rev.*, **B 33**, 3263.
- Fritzsche, H., Gell-Mann, M., and Leutwyler, H. (1973). *Phys. Lett.*, **B47**, 365.
- Furry, W. H. (1947). *Phys. Rev.*, **71**, 360.
- Gaitan, D. F. (1990). Ph D Thesis, University of Mississippi.
- Geim, A. K., and Novoselov, K. S. (2007). *Nature Materials*, **6**, 183;
- Geim, A. K., and MacDonald, A. H. (2007).

*Physics Today*, **60**, 35.

Ghirardi, G. C., Rimini, A., and Weber, T. (1986). *Phys. Rev.*, **D 34**, 470.

Glashow, S. L., Iliopoulos, J., and Maiani, L. (1970). *Phys. Rev.*, **D2**, 1285.

Gleason, A. M. (1957). *Journ. Math. Mech.*, **6**, 885.

Goldberger, M. L., and Watson, K. M. (1964). *Collision Theory* (New York: Dover).

Goldstone, J., Salam, A., and Weinberg, S. (1962). *Phys. Rev.*, **127**, 965.

Gradshteyn, I. S., and Ryzhik, I. M. (1965). *Table of Integrals, Series and Products* (New York: Academic).

Green, M., Schwartz, J., and Witten, E. (1987). *Superstring Theory*, Vol. I, II. (Cambridge: Cambridge University Press).

Guida, R., Konishi, K., and Suzuki, H. (1995) *Ann. of Phys.*, **241**, 152. Guida, R., Konishi, K., and Suzuki, H. (1996). *Ann. of Phys.*, **249**, 109.

Gutzwiller, M. C. (1990). *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (New York: Springer-Verlag).

Hamermesh, M. (1962). *Group Theory and its Application to Physical Problems* (New York: Dover).

Hardy, G. H. (1991). *Divergent Series*, 2 edn. (New York: Chelsea).

Heisenberg, W. (1925). *Z. f. Phys.*, **33**, 879.

Heisenberg, W. (1926). *Z. f. Phys.*, **38**, 411.

Heisenberg, W. (1930). *The Physical Principles of the Quantum Theory*, tr. by C. Eckart and C. Hoyt (New York: Dover)

Herzberg, G. (1944). *Atomic Spectra and Atomic Structure* (New York: Dover).

Herbst, I. W., and Simon, B. (1978). *Phys. Rev. Lett.*, **41**, 67.

Hylleraas, E. A. (1929). *Z. f. Phys.*, **54**, 347.

Itzykson, C., and Zuber, J-B. (1980). *Quantum Field Theory* (New York: McGraw-Hill).

Jackiw, R., and Redlich, A. N. (1983). *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 555.

Jackiw, R. (1991). *Delta-Function Poten-*

*tials in Two- and Three Dimensional Quantum Mechanics*, Beg Memorial Volume, eds. A. Ali and P. Hoodbhoy (Singapore: World Scientific).

Joachain, C. J. (1975). *Quantum Collision Theory* (Amsterdam: North-Holland).

Joos, E., Zeh, H. D., Kiefer, C., Giulini, D., Kupsch, J., and Stamatescu, I.-O. (2002). *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, 2nd edn. (New York: Springer).

Keller, J. R. (1958). *Ann. of Phys.*, **4**, 180.

Kemble, E. C. (1937). *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics*, Sec. 35 (New York: MacGraw-Hill).

Ketterle, W. (2002). *Nobel Lecture: When Atoms Behave as Waves: Bose-Einstein Condensation and Atom Laser*, *Rev. of Mod. Phys.*, **74**, 1131.

Kinoshita, T. (1957). *Phys. Rev.*, **105**, 1490. Kinoshita, T. (1959). *Phys. Rev.*, **115**, 366,.

Kleinert, H. (2006). *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets* (Singapore: World Scientific).

Kochen, S. and Specker, E. (1967). *J. Math. Mech.*, **17**, 59.

Kogan, V.I., and Galitsky, V.M. (1963). *Problems in Quantum Physics* (Englewood Cliffs: Prentice-Hall).

Konishi, K., and Paffuti, G. (2006). *Int. Jour. of Mod. Phys.*, **A21**, 3199.

Konishi, K., Paffuti, G., and Provero, P. (1990). *Phys. Lett.*, **B234**, 276.

Kravtsov, Yu. A. (1968). *Sov. Phys. Acoust.*, **14**, 1.

Landau, L. D., and Lifshitz, E. M. (1976 a). *Course of Theoretical Physics, Vol. 1: Mechanics*. 3rd edn. (Oxford: Pergamon).

Landau, L. D., and Lifshitz, E. M. (1976 b). *Course of Theoretical Physics, Vol. 2: Classical Fields*. 3rd edn. (Oxford: Pergamon).

Landau, L. D., and Lifshitz, E. M. (1976 c). *Course of Theoretical Physics, Vol. 3: Quantum Mechanics (Non-Relativistic Theory)* 3rd edn. (Oxford: Pergamon).

Langer, R. E. (1937). *Phys. Rev.*, **51**, 669.

Lee, T. D., and Yang, C. N. (1956). *Phys. Rev.*, **104**, 254.

- Lee, T. D., and Wu, C. S. (1966). *Annual Review of Nuclear Science*, **16**, 471.
- Le Guillou, J. C., and Zinn-Justin, J. (1990). *Large-Order Behaviour of Perturbation Theory* (Amsterdam: North-Holland).
- Lewis, H. R. Jr., and Riesenfeld, W. B. (1969). *Journ. Math. Phys.*, **10**, 1458.
- Lifshitz, E. M. and Pitaevskii, L. (1981). *Landau and Lifshitz Course of Theoretical Physics, Vol. 9: Statistical Physics*. tr. by J.B. Sykes and M.J. Kearsley (Oxford: Pergamon).
- Loeffel, J. J. and Martin, A. (1972). *Cargese Lectures on Physics*, Vol. 5, 415. ed. D. Bessis (New York: Gordon and Breach).
- Ludwig, G. (1968). *Wave Mechanics* (Oxford: Pergamon).
- MacDonald, J. K. L. (1934). *Phys. Rev.*, **46**, 828.
- Maggiore, M. (1993). *Phys. Lett.* , **B304**, 65.
- Maslov, V. P. and Fedoriuk, M. V. (1981). *Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics* (Dordrecht: Reidel).
- Mermin, D. (1990) *Am. J. Phys.*, **58**, 731; *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 1838.
- Messiah, A. (2000) *Quantum Mechanics* (New York: Dover).
- Messiah, A., and Greenberg, O. W. (1964). *Phys.Rev.*, **136**, 249.
- Maggiore, M. (2005). *A Modern Introduction to Quantum Field Theory* (Oxford: Clarendon).
- Millikan, R. A. (1916). *Phys. Rev.*, **D7**, 355.
- Mukhanov, V. F., Feldman, H. A., and Brandenberger, R. H. (1992). *Phys. Rep.*, **215**, 203.
- Nagata, L. (1998). *Vast* (New York: Bantam).
- Nambu. Y. (1960). *Phys. Rev. Lett.*, **4**, 380.
- Nambu, Y., and Jona-Lasinio, G. (1961). *Phys. Rev.*, **122**, 345.
- Nelson, E. (1966). *Phys. Rev.*, **150**, 1079.
- Newton, R. G. (1966). *Scattering Theory of Waves and Particles* (New York: Dover).
- Nielsen, M. A., and Chuang, I. L. (2000). *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press).
- Pauli, W. (1925). *Z. f. Physik*, **31**, 765.
- Pauli, W. (1940). *Phys. Rev.*, **58**, 716.
- Pauling, L., and Bright Wilson, E. Jr. (1935). *Introduction to Quantum Mechanics with Application to Chemistry* (New York: Dover).
- Pekeris, C. L. (1962). *Phys. Rev.*, **126**, 1470.
- Penrose, R. (1989). *The Emperor's New Mind* Oxford: Oxford University Press.
- Percival, J. C. (1977). *Adv. Chem. Phys.*, **36**, 1.
- Peres, A. (1995). *Quantum Theory: Concepts and Methods* (Dordrecht/Boston/London: Kluwer).
- Peskin, M. E., and Schröder, D. V. (1995). *An Introduction to Quantum Field Theory* (New York: Addison-Wesley).
- Polchinski, J. (1998). *String Theory*, Vols. I, II (Cambridge: Cambridge University Press).
- Preskill, J. D. (2006).  
<http://www.theory.caltech.edu/preskill>.
- Prange, E., and Girvin, M. (1990). *The Quantum Hall Effect*, 2nd edn. (New York/Heidelberg/Berlin: Springer).
- Reed, M., and Simon, B. (1980). *Method of Modern Mathematical Physics, Vol. 1: Functional Analysis* (New York: Academic).
- Reed, M., and Simon, B. (1980). *Method of Modern Mathematical Physics, Vol. 4: Analysis of Operators* (New York: Academic).
- Reinhardt, W. (1982). *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **33**, 223.
- Rodberg, L. S., and Thaler, R. M. (1967). *Introduction to the Quantum Theory of Scattering* (New York: Academic).
- Salam, A. (1968). in *Elementary Particle Theory*, ed. N. Svartholm (Stockholm: Almqvist Forlag AB) 367.
- Schechter, M. (1981). *Operator Method in Quantum Mechanics* (Amsterdam: North-Holland).
- Schiff, L. I. (1968). *Quantum Mechanics* (New York: McGraw-Hill).
- Schrodinger, E. (1926a). *Ann. Phys.*, **79**, 361, 489, 734. Schrodinger, E. (1926b). *Ann. Phys.*, **80**, 437. Schrodinger, E. (1926c). *Ann. Phys.*, **81**, 109.
- Schrodinger, E. (1935) *Naturwissenschaften*, **23**, 807, 823, 844. English translation in Wheeler and Zurek (1983).

- Schulman, L. S. (1981). *Techniques and Applications of Path Integration* (New York: Wiley-Interscience).
- Sebawe Abdulla, M., and Colgrave, R. K. (1985). *Phys. Rev.*, **A32**, 1958.
- Semenoff, G. W. (1984). *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 2449.
- Shaw, R. (1954). Ph D Thesis, University of Cambridge.
- Simon, B. (1972). *Comm. Math. Phys.*, **27**, 1. Simon, B. (1972). *Ann. Math.*, **97**, 247.
- Slater, J. C. (1960). *Quantum Theory of Atomic Structure* (New York: McGraw-Hill).
- Sokal, A.D. (1980). *J. Math. Phys.*, **21**, 261.
- Steinberger, J. (1970).  $K^0$  Decay and CP Violation, CERN Report, 70-1.
- Strocchi, F. (1985). *Elements of Quantum Mechanics of Infinite Systems* (Singapore: World Scientific).
- Taylor, J. R. (1908). *Cambridge Phil. Soc.*, **15** 114.
- Taylor, J. C. (1976). *Gauge Theories of Weak Interactions* (Cambridge: Cambridge University Press).
- Temple, G. (1934). *Proc. Nat. Acad. Sci.*, **20**, 529.
- Ter Haar, D. (1967). *The Old Quantum Theory* (Oxford: Pergamon).
- 't Hooft, G., and Veltman, M. (1977). Diagrammer, *CERN Yellow report* CERN 73-9.
- 't Hooft, G. (1980). Lectures given at Cargese Summer Inst., Cargese, France, Aug 26 - Sep 8, 1979. NATO Adv. Study Inst. Ser. B Phys. **59**, 117.
- Thomas, L. H. (1927). *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **23**, 542.
- Tomonaga, S. (1968). *Quantum Mechanics*, Vol. 1 (Amsterdam: North-Holland).
- Tonomura, A. et. al. (1989). *Am. J. Phys.*, **57**, 117.
- Tonomura, A., Yano, S., Osakabe, N., Matsuda, T., Yamada, H., Kawasaki, T., and Endo, J. (1986). *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 792.
- Tonomura, A. (2000). *Int. J. Mod. Phys.*, **A 15**, 3427.
- Trott, M. (2006). *The Mathematica Guidebook for Symbolics* (New York/Heidelberg/Berlin: Springer).
- van der Waerden, B. L. (1968). *Sources of Quantum Mechanics* (New York: Dover).
- van Vleck, J. H. (1928). *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **14**, 178.
- Vidal, G., Latorre, J. I., Rico, E., and Kitaev, A. (2003). *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 227902.
- von Neumann, J. (1932). *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* tr. R.T. Beyer (Princeton NJ: Princeton University Press). [German original: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin: Springer 1932].
- Wallace, D. (2007). *The Quantum Measurement Problem: the State of Play*, arXiv:0712.0149.
- Weinberg, S. (1967). *Phys. Rev. Lett.*, **19**, 1264.
- Weinberg, S. (1989). *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 485.
- Weinstein, D. H. (1928). *Proc. Roy. Soc. (London)*, **119**, 276.
- Wheeler, J. A., and Zurek, W. H. (1983). *Quantum Theory and Measurement* (Princeton NJ: Princeton University Press).
- Williams, E. J. (1930). *Proc. Roy. Soc.*, **A 128**, 459.
- Wilson, K. (1974). *Phys. Rept.*, **12 C**, 75.
- Witten, E. (1981). *Nucl. Phys.*, **B 188**, 513.
- Wittig, C. (2005). *J. Phys. Chem.*, **B 109**, 8428.
- Wolf, F., and Korsch, H. J. (1988). *Phys. Rev.*, **A37**, 1934.
- Wolfram, S. (2003). *The Mathematica Book* 5th edn. (Champaign IL: Wolfram Media Inc.).
- Wu, T. T. and Yang, C. N. (1975). *Phys. Rev.*, **D12**, 3845.
- Whittaker, E. T., and Watson, G. N. (1927). *A Course of Modern Analysis* (Cambridge: Cambridge University Press).
- Yang, C. N., and Mills, R. L. (1954). *Phys. Rev.*, **96**, 191.
- Yao, D. M., et. al. (Particle Data Group) (2006). *J. Phys.*, **G 33**, 1.
- Zinn-Justin, J. (1989). *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford: Clarendon).

**Кениши Кониши  
Джампьеро Паффути**

# **КВАНТТЫҚ МЕХАНИКА**

**жаңа көзқарас**

**1-бөлім**

*Оқулық*

Басуға қол қойылған күні 27.12.2013 ж.  
Қағазы офсеттік. Қаріп түрі «SchoolBook».  
Пішімі  $70 \times 100^{1/16}$ . Шартты баспа табағы 28.  
Таралымы: 700 дана. Тапсырыс № 8911.

Тапсырыс берушінің файлдарынан Қазақстан Республикасы  
«Полиграфкомбинат» ЖШС-нде басылды.  
050002, Алматы қаласы, М. Мақатаев көшесі, 41.