

Міністерство освіти і науки України
ДВНЗ «Прикарпатський національний університет
імені Василя Стефаника»

О.М. Возняк, В.В. Прокопів, Л.І. Никируй

**ВИКОРИСТАННЯ СЕРЕДОВИЩА MAPLE
ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ**

Навчальний посібник

Івано-Франківськ
2018

УДК 530.145
ББК 22.314
В80

Рекомендовано до друку Вченою радою фізико-технічного факультету ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»

Рецензенти:

доктор фізико-математичних наук, професор І.П. Яремій
кандидат фізико-математичних наук, доцент І.М. Ліщинський

В80 Возняк О.М. Використання середовища Maple для розв'язування задач квантової механіки. Навчальний посібник / О.М. Возняк, В.В. Прокопів, Л.І. Никируй. – Івано-Франківськ : Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, 2018. – 156 с.

В навчальному посібнику містяться початкові відомості про середовище комп'ютерної математики Maple, короткий огляд основних можливостей системи і вбудованих функцій. Розглянуто приклади моделювання та розв'язування задач квантової механіки різної складності в середовищі Maple.

Посібник призначений для студентів спеціальності «Фізика та астрономія» і «Прикладна фізика та наноматеріали» та для студентів нефізичних спеціальностей, що вивчають теоретичну фізику. Також буде корисним студентам, аспірантам, викладачам та фахівцям, які використовують пакет Maple в практичній діяльності.

УДК 530.145
ББК 22.314

© Возняк О.М., Прокопів В.В.,
Никируй Л.І., 2018
© ДВНЗ «Прикарпатський
національний університет імені
Василя Стефаника», 2018

ЗМІСТ

ВСТУП.....	5
1. СЕРЕДОВИЩЕ МАТЕМАТИЧНИХ РОЗРАХУНКІВ MAPLE	6
1.1. Maple – універсальне середовище для забезпечення математичних розрахунків	6
1.2. Інтерфейс користувача Maple	7
1.3. Основи Maple.....	8
1.4. Стандартні функції ядра і бібліотеки Maple	8
1.5. Символьні обчислення в Maple	11
1.5.1. Аналітичні перетворення	11
1.5.2. Розв’язування рівнянь	16
1.5.3. Графіки Maple	19
1.6. Мова програмування Maple	20
1.6.1. Умовне розгалуження.....	20
1.6.2. Цикли for і while	21
1.7. Користувацькі функції	22
1.8. Процедури Maple.....	23
1.9. Робота з векторами і матрицями в Maple.....	24
1.10. Засоби обробки матриць Maple	25
1.11. Можливості модулів Linalg і LinearAlgebra	27
1.12. Розрахунок коефіцієнтів теорії кутових моментів	28
2. РОЗВ’ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ В СЕРЕДОВИЩІ MAPLE	33
2.1. Властивості хвильової функції	33
2.1.1. А. Хвильова функція	33
2.1.2. В. Середні значення координати та імпульсу	38
2.2. Квантова механіка для вільних частинок.....	43
2.2.1. А. Розв’язок рівняння Шредінгера для вільних частинок.....	43
2.2.2. В. Потік ймовірності та його збереження	45
2.2.3. С. Опис вільної частинки хвильовим пакетом.....	48
2.2.4. D. Гаусівські хвильові пакети та співвідношення невизначеностей Гейзенберга.....	52
2.3. Квантова механіка частинки в прямокутній потенціальній ямі	55
2.3.1. А. Стаціонарні стани	55
2.3.2. В. Розв’язок стаціонарного рівняння Шредінгера для частинки в прямокутній потенціальній ямі	57
2.4. Напівпроникна перегородка	62
2.5. Розв’язок рівняння Шредінгера для довільного потенціалу.....	65
2.5.1. А. Умови неперервності хвильової функції.....	65
2.5.2. В. Зміст власних значень.....	67
2.5.3. С. Приклад: зв'язані стани у прямокутній ямі.....	70
2.6. Відбивання та проходження хвиль на потенціальному бар’єрі.....	78

2.6.1. А. Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера на потенціальному бар'єрі.....	78
2.6.2. В. Можливості відбивання та проходження для стаціонарного потоку частинок	85
2.6.3. С. Відбивання та проходження хвильового пакета на потенціальному бар'єрі.....	88
2.7. Віртуальні рівні	98
2.8. Потенціальний гребінець Дірака (періодичний потенціал)	101
2.9. Гармонічний осцилятор – аналітичний розв'язок	104
2.9.1. А. Рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора	104
2.9.2. В. Асимптотичні розв'язки для великих значень аргумента ...	105
2.9.3. С. Розв'язок для невеликих значень аргументів і точний розв'язок	107
2.10. Чисельний підхід до задачі про гармонічний осцилятор	114
2.10.1. А. Гармонічний осцилятор.....	114
2.10.2. В. Співвідношення між розв'язками різної парності.....	115
2.10.3. С. Особливості власних значень та власних функцій.....	116
2.11. Теорія збурень першого порядку для ангармонічного осцилятора	120
2.11.1. А. Розв'язок рівняння Шредінгера методом теорії збурень	120
2.11.2. В. Перевірка точності збуреного розв'язку.....	126
2.11.3. С. Числовий розрахунок енергії основного збуреного стану.	128
2.11.4. D. Числовий розрахунок збуреного першого збудженого стану	130
2.11.5. E. Числовий розрахунок збурених власних значень для більшого збурення.....	132
2.12. Діамагнітні стани атома водню	136
2.12.1. Розкладання хвильових функцій за сферичним кулонівським базисом	136
2.12.2. Магнітоіндуковані поправки до інтенсивності ліній серії Лаймана.....	139
2.13. Чисельна реалізація задачі на власні значення для оболонкових моделей.....	144
2.13.1. А. Оболонкові моделі	144
2.13.2. В. Приведення радіального рівняння Шредінгера до одновимірного	146
2.13.3. С. Метод скінчених різниць	147
2.13.4. D. Реалізація чисельного розрахунку ядерних оболонок	150
Література.....	154

ВСТУП

Сьогодні створення нових матеріалів та пристроїв вимагає дуже детального опису поведінки частинок, який можливий лише на основі розгляду рівнянь квантової механіки. Більше того, сучасні технології практично неможливі без врахування квантових ефектів. Так, наприклад, компанія Intel у 2017 році демонструє вже друге покоління процесорів із 10-нанометровим технологічним процесом, а у 2018 році – концепт квантового комп'ютера (<https://www.ces.tech>: CES2018). З іншої сторони, вже довгий час закони квантової механіки успішно застосовуються для розробки та оптимізації напівпровідникових пристроїв електроніки, основ квантової криптографії та квантової телепортації, що зумовлює зацікавленість ними науковців.

Основна роль у підготовці кваліфікованих спеціалістів у галузі фізики відводиться базовим теоретичним курсам. Даний навчальний посібник по своїй структурі складається з двох частин, який у синтезі повинен дати студентам найповніше уявлення про застосування законів квантової механіки для розв'язання реальних задач із застосуванням можливостей універсального математичного пакету Maple. Мета даного посібника – дати студентам початкові відомості про середовище комп'ютерної математики Maple, навчити їх моделювати задачі квантової механіки різної складності на комп'ютері, виконувати широкий спектр математичних та аналітичних перетворень.

У першій частині посібника розглядаються загальні питання організації роботи середовища Maple і міститься короткий огляд основних можливостей системи та вбудованих функцій. Друга частина посібника присвячена розгляду конкретних задач квантової механіки та деяких суміжних питань. Деякі програми надаються у готовому вигляді, хоча можливе й самостійне програмування студентами.

При підготовці навчального посібника було взято за основу та адаптовано до використання напрацювання роботи А. Матросова [6] і В.В. Чернушкіна [18] при викладанні основ програмування у середовищі Maple та З. Флюгге [7] і Д. Гріффітса [19,20] щодо формулювання та методики розв'язання вибраних задач квантової механіки. Основою вибрано підхід, запропонований останнім (Д. Гріффітс [20]) у Школі математичних та фізичних наук університету Суссекс (Sussex University, UK).

Навчальний посібник може бути корисним як студентам, так і аспірантам, науково-педагогічним та інженерно-технічним працівникам фізичних, технічних та природничих профілів.

1. СЕРЕДОВИЩЕ МАТЕМАТИЧНИХ РОЗРАХУНКІВ MAPLE

1.1. Maple – універсальне середовище для забезпечення математичних розрахунків

Maple – система комп'ютерної математики, розрахована на широке коло користувачів. До недавнього часу її називали системою комп'ютерної алгебри, що вказувало на особливу роль символьних обчислень і перетворень, які здатна здійснювати ця система. Але така назва істотно звужує сферу застосування системи, оскільки вона здатна швидко і ефективно виконувати не тільки символьні, але й чисельні розрахунки, поєднуючи їх із засобами графічної візуалізації і підготовки електронних документів.

У міру свого поширення, математичний пакет Maple стає корисним для багатьох користувачів, які через обставини (робота, навчання, хобі) змушені займатися математичними обчисленнями та всім, що з ними пов'язано. А все це починається від розв'язування навчальних задач в університетах до моделювання складних фізичних об'єктів, систем і пристроїв, і навіть створення художньої графіки (наприклад, фракталів).

Maple – типова інтегрована система. Вона об'єднує в собі:

- потужну мову програмування (вона ж є мовою для інтерактивного спілкування з системою);
- редактор для підготовки і редагування документів і програм;
- сучасний багатовіконний користувацький інтерфейс з можливістю роботи в діалоговому режимі;
- потужну довідкову систему з багатьма тисячами прикладів;
- ядро алгоритмів і правил перетворення математичних виразів;
- чисельний і символьний процесори;
- систему діагностики;
- бібліотеки вбудованих і додаткових функцій;
- пакети функцій і підтримку деяких інших мов програмування й програм.

Основою для роботи з символьними перетвореннями в Maple є ядро системи. Воно містить велику кількість базових функцій і алгоритмів символьних перетворень. Є також основна бібліотека операторів, команд і функцій. Вбудовані у неї функції, як і функції ядра, можуть використовуватися без будь-якого попереднього декларування, інші ж, навпаки, потребують такого декларування. Крім того, є ще пакети, які можна підключити додатково (**packages**).

Додаткові функції з пакетів можуть застосовуватися після декларування підключення цього пакету за допомогою команди **with (name)**, де **name** – ім'я застосовуваного пакету. Загальна кількість функцій, з урахуванням вбудованих в ядро і розміщених в пакетах в системі Maple V R4 наближається до 2500, в реалізації R5 – до 2700, в Maple 6 і Maple 7

воно вже перевищує 3000. Реліз Maple 18 містить 10000 (на початок 2018 року). Це означає, що більшість задач можна розв'язувати в режимі безпосереднього діалогу з системою без використання будь-яких засобів програмування.

Maple має вхідну мову програмування високого рівня, орієнтовану на розв'язування математичних задач практично будь-якої складності. Вона служить для задавання системі питань або, інакше кажучи, задавання вхідних даних для подальшої їх обробки. Це мова відноситься до типу інтерпретатора і за своєю ідеологією нагадує Basic. І така схожість зовсім не є недоліком, а має величезну перевагу – адже саме з Basic почався справжній діалог користувача безпосередньо із комп'ютером! Вхідна мова має велику кількість заздалегідь визначених математичних і графічних функцій, а також велику бібліотеку, яку при необхідності можна підключити.

Крім того, Maple містить мову процедурного програмування – Maple-мову, що включає традиційні засоби структурування програм: оператори циклів, оператори умовних і безумовних переходів, оператори порівняння, логічні оператори, команди управління зовнішніми пристроями, функції користувача, процедури і т. д.

Maple-мова також включає в себе всі команди і функції вхідної мови, їй доступні всі спеціальні оператори та функції. Багато з них є вельми серйозними програмами, наприклад символічне диференціювання, інтегрування, розклад в ряд Тейлора, побудова складних тривимірних графіків і т. д.

Мовою реалізації системи Maple є мова Сі, якою написано ядро системи, що містить ретельно оптимізовані процедури. Більшість же функцій, які містяться в пакетах, написані на Maple-мові, завдяки чому їх можна модифікувати і навіть писати свої власні бібліотеки. За різними оцінками, лише від 5 до 10% засобів Maple створено на мові реалізації – все інше написано на Maple-мові.

Синтаксис структурних операторів мови Maple нагадує суміш Basic і Pascal. Це полегшує знайомство з ним для тих, хто має хоча б початковий досвід програмування цими мовами. За близькими до Basic правилами (і при допомозі загальноприйнятих математичних скорочень) виконується і введення математичних виразів в діалоговому режимі роботи з системою.

1.2. Інтерфейс користувача Maple

Розглянемо тепер основні елементи інтерфейсу системи Maple, основи її довідкової системи та деякі функції, які далі будемо використовувати при моделюванні розв'язування конкретних фізичних і математичних задач.

Як в усіх Windows-додатках, інтерфейс Maple має ряд характерних елементів, таких як рядок заголовку (згори); рядок головного меню;

головна панель інструментів; контекстна панель інструментів, вид якої залежить від режиму роботи з Maple; вікно для введення і редагування документів; рядок стану (внизу вікна). Призначений для користувача інтерфейс Maple дозволяє готувати документи, команди вхідної мови (з можливим перетворенням їх у природну математичну форму), що містять одночасно результати обчислень у вигляді звичайних математичних формул і графічних даних. Це забезпечує зрозуміле представлення початкових даних і результатів обчислень, а також зручність їх повторного використання. Слід відмітити і прекрасно реалізовану довідкову систему Maple. Здолавши перші труднощі спілкування з системою, користувач швидко засвоює систему довідки, яка дозволяє без будь-якої паперової документації отримати вичерпну інформацію про будь-який оператор функції або пакет (зрозуміло, англійською мовою).

1.3. Основи Maple

Після завантаження і запуску системи можна розпочати діалог з нею, використовуючи її оператори і функції (з параметрами) для створення і обчислення математичних виразів. Робота здійснюється в режимі інтерпретатора, тобто в стилі: "поставив питання, отримав відповідь". Питання і відповіді займають окремі блоки, що виділяються зліва квадратними дужками. Введення виразів здійснюється за звичайними правилами, спільними для всіх текстових редакторів. Знак фіксації кінця виразу ; (крапка з комою) вказує, що результат його обчислення повинен бути виведений на екран, а знак : (двокрапка) скасовує висновок і може використовуватися як розділовий знак при записі декількох виразів в одному рядку. Клавіші переміщення курсору дозволяють пересуватися по раніше введених рядках на екрані. Для закінчення введення питання і отримання відповіді необхідно натиснути клавішу Enter.

1.4. Стандартні функції ядра і бібліотеки Maple

Як у всіх сучасних мовах програмування високого рівня, основним засобом представлення даних в середовищі Maple є вирази і функції. Вирази будуються за загальними правилами з імен функцій, операцій, констант і змінних. Відразу звертаємо особливу увагу на те, що великі та малі літери в ідентифікаторах вважаються різними, тобто імена **Temp**, **temp**, **TEMP** позначають три різних об'єкти. Тип змінних зазвичай визначається під час першого звернення і його можна легко змінити. Для запису дійсних чисел використовується десяткова крапка, в іншому випадку число розглядається як ціле. Для запису операцій з числами використовуються традиційні позначення: **+**, **-**, *****, **/**, **^**, ******. Останні дві операції здійснюють піднесення до степеня. Пріоритет операцій також

традиційний і його можна змінити за допомогою круглих дужок, зокрема і багаторівневих:

`>2+2*20;`

`>(2+2)*20;`

42

80

Результат цілочисельних операцій Maple при можливості представляє у вигляді точного значення або виразу. Щоб отримати результат з плаваючою точкою, необхідно ввести у вхідний вираз параметр з плаваючою точкою:

`>2^100;`

267650600228229401496703205376

`>33^33;`

129110040087761027839616029934664535539337183380513

`>33.^33;`

.1291100401 10⁵¹

У ядро системи Maple вбудовані багаточисельні математичні функції, основні з яких представлені в табл. 1. Розглянемо кілька прикладів із наведених в табл. 1 функцій:

`>[factorial(10),10!];`

[3628800, 3628800]

`>iquo(234,5);`

46

`>irem(234,5);`

4

`>igcd(60,72);`

12

`>lcm(60,72);`

360

`>sin(Pi/4);`

$\frac{1}{2}\sqrt{2}$

`>cosh(11);`

cosh(11)

Таблиця 1. Основні математичні функції системи Maple.

sin – синус;	arcsin – арксинус;
cos – косинус;	arccos – арккосинус;
tan – тангенс;	arctan – арктангенс;
sec – секанс;	arcsec – арксеканс;
csc – косеканс;	arccsc – арккосеканс;
cot – котангенс	arccot – арккотангенс.
Factorial(n) – факторіал (альтернатива – n!);	argument – аргумент комплексного числа;
iquo(a,b) – цілочисельне ділення <i>a</i> на <i>b</i> ;	Lcm(a, b) – найменше спільне кратне;
irem(a, b) – залишок від ділення <i>a</i> на <i>b</i> ;	conjugate – комплексно-спряжене число;
polar – зображення в полярних координатах;	igcd (a,b) – найбільший спільний дільник;
floor – найбільше ціле, яке менше або рівне аргументу;	ceil – найменше ціле, більше або рівне аргументу;
signum(x) – знак <i>x</i> (-1 при $x < 0$; 0 при $x = 0$ та +1 при $x > 0$);	trunc – ціле, округлене до нуля;
log10 – логарифм з основою 10;	round – округлене значення числа;
sinh – гіперболічний синус;	Arcsinh – гіперболічний арксинус;
cosh – гіперболічний косинус;	Arccosh – гіперболічний арккосинус;
tanh – гіперболічний тангенс;	Arctanh – гіперболічний арктангенс;
sech – гіперболічний секанс;	arcsech – гіперболічний арксеканс;
csch – гіперболічний косеканс;	coth – гіперболічний котангенс;
log – логарифм із заданою основою	Abs – абсолютне значення числа;
exp – експонента;	Pi – число Π (π);
sqrt – квадратний корінь	frac – дробова частина числа;
arctan(y, x) = argument(x+I*y)	ln – натуральний логарифм;
Re – дійсна частина комплексного числа;	Im – уявна частина комплексного числа.

>cosh(11.0);

29937.07087

У Maple є можливість отримання посилання на останній отриманий результат за допомогою оператора **%**, а функція **evalf(f)** вказує, що розрахунок слід здійснювати чисельно при поданні з плаваючою точкою. Зокрема, для останнього прикладу можна записати:

>cosh (11);
evalf (%);

cosh(11)
29937.07087

і отримати такий самий результат.

Як вже було зазначено, цілочисельні обчислення Maple здійснює точно. Водночас, для операцій з плаваючою крапкою необхідно встановлювати точність. Робиться це за допомогою системної змінної **Digits**, яка за замовчуванням встановлюється в 10 знаків (у поточному поданні). Значення змінної **Digits** можна змінити вручну. Крім того, точність поточного результату функції **evalf** можна задати явно в другому аргументі:

```
>Pi;
evalf(%);
Digits:=15;
evalf(Pi);
Digits:=10;
evalf(Pi,40);
```

3.141592654
Digits := 15
3.14159265358979
Digits := 10

3.141592653589793238462643383279502884197

Відзначимо також, що це далеко не вичерпний список стандартних математичних функцій системи Maple, загальна кількість яких близька до 3000. Для отримання детальнішої інформації про стандартні функції можна звернутися до довідкової системи.

1.5. Символьні обчислення в Maple

Розглянемо основні операції символічної обробки математичних виразів, серед яких центральне місце займають потужні засоби аналітичних перетворень, програми розв'язування рівнянь і систем рівнянь, а також інші корисні операції символічної математики.

1.5.1. Аналітичні перетворення

Серед основних засобів здійснення аналітичних перетворень можна виділити підстановки, спрощення, розширення (розкриття дужок) і факторизацію (розкладання на множники) як такі, що найчастіше зустрічаються в науково-дослідній роботі.

Підстановки дозволяють замінити певну частину у заданому виразі іншим виразом. Наприклад,

```
>restart;
>a:=x^2+x^4+b;
```

$$a := x^2 + x^4 + b;$$

```
>subs(x=1,a);
subs(x=b^2,a);
subs(b=-x^2,a);
```

$$\frac{2+b}{b^4+b^8+b} x^4$$

Для спрощення виразів Maple містить функцію **simplify** – чи не найпотужнішу в системах символічної математики. Вона призначена для спрощення математичних виразів. Наприклад,

```
>simplify(x^2/x^5+x);
```

$$\frac{1+x^4}{x^3}$$

```
> simplify (sin(x)^2 + cos(x)^2);
```

1

Функція **simplify** – багатоцільова. Вона забезпечує спрощення математичних виразів, виконуючи безліч типових дій. У функцію **simplify** можна включати додаткові параметри. Докладніші відомості про функції **simplify** можна отримати в довідковій системі.

Функція **expand** «розширює» вираз **expr** і записується у вигляді:

```
expand (expr, expr1, expr2, .... exprn)
```

де **expr** – розширювальний вираз, **expr1**, **expr2**, ..., **exprn** – необов'язкові підвирази – опції. У більшості випадків ця функція особливо корисна для розкриття дужок у виразі:

```
>d:=(1+x)^4+(1-x)^5;
expand(%);
```

$$d := (1+x)^4 + (1-x)^5$$

$$2 - x + 16x^2 - 6x^3 + 6x^4 - x^5$$

Факторизація виразів може проводитися за допомогою функції **factor**:

```
>d2:=x^3+y^3;
factor(d2);
```

$$d2 = x^3 + y^3$$

$$(x + y)(x^2 + xy + y^2)$$

Підсумовування членів деякої послідовності можна здійснити за допомогою функції **sum**:

```
>sum('k^2', 'k'=0..4);
```

30

```
>sum('k^2', 'k'=0..n);
```

$$\frac{1}{3}(n+1)^3 - \frac{1}{2}(n+1)^2 + \frac{1}{6}n + \frac{1}{6}$$

```
>sum('k^2', 'k');
```

$$\frac{1}{3}k^3 - \frac{1}{2}k^2 + \frac{1}{6}k$$

```
>sum('a[k]*x^k', 'k'=0..4);
```

$$\begin{aligned} & (x^2 + x^4 + b)_0 + (x^2 + x^4 + b)_1 x + (x^2 + x^4 + b)_2 x^2 + (x^2 + x^4 + b)_3 x^3 + \\ & + (x^2 + x^4 + b)_4 x^4 \end{aligned}$$

```
> sum('a[k]*x^k', 'k'=0..n);
```

$$\sum_{k=0}^n a_k x^k$$

```
>sum('k/(k+1)', 'k'=0..n) = sum('k/(k+1)', 'k'=0..n);
```

$$\sum_{k=0}^n \frac{k}{k+1} = n+1 - \psi(n+2) - \gamma$$

```
>sum('1/k!', 'k'=0..infinity);
```

e

```
>sum('1/k^2', 'k'=1..infinity);
```

$$\frac{1}{6}\pi^2$$

```
>sum('k/(k+1)', 'k'=RootOf(x^3-2));
```

2

```
>sum('k^(3/2)', 'k'=1..infinity);
```

∞

Аналогічно, функцію **product** використовують для знаходження добутку членів будь-якої послідовності:

```
>product(k^2, k=1..4);
```

576

```
>product(k^2, k=1..n);
```

$$\Gamma(n+1)^2$$

>product(^2, k);

$$\Gamma(k)^2$$

>product(a[k], k=0..4);

$$\begin{aligned} & \left(x^2 + x^4 + b\right)_0 + \left(x^2 + x^4 + b\right)_1 x + \left(x^2 + x^4 + b\right)_2 x^2 + \left(x^2 + x^4 + b\right)_3 x^3 + \\ & + \left(x^2 + x^4 + b\right)_4 x^4 \end{aligned}$$

>product(a[k], k=0..n);

$$\prod_{k=0}^n \left(x^2 + x^4 + b\right)_k$$

>product(n+k, k=0..m) = product(n+k, k=0..m);

$$\prod_{k=0}^m (n+k) = \frac{\Gamma(n+m+1)}{\Gamma(n)}$$

>product(k, k=RootOf(x^3-2));

2

Функція **limit** обчислює границю виразу при заданій умові:

>limit(sin(x)/x, x=0);

1

>limit(exp(x), x=infinity);

∞

>limit(exp(x), x=-infinity);

0

>limit(1/x, x=0, real);

undefined

>limit(exp(x^2)*(1-erf(x)), x=infinity);

0

>limit(sin(x), x=0)=limit(sin(x), x=0);

$$\lim_{x \rightarrow 0} \sin(x) = 0$$

Диференціювання функції здійснюється за допомогою функції **diff**:

>diff(sin(x), x);

$$\cos(x)$$

`>diff(sin(x),y);`

$$0$$

`>diff(sin(x),x$3);`

$$-\cos(x)$$

`>diff(x*sin(cos(x)),x);`

$$\sin(\cos(x)) - x \cos(\cos(x)) \sin(x)$$

`>diff(tan(x),x);`

$$1 + \tan(x)^2$$

`>Diff(tan(x),x);`

$$\frac{d}{dx} \tan(x)$$

`>Diff(tan(x),x) = diff(tan(x),x);`

$$\frac{d}{dx} \tan(x) = 1 + \tan(x)^2$$

`>diff(f(x),x);`

$$\frac{d}{d(x)} f(x)$$

`>diff(f(x,y),x,y);`

$$\frac{d^2}{dydx} f(x,y)$$

`>diff(f(x,y),x,y) - diff(f(x,y),y,x);`

$$0$$

`>diff(g(x,y,z),x,z,z);`

$$\frac{d^2}{dz^2 dx} g(x,y,z)$$

Інтегрування функцій здійснюється за допомогою функції `int`:

`>int(sin(x),x);`

$$-\cos(x)$$

`>int(sin(x), x=0..Pi);`

$$2$$

```
>int(x/(x^3-1),x);
```

$$\frac{1}{3}\ln(x-1) - \frac{1}{6}(x^2+x+1) + \frac{1}{3}\sqrt{3}\arctan\left(\frac{1}{3}(2x+1)\sqrt{3}\right)$$

```
>int(exp(-x^2), x);
```

$$\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\operatorname{erf}(x)$$

```
>int(exp(-x^2)*ln(x), x=0..infinity);
```

$$-\frac{1}{4}\sqrt{\pi}\gamma - \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\ln(2)$$

```
>int(exp(-x^2)*ln(x), x);
```

$$\int e^{(-x^2)} \ln(x) dx$$

```
>series(%, x=0, 4);
```

$$(\ln(x) - 1)x + \left(-\frac{1}{3}\ln(x) + \frac{1}{9}\right)x^3 + O(x^5)$$

```
>int(%, x);
```

$$\frac{1}{2}\ln(x)x^2 - \frac{3}{4}x^2 - \frac{1}{12}x^4\ln(x) + \frac{7}{144}x^4 + O(x^6)$$

```
>int(exp(-x^2)*ln(x)^2, x=0..infinity);
```

$$\frac{1}{16}\pi^{(5/2)} + \frac{1}{8}\sqrt{\pi}\gamma^2 + \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\gamma\ln(2) + \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\ln(2)^2$$

1.5.2. Розв'язування рівнянь

Розв'язування лінійних і нелінійних рівнянь і нерівностей – ще одна важлива область математичного аналізу. Maple має потужні засоби для розв'язування рівнянь. Зокрема, для розв'язування лінійних і нелінійних рівнянь в аналітичному вигляді використовується досить універсальна і гнучка функція **solve (eqn, var)** або **solve ({eqn1, eqn2, ...}. {var1, var2, ...})**, де **eqn** – рівняння, що містить функцію ряду змінних, **var** – змінна, за якою шукають розв'язок, якщо під час запису **eqn** не використовується знак рівності або знак відношення, вважається, що **solve** шукає корені рівняння **eqn = 0**.

Функція **solve** намагається дати розв'язок в аналітичному вигляді. Це не означає, що її не можна використовувати для отримання коренів рівнянь в чисельному вигляді. Просто з цією метою доведеться використовувати функції **evalf** або **convert**.


```
>Solve (f = m * a, a);
```

$$\frac{f}{m}$$

```
>a:=x^2+x^4+b:
solve({f=m*a}, {a});
```

$$\left\{ x^2 + x^4 + b = \frac{f}{m} \right\}$$

```
>f:= proc(x)x-cos(x) end proc:
solve(f(x),x);
```

RootOf(_Z-cos(_Z))

```
>eq:=x^4-5*x^2+6*x=2;
```

$$eq := x^4 - 5x^2 + 6x = 2$$

```
>solve(eq,x);
```

$$1, 1, \sqrt{3} - 1, -1 - \sqrt{3}$$

```
>sols:= [solve(eq,x)];
```

$$sols := [1, 1, \sqrt{3} - 1, -1 - \sqrt{3}]$$

```
>sols[1];
```

1

```
>evalf(sols);
```

[1., 1., .732050808, -2.732050808]

```
>sols:= {solve(eq,x)};
```

sols:={1,3-1,-1-3}

```
>sols[1];
```

1

```
>subs( x=sols[1], eq );
```

2 2

```
>solve(x^4+x+1,x);
```

*RootOf(_Z^4 + _Z + 1,index = 1),RootOf(_Z^4 + _Z + 1,index = 2),
RootOf(_Z^4 + _Z + 1,index = 3), RootOf(_Z^4 + _Z + 1,index = 4)*

```
>evalf({%});
```

{.7271360845 - .9340992895 I, -.7271360845 + .4300142883 I,

$-.7271360845 - .4300142883I, .7271360845 + .9340992895 I$

Якщо необхідно знайти наближений числовий розв'язок рівняння на заданому інтервалі, то можна скористатися функцією **fsolve**:

```
>fsolve(tan(sin(x))=1,x);
```

.9033391108

```
>poly:= 23*x^5 + 105*x^4 - 10*x^2 + 17*x:
```

```
fsolve(poly,x,-1..1);
```

-.6371813185, 0.

```
>fsolve(poly,x,maxsols=3);
```

-4.536168981, -.6371813185, 0.

```
>q:=3*x^4-16*x^3-3*x^2+13*x+16:
```

```
fsolve(q,x,1..2);
```

1.324717957

```
>fsolve(q,x,2..5);
```

```
fsolve(q,x,4..8);
```

5.333333333

```
>fsolve(q,x,complex);
```

-.6623589786-.5622795121I, -.6623589786+.5622795121I,

1.324717957, 5.333333333

```
>f:=sin(x+y)-exp(x)*y=0:
```

```
g:=x^2-y=2:
```

```
fsolve({f,g},{x,y},{x=-1..1,y=-2..0});
```

{ x=-.6687012050, y=-1.552838698 }

Для розв'язування звичайного диференціального рівняння можна скористатися функцією **dfsolve**:

```
>odel:=diff(y(x),x)-y(x)^2+y(x)*sin(x)-cos(x);
```

$$odel := \frac{d}{dx} y(x) - y(x)^2 + y(x) \sin(x) - \cos(x)$$

```
>ans1:=dsolve(odel);
```

$$ans1 := y(x) - \sin(x) - \frac{e^{-\cos(x)}}{C1 + \int e^{-\cos(x)} dx}$$

Для розв'язування диференціальних рівнянь в частинних похідних потрібно підключити зовнішній модуль **PDEtools**:

```
>restart;
```

```
>with(PDEtools);
PDE:=x*diff(f(x,y),y)-diff(f(x,y),x)=f(x,y)^2*g(x)/h(y);
ans:=pdsolve(PDE);
```

[PDEplot build casesplit charstrip dchange dcoeffs declare difforder, dpolyform dsubs mapde separability splitstrip splitsys undeclare]

$$PDE := x \left(\frac{d}{dy} f(x, y) \right) - \left(\frac{d}{dx} f(x, y) \right) = \frac{f(x, y)^2 g(x)}{h(y)}$$

$$ans := f(x, y) = \frac{1}{\int \frac{g(-a)}{h\left(-\frac{1}{2}a^2 + y + \frac{1}{2}x^2\right)} da + _Fl\left(y + \frac{1}{2}x^2\right)}$$

1.5.3. Графіки Maple

Система MAPLE має дуже широкі можливості для графічного представлення математичної інформації у вигляді двовимірних і тривимірних графіків. Розглянемо найпростіші з цих засобів. Щоб побудувати двовимірний графік функції однієї змінної можна, наприклад, записати:

```
>F:=(x)->x^2*cos(x);
plot(F(x),x=-5..5);
```

$$F := x \rightarrow x^2 \cos(x)$$

Результат виконання команди **plot** представлений на рис. 1.

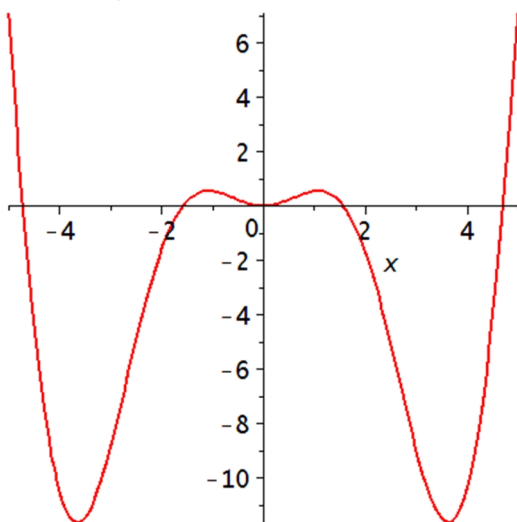


Рис. 1.

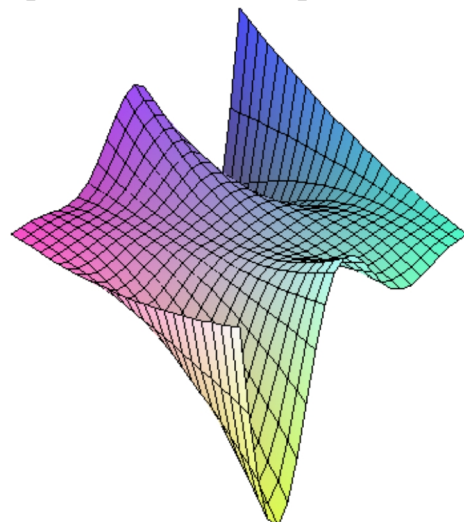


Рис. 2.

Щоб побудувати тривимірний графік функції двох змінних, можна скористатися функцією **plot3d**:

```
>F3:=(x,y)->cos(x)*(x+y)^2;
plot3d(F3(x,y),x=-5..5,y=-5..5);
```

$$F3 := (x, y) \rightarrow \cos(x)(x + y)$$

Результат виконання цієї команди представлений на рис. 2.

1.6. Мова програмування Maple

Розглянемо основні конструкції Maple-мови програмування. Зокрема, зупинимося на способах задання функцій користувача, реалізації керуючих конструкцій (розгалуження і цикли), декларування процедур.

Для реалізації структурності алгоритму на Maple-мові використовуються керуючі конструкції – розгалуження і цикли.

1.6.1. Умовне розгалуження

Для підготовки програм розгалуження у мові програмування Maple включений оператор **if**, що дозволяє створювати таку конструкцію:

```
if <Умова порівняння> then <Елементи>
| elif <Умова порівняння> then <Елементи> |
| else <Елементи> |
fi:
```

У вертикальних рисках | | наведені необов'язкові елементи даної конструкції. На практиці найчастіше використовуються наступні два види умовних виразів:

```
if <Умова> then <Елементи 1> fi;
```

– якщо **Умова** виконується, то виконуються **Елементи 1**, інакше нічого не виконується;

```
if <Умова> then <Елементи 1> else <Елементи 2> fi;
```

– якщо **Умова** виконується, то виконуються **Елементи 1**, інакше виконуються **Елементи 2**.

В заданні умов використовуються будь-які логічні конструкції з знаками порівняння (<, <=, >, >=, =, <>) і логічні оператори **and**, **or** і **not**, конструкції з якими повертають логічні значення **true** і **false**.

Розглянемо такий простий приклад:

```
>p:=-5;
if p<0 then print('Negative') fi;
```

p:=-5
Negative

```
>p:=1;
if p<0 then print('Negative') fi;
```

p:=1

Наведемо ще один приклад, який демонструє загальнішу форму задання конструкції **if-then-else-fi**:

```
>p:=77;
if p <0 then print('Negative')else print ('Positive')
fi;
```

p:= 7
Positive

На жаль, функції на базі конструкції **if** не завжди коректно обробляються функціями символічної математики. Тому слід ретельно контролювати отримані в цьому випадку результати.

1.6.2. Цикли **for** і **while**

Часто є необхідність циклічного повторення виконання виразів задану кількість разів або доти, поки виконується певна умова. Maple має узагальнену конструкцію циклу, яку можна задати у такий спосіб:

```
|for <name>| |from <expr1>| |to <expr3>| |by <expr2>|
|while <expr4>|do statement sequence> od;
```

Тут **name** – ім'я керуючої змінної циклу, **expr1**, **expr2** і **expr3** – вирази, що задають початкове значення, кінцеве значення і крок зміни змінної **name**, **expr4** – вираз, що задає умову, поки цикл (набір об'єктів між словами **do** і **od**) буде виконуватися.

В ході виконання циклу керуюча змінна змінюється від значення **expr1** до значення **expr2** з кроком, заданим **expr3**. Якщо блок **by<expr2>** відсутній, то керуюча змінна буде змінюватися з кроком +1 при **expr1 < expr2**.

Наступний приклад показує задання циклу, у якому змінна циклу змінюється від значення 1 до 10 з кроком 2:

```
>for i from 1 to 10 by 2 do print(i) od;
```

1
3
5
7
9

Крок може бути і негативним, але якщо поставити явно нездійсненну умову, наприклад, **expr1 > expr2** і позитивне значення кроку, то цикл виконуватися не буде. Цикл можна перервати за допомогою додаткового блоку **while <expr4>**. Цикл з таким блоком виконується до кінця або доти, поки умова **expr4** – істинна. Таким чином, конструкція циклу на мові програмування Maple увібрала в себе основні конструкції циклів **for** і **while**. Є ще одна, специфічна, конструкція циклу:

```
|for <name>| |in <expr1>| |while <expr2>|do statement
sequence> od:
```

Тут **expr1** задає список значень, які буде приймати керуюча змінна **name**. Цикл буде виконуватися, поки не буде вичерпано список і поки виконується умова, задана виразом **expr2**.

Також відзначимо, що можлива спрощена часткова конструкція циклу типу **while**:

```
while expr do statseq od:
```

Іноді є необхідність пропустити певне значення змінної циклу. Для цього використовується оператор **next** (наступний). Інший оператор – **break** – перериває виконання фрагмента програми (або циклу). Дію цих операторів можна пояснити на прикладі:

```
>for i from 1 to 100 by 2 do
if i=5 then next fi;
print(i);
if i=7 then break fi;
od;
```

1
3
7

1.7. Користувацькі функції

За допомогою описаних керуючих конструкцій можна писати програми будь-якої складності. Однак, для реалізації модульної структури алгоритму потрібне створення автономних модульних компонентів – функцій і процедур.

Основний спосіб завдання функцій користувача базується на застосуванні функціонального оператора. При цьому використовується наступна конструкція:

```
name: = (x, y, ...) → expr;
```

Після цього виклик функції здійснюється у вигляді **name (x.y,...)**, де **(x.y,...)** – список формальних параметрів функції користувача з ім'ям **name**. Змінні, зазначені в списку формальних параметрів, є локальними. При підстановці на їх місце фактичних параметрів, вони зберігають свої значення тільки в тілі функції.

```
>restart;
```

```
>m:=(x,y)→sqrt(x^2+y^2);
```

$$m := (x, y) \rightarrow \sqrt{x^2 + y^2}$$

```
>m(3,4);
```

5

```
>m(1,1);
m(1,1.0);
```

$\sqrt{2}$
1.414213562

Ще один спосіб задання функції користувача базується на застосуванні функції `unapply`: `name:=unapply(expr.var1.var2,...)`. Нижче наведено приклад такого способу оголошення функції користувача:

```
>m2:=unapply(sqrt(x^2+y^2),x,y);
```

$$m2 := (x, y) \rightarrow \sqrt{x^2 + y^2}$$

```
>m2(2,1);
```

$\sqrt{5}$

1.8. Процедури Maple

Поряд із функціями користувача, найважливішими елементами структурного програмування в Maple є процедури і процедури-функції. Процедурою називають модуль програми, що має самостійне значення і виконує одну або кілька операцій, зазвичай досить складних і які відрізняються від операцій, що виконуються вбудованими операторами та функціями. Кожна процедура має своє унікальне ім'я і список параметрів (він може бути порожнім). Процедури викликають так само, як вбудовані функції – зазначенням їх імені зі списком фактичних параметрів. При цьому процедури, на відміну від процедур-функцій, як правило, не повертають будь-яких значень після свого виконання, хоча можуть привласнювати значення змінних, які входять у них. Процедури-функції у відповідь на звернення до них, повертають деяке значення. Вони є ніби новими функціями, які задаються користувачем. Описані раніше функції користувача фактично є процедурами-функціями з дещо спрощеною структурою. Найпростіша форма завдання процедури наступна:

```
name:=proc(Параметри)
Тіло процедури
end;
```

Параметри процедури задаються перерахуванням імен змінних, наприклад, `proc(x)` або `proc(x,y,z)`. За допомогою знака `::` після імені змінної можна визначити її тип, наприклад, через задекларування `prog(n::Integer)` визначається, що змінна `n` є цілочисельною. При виклику процедури виразом виду

name (фактичні_параметри);

фактичні параметри підставляються на місце формальних. Невідповідність фактичних параметрів типу заданих змінних веде до повідомленням про помилку і до відмови від виконання процедури.

Процедури, які повертають значення результату у відповідь на звернення до них, багато в чому тотожні з функціями. Будемо називати їх процедурами-функціями. Зазвичай процедура повертає значення останнього виразу в її тілі або виразу, відзначеного для повернення спеціальним оператором **RETURN**.

Як приклад, розглянемо процедуру обчислення модуля комплексного числа **z** – в даному випадку це єдиний параметр процедури:

```
>modc:=proc(z)evalf(sqrt(Re(z)^2+Im(z)^2));  
return%;end;
```

```
modc := proc (z)evalf (sqrt ℑ(z)^2 + ℑ(z)^2); return % end proc
```

```
>modc(I+6);
```

6.082762530

Параметром оператора **RETURN** може бути будь-який вираз. У Maple не прийнято виділяти процедури-функції в якийсь окремий клас. Діє правило – якщо не використаний оператор **RETURN**, процедура повертає значення останнього виразу в її тілі. Для усунення виведення значень виразів всередині процедури-функції, після них просто треба записати знак двокрапки.

1.9. Робота з векторами і матрицями в Maple

Елементи векторів і матриць є індексованими змінними, тобто місце кожного елемента вектора визначається його індексом, а у матриці – двома індексами. Зазвичай їх узагальнено позначають як **i** (номер рядка матриці або порядковий номер елемента вектора) і **j** (номер стовпчика матриці). Можливими є операції виклику потрібного елемента і присвоєння йому нового значення:

- **V[I]** – виклик **i**-го елемента вектора **V**;
- **M[i,j]** – виклик елемента матриці **M**, розташованого на **i**-му рядку в **j**-му стовпці;
- **•V[i]:=x** – присвоєння нового значення **x** **i**-му елементу вектора **V**;
- **M[i,j]:=x** – присвоєння нового значення **x** елементу матриці **M**.

1.10. Засоби обробки матриць Maple

За структурою вектори і матриці подібні до списків, але не повністю ототожнюються з ними. У цьому можна переконатися за допомогою таких прикладів, в яких функція **type** використовується для контролю типів множинних об'єктів (векторів і матриць):

```
>restart;
```

```
>M1:=[1,2,3,4];type(M1,vector);
```

```
M1:=[1,2,3,4]
false
```

```
>V:=convert(M1,vector);
type(V,vector);
```

```
V:=[1,2,3,4]
true
```

```
>M2:=[[1,2],[3,4]]; M:=convert(M2,matrix);
type(M2,matrix); type(M,matrix);
```

```
M2:=[[1,2],[3,4]]
```

$$M := \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

```
false
true
```

Використовуючи функцію перетворення даних **convert**, можна перетворювати одновимірні списки в вектори, а двовимірні – в матриці. Функція **type** використовується в наступних формах: **type(V,vector)** – тестує аргумент **V** і повертає **true**, якщо **V** – вектор, і **false** в іншому випадку; Аналогічно, **type(M,matrix)** – тестує аргумент **M** і повертає **true**, якщо **M** – матриця, і **false** в іншому випадку. Тут параметри **vector** і **matrix** використовуються для вказівки того, який тип об'єкта перевіряється.

Важливе значення систем комп'ютерної алгебри, яке стосується і Maple, полягає в можливості виконання аналітичних (символьних) операцій над векторами і матрицями.

Наведемо приклади операцій над векторами:

```
>evalm(V);
```

```
[1,2,3,4]
```

```
>V[2]:=77;
```

```
V2:=77
```

```
>evalm(V);
evalm(3*V);
```

```
[1,77,3,4]
[3,231,9,12]
```

У цих прикладах використовується функція `evalm(M)`, що здійснює обчислення матриці або вектора **M**.

Над матрицями з чисельними елементами можна виконувати різноманітні операції. Нижче наведені основні з них:

```
>evalm(M);
evalm(M^2);
```

```
[1 2]
[3 4]
```

```
[7 10]
[15 22]
```

```
>M4:=evalm(M^(-1));
```

```
[-2  1]
[ 3 -1]
[ 2  2]
```

```
>evalm(M4*M);
```

```
[1 0]
[0 1]
```

Аналогічно можна здійснювати символічні операції над векторами і матрицями:

```
>S1:=array(1..2,1..2,[[a1,b1],[c1,d1]]);
S2:=evalm(S1^2);
```

$$S1 := \begin{bmatrix} a1 & b1 \\ c1 & d1 \end{bmatrix}$$

$$S2 := \begin{bmatrix} a1^2 + b1c1 & a1b1 + b1d1 \\ c1a1 + d1c1 & b1c1 + d1^2 \end{bmatrix}$$

Серед інших функцій, для роботи з матрицями корисно звернути увагу на функцію `map`, яка застосовує задану операцію (наприклад, функції диференціювання `diff` і інтегрування `int`) до кожного елемента матриці.

Приклад такого типу є диференціювання матриці:

```
>S3:=array(1..2,1..2,[[cos(x),sin(x)],[cos(x),-sin(x)]]); S4:=evalm(S3^2); map(diff,S4,x);
```

$$S3 := \begin{bmatrix} \cos(x) & \sin(x) \\ \cos(x) & -\sin(x) \end{bmatrix}$$

$$S4 := \begin{bmatrix} \cos(x)^2 + \sin(x)\cos(x) & \sin(x)\cos(x) - \sin(x)^2 \\ \cos(x)^2 - \sin(x)\cos(x) & \sin(x)\cos(x) + \sin(x)^2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -2\sin(x)\cos(x) + \cos(x)^2 - \sin(x)^2 & -\sin(x)\cos(x) + \cos(x)^2 - \sin(x)^2 \\ -2\sin(x)\cos(x) - \cos(x)^2 + \sin(x)^2 & +\cos(x)^2 - \sin(x)^2 + 2\sin(x)\cos(x) \end{bmatrix}$$

Як результат, одержують матриці, кожен елемент яких представлений похідною або інтегралом. Аналогічно, можна виконувати над матрицями й інші досить складні перетворення.

1.11. Можливості модулів **Linalg** і **LinearAlgebra**

У ядро Maple, як вже зазначалося, введені мінімально необхідні засоби для вирішення завдань лінійної алгебри. Основну роль в їх реалізації відведено пакетам, які можна підключити додатково. Основним з них є пакет розв'язування задач лінійної алгебри **Linalg**. Це один із найбільших і найпотужніших пакетів для розв'язування задач лінійної алгебри. Він містить понад сто функцій, повний перелік яких можна отримати за допомогою такої команди:

```
>With (linalg);
```

З деталями синтаксису (досить різноманітного) для кожної з функцій пакету можна ознайомитися в довідковій системі Maple. Для цього достатньо використовувати команду

```
> ? name;
```

де **name** – ім'я функції.

В останні роки розробники систем символічної математики усвідомили, що мала швидкість виконання векторних і матричних операцій при розв'язуванні задач лінійної алгебри спричиняє втрату помітної частини ринку систем комп'ютерної математики. Тому в нових реалізаціях систем Maple і MATLAB зроблено акцент на використанні давно апробованих швидких алгоритмів лінійної алгебри, запропонованих творцями Number Algorithm Group (NAG). Ці алгоритми здавна застосовуються на великих ЕОМ і суперкомп'ютерах, забезпечуючи прискорення численних матричних операцій від декількох разів до декількох десятків разів. У Maple використання алгоритмів NAG є однією з перших відмінних рис нових версії системи. Воно реалізується новим пакетом **LinearAlgebra**. Для його завантаження використовуються такі команди:

```
>restart;
with (LinearAlgebra);
```

Багато функцій цього пакету повторюють за призначенням функції старішого пакету **linalg**, але, на відміну від них, орієнтовані на чисельні розрахунки в форматі обробки дійсних чисел, характерному для комп'ютерної платформи.

Детальнішу інформацію про роботу в системі Maple, а також про використання цього середовища в різних областях фізико-математичних досліджень можна отримати у спеціальній літературі (див., наприклад, [1] – [6]).

1.12. Розрахунок коефіцієнтів теорії кутових моментів

При розгляді багатьох задач квантової механіки виникає необхідність розрахунку коефіцієнтів теорії кутових моментів. Вбудованих засобів для здійснення таких розрахунків Maple не має. Тому далі розглянемо один з варіантів створення таких функцій, який розроблений Чернушкіним В.В. і під назвою AngleMoment міститься у відкритому доступі за адресою:

www.tchernouchkine.narod.ru/maple/programs/anglemoment.m.

```
># The ungle moments
restart;

> kron := (i,j) -> if i=j then 1 else 0 fi;

> ph:=(a,n)->product(a+k,k=0..n-1);

> Way:=(J)->sqrt(2*J+1);

> Faza:=(x)->(-1)^x;

> # (1-64)

> Clb:=(j1,m1,j2,m2,j3,m3)->

> if (m1+m2-m3)<>0 or abs(m1)>j1 or abs(m2)>j2 or
abs(m3)>j3 then 0

> else #m condition

> if abs(j1-j2)<=j3 and abs(j1+j2)>=j3 then

> nmin:=0;

> nmin:=max(nmin,j2-j3-m1);

> nmin:=max(nmin,j1-j3+m2);

> nmax:=min(j2+m2,j1+j2-j3);

> nmax:=min(nmax,j1-m1);
```

```

> a:=sqrt((2*j3+1)*(j1+j2-j3)!*(j3+j1-j2)!*(j3+j2-
j1)!/(j1+j2+j3+1)!);
> b:=sum(' (-1)^n*sqrt( (j1+m1)!*(j1-m1)!*(j2+m2)!*(j2-
m2)!*(j3+m3)!*(j3-m3)!)/(n!*(j1+j2-j3-n)!*(j1-m1-
n)!*(j2+m2-n)!*(j3-j2+m1+n)!*(j3-j1-m2+n)! )'
, 'n'=nmin..nmax );
> a*b
> else
> 0
> fi
> fi;
> W3jm:=(j1,m1,j2,m2,j3,m3)->
> (-1)^(j1-j2-m3)/sqrt(2*j3+1)*Clb(j1,m1,j2,m2,j3,-m3);
> #(2-10)-(2-11)
> W6j:=(j1,j2,j12,j3,j,j23)->
> if (abs(j1-j2)>j12) or ((j1+j2)<j12) or (abs(j3-
j)>j12) or ((j3+j)<j12) or (abs(j3-j2)>j23) or
((j3+j2)<j23) or (abs(j1-j)>j23) or ((j1+j)<j23) then
> 0
> else
> s0:=Way(j)*Way(j)*Way(j12)*Way(j23)*Faza(j1+j2+j3+j);
s1:=0;
for m1 from -j1 to j1 do
for m2 from -j2 to j2 do
for m3 from -j3 to j3 do
m12:=m1+m2;
m:=m12+m3;
m23:=m2+m3;
s1:=s1+Clb(j1,m1,j2,m2,j12,m12)*Clb(j12,m12,j3,m3,j,m)*C
lb(j1,m1,j23,m23,j,m)*Clb(j2,m2,j3,m3,j23,m23);
od;od;od;
W6j:=simplify(s1/s0);
> fi ;
> # (2-18)
> W9j:=(j11,j21,j31,j12,j22,j32,j13,j23,j33)->

```

```

> if (abs(j11-j12)>j13) or ((j11+j12)<j13) or (abs(j21-
j22)>j23) or ((j21+j22)<j23) or (abs(j31-j32)>j33) or
((j31+j32)<j33) or (abs(j11-j21)>j31) or ((j11+j21)<j31)
or (abs(j12-j22)>j32) or ((j12+j22)<j32) or (abs(j13-
j23)>j33) or ((j13+j23)<j33) then
> W9j:=0
> else
>sd0:=Way(j33)*Way(j33)*Way(j31)*Way(j32)*Way(j13)*Way(j
23);
sd1:=0;
for m11 from -j11 to j11 by 1 do
for m12 from -j12 to j12 by 1 do
for m21 from -j21 to j21 by 1 do
for m22 from -j22 to j22 by 1 do
m13:=m11+m12;
m31:=m11+m21;
m23:=m21+m22;
m33:=m13+m23;
m32:=m33-m31;
#m22:=m32-m12;
sd1:=sd1+Clb(j11,m11,j12,m12,j13,m13)*Clb(j21,m21,j22,m2
2,j23,m23)*Clb(j13,m13,j23,m23,j33,m33)*Clb(j11,m11,j21,
m21,j31,m31)*Clb(j12,m12,j22,m22,j32,m32)*Clb(j31,m31,j3
2,m32,j33,m33);
od;od;od;od;
W9j:=simplify(sd1/sd0);
fi;

>W9j(1/2,3/2,1,3/2,5/2,1,1,1,2);

> simplify(%);
W9j(1/2,3/2,1,3/2,5/2,1,1,1,2);

> simplify(W9j(1,1,2,1/2,1/2,0,1/2,1/2,2));
simplify(W9j(1,1,2,1/2,1/2,0,1/2,3/2,2));
simplify(W9j(1,1,2,1/2,1/2,0,3/2,1/2,2));
simplify(W9j(1,1,2,1/2,1/2,0,3/2,3/2,2));

> simplify(W9j(1,1,2,1/2,1/2,0,3/2,1/2,2));
simplify(W9j(1,2,2,1/2,1/2,0,3/2,5/2,2));

> W6j(1,1,1,1,1,1);

> W6j(1,1,1,1/2,1/2,1/2);

> W6j(1,1,1,1/2,1/2,3/2);

```

```
> Clb(1,1,5,0,4,1);
```

```
> Clb(1,1,5,0,4,1);
```

```
> Clb(1,1,3,0,3,1);
```

```
> Clb(1,1,5,0,6,1);
```

Для визначеності будемо вважати, що файл `anglemoment.m` доступний і знаходиться в кореневому каталозі диска C: В цьому випадку для підключення пакету `AngleMoment` до програми, в ній необхідно виконати наступну послідовність команд:

```
>read(`c: / anglemoment.m`);
with (AngleMoment);
```

Після цього виводиться список завантажених підпрограм.

```
[Clb, Faza, W3jm, W6j, W9j, Way, kron, ph]
```

які можуть бути розділені на основні та допоміжні. Опис цих функцій міститься в табл. 2 і 3.

Таблиця 2. Основні функції пакета `AngleMoment`

Ім'я	Формат	Значення	Призначення
<code>Clb</code>	<code>Clb(j1,m1,j2,m2,j3,m3)</code>	$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 m_3}$	Коефіцієнти Клебша-Гордана
<code>W3jm</code>	<code>W3jm(j1,m1,j2,m2,j3,m3)</code>	$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix}$	3jm-символи Вігнера
<code>W6j</code>	<code>W6j(j1,j2,j3,l1,l2,l3)</code>	$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{bmatrix}$	6j-символи Вігнера
<code>W9j</code>	<code>W9j(j11,j12,j13,j21,j22,j23,j31,j32,j33)</code>	$\begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{bmatrix}$	9j-символи Вігнера

Після успішного завантаження зовнішнього модуля, підключення функції можна використовувати поряд зі стандартними функціями системи Maple. Наприклад,

```
>Clb(1,1,1,1,2,2);
```

```
>Clb(1,1,2,1,2,2);
```

$$\frac{1}{6}\sqrt{6}\sqrt{2}$$

```
>W6j(1,1,1,1/2,1/2,1/2);
```

$$-\frac{1}{3}$$

```
>W9j(1,1,1,1,2,1,1,1,2);
```

$$\frac{1}{45}$$

Таблиця 3 Допоміжні функції пакета *AngleMoment*

Ім'я	Формат	Значення
ph	ph()	$(a)_k = \prod_{k=0}^{n-1} (a+k)$
Way	Way(j)	$\sqrt{2j+1}$
kron	kron(i,j)	$\delta_y := \begin{bmatrix} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{bmatrix}$
Faza	Faza(n)	$(-1)^n$

Розрахункові формули для цих функцій широко відомі і детально описані в спеціальній літературі (див., наприклад, [8], [9], [10]). Немає необхідності приводити в даній роботі вихідні тексти функцій модуля *AngleMoment*, оскільки в системі *Maple* користувач може викликати виведення лістингу будь-якої процедури, написаної на мові *Maple*. Попередньо потрібно зробити відповідні налаштування інтерфейсу системи за допомогою команди

```
>interface(verboseproc=2, prettyprint=1, version);
```

після чого перегляд лістингу викликається за допомогою команди **print**:

```
print(Clb);
```

або

```
print(sin);
```

Виняток з цього правила становить незначне число процедур і функцій системи *Maple*, написаних на інших мовах (як правило, C, Fortran) і включених в систему *Maple* в скомпільованому вигляді.

2. РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ В СЕРЕДОВИЩІ MAPLE

У розділі розглядається застосування математичного середовища Maple для розв'язання задач квантової механіки. Підбірку задач виконано на основі збірників З. Флюгге [7] та Д. Гріффітса [19, 20].

Оскільки, метою даного навчального посібника, є, перш за все, розв'язок квантово-механічних задач, то у ньому наведено вичерпні приклади їх розв'язання. Зокрема, наведено такі типові задачі квантової механіки, як «Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера», «Рівняння Шредінгера для довільного потенціалу», «Властивості хвильових функцій», «Квантова механіка частинки в прямокутній потенціальній ямі», «Напівпроникна перегородка», «Рух частинки через потенціальний бар'єр», «Віртуальні рівні», «Гармонійний осцилятор», «Діамагнітні стани атома водню», «Періодичний потенціал», «Квантова механіка вільних частинок», тощо. Для користування навчальним посібником необхідні початкові знання положень квантової механіки та уміння оперувати ними.

Виклад деяких розв'язків слідує методиці, наведеній у [18], [20] та [21]. Для реалізації програм, які записано для частини розв'язків, слід використовувати пакет Maple (реліз 15 або вище). Проте, кожен окремий рядок програми може бути реалізований і старішими версіями. Для деяких задач уся програма може бути реалізована старішими версіями. Важливо, що для розв'язання задач наводяться приклади команд мови програмування Maple, які задають правильне введення даних, дозволяють записати диференціальні рівняння чи побудувати графічний матеріал.

Із особливостей посібника слід відзначити те, що користувач може не лише послідовно виконати всі кроки для отримання правильного розв'язку, але й самостійно задавати початкові умови, змінювати вихідні дані, коригувати виведення на екран кінцевих графічних результатів. Таким чином, одночасно із розумінням законів квантової механіки, засвоюються методи коректного задання умов та отримання достовірних результатів.

2.1. Властивості хвильової функції

2.1.1. А. Хвильова функція

Рух класичної частинки по траєкторії повністю описується другим законом Ньютона

> **Diff(m*diff(x(t),t),t)=Sum(F);**

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(m \left(\frac{d}{dt} x(t) \right) \right) = \sum F.$$

Суть квантової механіки полягає в тому, що точний опис руху для мікрочасток неможливий, але для них можна застосувати ймовірнісний опис. Зокрема, положення квантово-механічної частинки можна задати з допомогою густини ймовірності $P(x,t)$. Зміст цього опису полягає в тому, що в момент часу t ймовірність знаходження частинки між точками x та $(x+dx)$ дорівнює $P(x,t)dx$. У квантовій механіці стверджують, що густина ймовірності $P(x,t)$ є квадратом модуля комплексної функції $\psi(x,t)$, яку називають "хвильовою функцією"

$$> \text{Eq(A1)} := P(x,t) = |\psi(x,t)|^2;$$

$$\text{Eq(A1)} := P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$$

У квантовій механіці хвильова функція $\psi(x,t)$ задовольняє так зване рівняння Шредінгера

$$> \text{Eq(A2)} := i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t);$$

$$\text{Eq(A2)} := i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) \right)}{m} + V(x)\psi(x,t).$$

Ці два твердження, рівняння (A1) та (A2), є просто здогадками австрійського фізика Ервіна Шредінгера. Проте цей здогад виявився вражаюче вдалим у поясненні широкого спектра фізичних явищ, які класична фізика не здатна пояснити, наприклад, що дискретність енергетичних рівнів в атомах призводить до лінійчатого спектра випромінювання, тощо. Незважаючи на те, що деякі прогнози квантової механіки протирічать інтуїтивно зрозумілим, квантова механіка узгоджується з усіма експериментальними фактами. Переконаємося, що вищезазначені два твердження справді призводять до послідовної теорії, тобто, перевіримо, чи рівняння (A1) і (A2) мають сенс. Ймовірність повинна бути додатнім числом у інтервалі від 0 до 1; якщо це 0, то подія неможлива, а якщо це 1, то вона – вірогідна. Рівняння (A2) – правильне твердження, тому що квадрат модуля будь-якого комплексного числа завжди додатній. Отже, ми можемо сказати

$$> P(x,t) dx = 0, \quad \text{means that the particle is not between } x \text{ and } x+dx.$$

$P(x,t)dx = 0$, means that the particle is not between x and $x + dx$.

$$> P(x,t) dx = 1, \quad \text{means that the particle with certainty is between } x \text{ and } x+dx.$$

$$P(x,t)dx = 1,$$

means that the particle with certainty is between x and $x + dx$.

Якщо застосувати ці положення до скінчених інтервалів, наприклад, для x у проміжку між a і b , то потрібно інтегрувати $P(x,t)$ у цьому інтервалі

> Int(P(x,t),x=a..b) = 0,` means that the particle is not between a and b.`;

$$\int_a^b P(x,t)dx = 0, \text{ means that the particle is not between a and b.}$$

> Int(P(x,t),x=a..b) = 1,` means that the particle with certainty is between a and b.`;

$$\int_a^b P(x,t)dx = 1,$$

means that the particle with certainty is between a and b.

Якщо описувати одновимірний рух частинки, наприклад вздовж вісі x , то єдине, що відомо напевно, полягає у тому, що частинка знаходиться десь між $-N$ і N . Отже, густина ймовірності, інтегрована по всій осі x , повинна бути 1

> Int(P(x,t),x=-infinity..infinity) = 1;

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = 1.$$

Для хвильової функції частинки це означає

> Eq(A3):=int(abs(psi(x,t))^2, x=-infinity..infinity) = 1;

$$Eq(A3) := \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1.$$

Отже, хвильова функція $\psi(x,t)$ повинна задовольняти умову нормування, а саме (A3). Тепер розглянемо кілька прикладів хвильових функцій і перевіримо чи можна їх нормувати.

Наприклад, хвильова функція – парабола

> Eq(A4):=psi(x,t)=x^2; plot(rhs(%),x=-3..3);

$$Eq(A4) := \psi(x,t) = x^2$$

(рис. 3).

Легко бачити, що x^2 розбіжна на нескінченності і, отже, її квадрат не може бути проінтегрований до нескінченності

**>subs(Eq(A4),lhs(Eq(A3)))=
eval(subs(Eq(A4),lhs(Eq(A3))));**

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x^2|^2 dx = \infty.$$

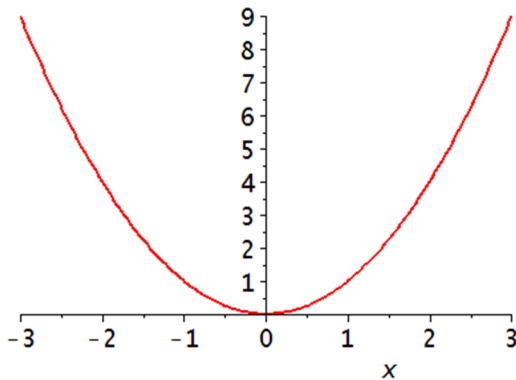


Рис. 3.

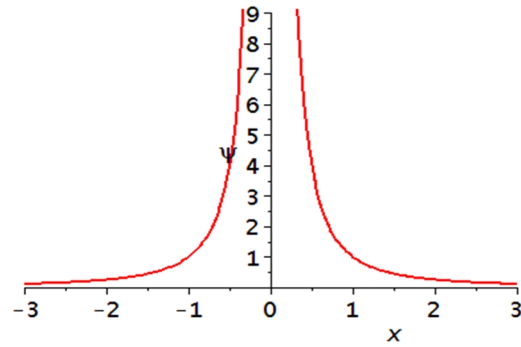


Рис. 4.

Розглянемо, наприклад, функцію, яка спадає на нескінченності як $1/x^2$

```
> Eq(A5):=psi(x,t)=1/x^2; plot(rhs(%),x=-3..3,psi=0..9);
```

$$Eq(A5) := \psi(x, t) = \frac{1}{x^2}$$

(рис. 4).

Ця функція розбігається при $x=0$, і вона інтегрується у цій точці. Отже, дана функція також не задовольняє рівняння (A3)

```
>subs(Eq(A5),lhs(Eq(A3)))=eval(subs(Eq(A5),lhs(Eq(A3))));
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{1}{x^2} \right|^2 dx = \infty.$$

Запишемо функцію, яка спадає на нескінченності

```
> Eq(A6):=psi(x,t)=1/(1+x^2); plot(rhs(%),x=-3..3);
```

$$Eq(A6) := \psi(x, t) = \frac{1}{1 + x^2}$$

(рис. 5).

Інтеграл від квадрату модуля цієї функції є скінченим

```
>subs(Eq(A6),lhs(Eq(A3)))=eval(subs(Eq(A6),lhs(Eq(A3))));
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{1}{1 + x^2} \right|^2 dx = \frac{1}{2} \pi.$$

Але для того, щоб задовольнити рівняння (A3), інтеграл від квадрату модуля $\psi(x, t)$ повинен бути не просто скінченим, а рівним 1. До цього результату можна прийти, домноживши $\psi(x, t)$ на константу нормування C , а потім підбравши C таким чином, щоб інтеграл від $|\psi(x, t)|^2$ став рівним 1

```
>Eq(A7):=psi(x,t)=N/(1+x^2);subs(Eq(A7),lhs(Eq(A3)))=
eval(subs(Eq(A7),lhs(Eq(A3))))); rhs(%)=1;
```

$$Eq(A7) := \psi(x, t) = \frac{N}{1 + x^2},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{N}{1 + x^2} \right|^2 dx = \frac{1}{2} \pi |N|^2,$$

$$\frac{1}{2} \pi |N|^2 = 1.$$

У нашому випадку $C = \sqrt{2/\pi}$. Тепер хвильова функція задовольняє рівняння (A3) і є правильно нормованою

```
> Eq(A8):=subs(N=sqrt(2/Pi),Eq(A7));
```

$$Eq(A8) := \psi(x, t) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}(1 + x^2)}.$$

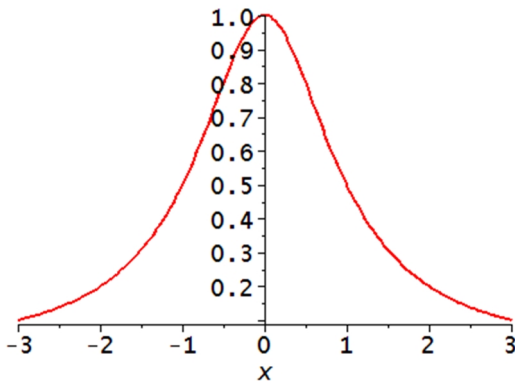


Рис. 5.

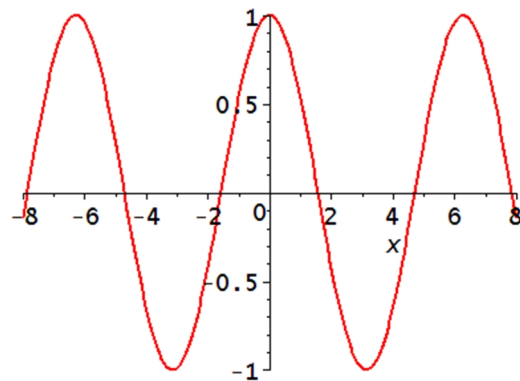


Рис. 6.

Розглянемо інший приклад. Наприклад $\cos(x)$. Ця функція збіжна на нескінченності, але вона також не спадає до нуля, і якщо намагатися інтегрувати квадрат її модуля, то доведеться б скласти безліч інтервалів, що приводитимуть до різних результатів

```
>Eq(A9):=psi(x,t)=cos(x);plot(rhs(%),
x=-8..8);subs(Eq(A9),lhs(Eq(A3)))=infinity;
```

$$Eq(A9) := \psi(x, t) = \cos(x).$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\cos(x)|^2 dx = \infty$$

(рис. 6).

Тому виберемо функцію, що містить лише один з інтервалів косинуса і є нулем поза ним

```
> Eq(A10):=psi(x,t)=piecewise(x>=-Pi/2 and x<=Pi/2,
cos(x)); plot(rhs(%),x=-8..8,psi=-1..1);
```

$$Eq(A10) := \psi(x, t) = \begin{cases} \cos(x) & -\frac{1}{2}\pi \leq x \text{ and } x \leq \frac{1}{2}\pi \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

(рис. 7).

Тоді інтервали, де $\psi(x, t)$ є нулем, не будуть впливати на інтеграл нормування, і можна одержати інтеграл на скінченному інтервалі, в даному випадку лише на одній частині косинуса

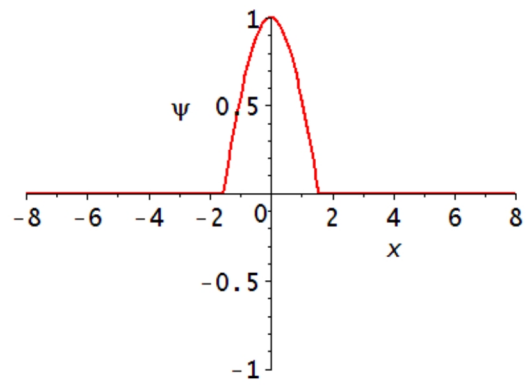


Рис. 7

> lhs(Eq(A3))=Int(cos(x)^2,x=-
Pi/2..Pi/2);Int(cos(x)^2,x=-
Pi/2..Pi/2)=int(cos(x)^2,x=-
Pi/2..Pi/2);

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos(x)^2 dx,$$

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cos(x)^2 dx = \frac{1}{2}\pi.$$

Тепер слід підібрати константу нормування так, щоб виконувалося рівняння (A3), внаслідок чого буде одержано прийнятну хвильову функцію

Eq(A11):=psi(x,t)=piecewise(x>=-Pi/2 and
x<=Pi/2,sqrt(2/Pi)*cos(x));
Int((sqrt(2/Pi)*cos(x))^2,x=-
Pi/2..Pi/2)=int((sqrt(2/Pi)*cos(x))^2,x=-Pi/2..Pi/2);

$$Eq(A11) := \psi(x, t) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2} \cos(x)}{\sqrt{\pi}} & -\frac{1}{2}\pi \leq x \text{ and } x \leq \frac{1}{2}\pi \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{2\cos(x)^2}{\pi} dx = 1.$$

2.1.2. В. Середні значення координати та імпульсу

Вище розглянуто кілька прикладів хвильових функцій, а тепер вивчимо як можна використати хвильову функцію. Що можна зробити із функцією розподілу ймовірності? Наприклад, можна обчислити середні значення фізичних величин. У квантовій механіці середні значення називаються "очікуваними значеннями". Наприклад, середнє значення координати частинки або "очікуване значення координати" – це просто сума всіх можливих положень у певні моменти часу. Оскільки, положення x – неперервна змінна, то насправді отримуємо інтеграл замість суми

> Eq(B1):=`<x>` = int(x*P(x,t),x);

$$Eq(B1) := \langle x \rangle = \int x P(x, t) dx.$$

З точки зору хвильової функції, очікуване значення координати

```
> Eq(B2) := `⟨x⟩` = int(x*abs(psi(x,t))^2,x);
```

$$Eq(B2) := \langle x \rangle = \int x |\psi(x, t)|^2 dx.$$

Тепер знайдемо швидкість частинки із похідної по часу від координати. Вияснимо, що дає похідна по часу від рівняння (B2)

```
> Eq(B3) := Diff(`⟨x⟩`, t) = int(x*Diff(abs(psi(x,t))^2, t), x);
```

$$Eq(B3) := \frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \int x \left(\frac{\partial}{\partial t} (|\psi(x, t)|^2) \right) dx$$

Квадрат модуля хвильової функції є добутком ψ і комплексно спряженої функції ψ^*

```
> Eq(B4) := Diff(`⟨x⟩`, t) = int(x*Diff(psi(x,t)*conjugate(psi(x,t)), t), x);
```

$$Eq(B4) := \frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \int x \left(\frac{\partial}{\partial t} (\psi(x, t) \overline{\psi(x, t)}) \right) dx.$$

Далі спростимо цей вираз, застосовуючи правило похідної по часу до добутку функцій

```
> subs(conjugate(psi(x,t))=phi(x,t),
Diff=diff, rhs(Eq(B4))) : simplify(%):
Eq(B5) := lhs(Eq(B4)) = subs(phi(x,t)=
conjugate(psi(x,t)), %);
```

$$Eq(B5) := \frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \int x \left(\frac{\partial}{\partial t} (\psi(x, t) \overline{\psi(x, t)}) + \psi(x, t) \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\psi(x, t)}) \right) dx.$$

Тепер замінимо похідну по часу від ψ з рівняння Шредінгера (A2)

```
> Eq(B6) := expand(Eq(A2)/i/`&hbar`;`);
```

$$Eq(B6) := \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x, t) \right)}{im} + \frac{V(x) \psi(x, t)}{i\hbar}.$$

Коли замінити обидві похідні, то внески із потенціалом скоротяться, оскільки останній є величиною дійсною. Тоді

```
> subs(psi(x,t)=phi(x,t), i=-
i, Eq(B6)) : simplify(subs(conjugate(psi(x,t))=phi(x,t), Eq(
B6), %, Eq(B5))) :
expand(subs(phi(x,t)=conjugate(psi(x,t)), diff=Diff, %));
```

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{im} \left(\hbar \left(\int \left(-x \overline{\psi(x,t)} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\psi(x,t)) \right) + x \psi(x,t) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\overline{\psi(x,t)}) \right) \right) dx \right) \right).$$

Далі ми інтегруємо по частинах кожен із двох доданків

```
> Diff(`<x>`, t) = -i*`&hbar;`*
(int((Diff(x*conjugate(psi(x, t))), x))*(Diff(psi(x, t),
x))-(Diff(x*psi(x, t), x))*(Diff(conjugate(psi(x, t)),
x)), x))/(2*m);lhs(%) = subs(phi(x, t) =
conjugate(psi(x, t)), simplify(subs(Diff(x*psi(x, t), x)
= diff(x*psi(x, t), x), subs(conjugate(psi(x, t)) =
phi(x, t), rhs(%))));
```

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = -\frac{1}{2} \frac{1}{m} \left(i\hbar \left(\int \left(\frac{\partial}{\partial x} (x \overline{\psi(x,t)}) \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} (x \psi(x,t)) \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\psi(x,t)} \right) \right) dx \right) \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = -\frac{1}{2} \frac{i\hbar \left(\int \left(\left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \right) \overline{\psi(x,t)} - \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\psi(x,t)} \right) \psi(x,t) \right) dx \right)}{m}$$

Можна об'єднати два доданки інтегруючи по частинах один з них

```
> Eq(B7):=Diff(`<x>`,t)=-i*`&hbar;`/m
*int(conjugate(psi(x,t))*diff(psi(x,t),x),x);
```

$$Eq(B7): = \frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = -\frac{i\hbar \left(\int \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \right) \overline{\psi(x,t)} dx \right)}{m}.$$

Якщо розглядаємо імпульс, а не швидкість, то слід домножити це рівняння на масу m

```
> Eq(B8):=m*Diff(`<x>`,t)=-
i*`&hbar;`*int(conjugate(psi(x,t))*diff(psi(x,t),x),x);
```

$$Eq(B8): = m \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle \right) = -i\hbar \left(\int \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \right) \overline{\psi(x,t)} dx \right).$$

Класично добуток швидкості на масу дає імпульс, отже, очікувана величина імпульсу у квантовій механіці повинна бути

> Eq(B9) := $\langle p \rangle = \text{rhs}(\text{Eq}(B8));$

$$\text{Eq}(B9) := \langle p \rangle = -i\hbar \left(\int \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right) \overline{\psi(x, t)} dx \right).$$

Якщо розглянемо рівняння (B1) і (B2) і порівняємо вищезгаданий вираз для $\langle p \rangle$ із виразами для $\langle x \rangle$, то видно, що $\langle p \rangle$ також є середнім, тобто добуток фізичної змінної, яка виражає густину ймовірності, якщо така змінна $p = -i\hbar d/dx$

> Eq(B10) := $p = -i\hbar \text{Diff}(\psi, x);$

$$\text{Eq}(B10) := p = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Але оскільки вираз для p містить похідну, то важливо знати, на які частини інтеграла вона діє. Таким чином, потрібно узгодити, які середні значення повинні бути прийняті в квантовій механіці. Із рівняння (B9) видно, що загальний алгоритм для розрахунку очікуваної величини A є дією A на $\psi(x, t)$ і наступним множенням на $\psi^*(x, t)$ та інтегруванням по всіх x

> $\langle A \rangle = \text{int}(\text{conjugate}(\psi(x, t)) * [A * \psi(x, t)], x);$

$$\langle A \rangle = \int \overline{\psi(x, t)} [A \psi(x, t)] dx.$$

Оскільки p – це не проста змінна, як x , то це не буде звичайне множення на $\psi(x, t)$, а насправді при цьому щось відбувається із $\psi(x, t)$, а саме – вона диференціюється, тому p називають оператором. За аналогією всі інші фізичні змінні називаються операторами у квантовій механіці. p у рівнянні (B10) – "оператор імпульсу", і навіть x називають "оператором координати". Маючи це на увазі, подивимося ще раз на рівняння Шредінгера (A2)

> Eq(A2);

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \right)}{m} + V(x) \psi(x, t).$$

Розглянувши оператор імпульсу, заданий в (B10), видно, що можна переписати рівняння Шредінгера, замінивши другу похідну відносно x через $-p^2/\hbar^2$

> diff(psi(x,t),x\$2): subs(=%-
p^2*psi(x,t)/`ℏ`^2,Eq(A2));
Eq(B11):=lhs(%)=collect(rhs(%),psi(x,t));

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) = \frac{1}{2} \frac{p^2 \psi(x, t)}{m} + V(x) \psi(x, t),$$

$$\text{Eq(B11)} := i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) = \left(\frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + V(x) \right) \psi(x, t).$$

Праву частину вищезгаданого рівняння (B11) знову можна розглядати як оператор, застосований до хвильової функції $\psi(x, t)$. Класично цей оператор відповідає повній енергії, тобто сумі кінетичної та потенціальної енергій, і хоча мало б сенс назвати його «оператором енергії», його ще називають оператором Гамільтона

> **Eq(B12) := H = rhs(Eq(B11)/psi(x,t));**

$$\text{Eq(B12)} := H = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} + V(x).$$

Рівняння Шредінгера часто записується в термінах оператора Гамільтона

> **subs(rhs(Eq(B12))=H, Eq(B11));**

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) = H \psi(x, t).$$

2.2. Квантова механіка для вільних частинок

2.2.1. А. Розв'язок рівняння Шредінгера для вільних частинок

У цій задачі розглянемо вільні частинки, тобто частинки на які не діють ніякі сили. У цьому випадку потенціал $V(x) = 0$. Рівняння Шредінгера для хвильової функції $\psi(x, t)$ вільної частинки має вигляд

$$\begin{aligned} > \text{Eq(A1)} := i\hbar; \cdot \text{diff}(\psi(x, t), t) = \\ & - \hbar; \cdot ^2/2/m \cdot \text{diff}(\psi(x, t), x^2); \end{aligned}$$

$$\text{Eq(A1)} := i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \right)}{m}.$$

Відомо, що найкращим способом розв'язування незалежного від часу рівняння Шредінгера є пошук стаціонарних розв'язків цього рівняння, тобто розв'язків, для яких часова залежність задається у вигляді

$$> \text{Eq(A2)} := \psi(x, t) = \exp(-i \cdot t \cdot E / \hbar; \cdot) \cdot \psi(x);$$

$$\text{Eq(A2)} := \psi(x, t) = e^{-\frac{itE}{\hbar}} \psi(x).$$

Оскільки, це рівняння стаціонарне, то густина ймовірності не залежить від часу, тобто

$$> \text{Diff}(\text{abs}(\psi(x, t))^2, t) = \text{diff}(\text{rhs}(\text{Eq(A2)}) \cdot \text{conjugate}(\text{rhs}(\text{Eq(A2)})), t);$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\psi(x, t)|^2) = 0.$$

Підставивши рівняння (A2) у (A1), одержимо

$$> \text{Eq(A3)} := \text{simplify}(\text{subs}(\text{Eq(A2)}, \text{Eq(A1)}) / \exp(-i \cdot E \cdot t / \hbar; \cdot));$$

$$\text{Eq(A3)} := E\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m}.$$

Це рівняння легко розв'язати. Оскільки для вільної частинки енергія додатна, то розв'язки є періодичними

$$> \text{Eq(A4)} := \text{dsolve}(\text{Eq(A3)}, \psi(x));$$

$$\text{Eq(A4)} := \psi(x) = C1 \sin\left(\frac{\sqrt{2}\sqrt{Em} x}{\hbar}\right) + C2 \cos\left(\frac{\sqrt{2}\sqrt{Em} x}{\hbar}\right).$$

Зручно ввести хвильове число, як позначення в аргументах тригонометричних функцій

$$> \text{Eq(A5)} := k = \text{sqrt}(2 \cdot E \cdot m) / \hbar; \cdot;$$

$$\text{Eq(A6)} := \text{subs}(\hbar; \cdot = \text{solve}(\%, \hbar; \cdot), \text{Eq(A4)});$$

$$Eq(A5) := k = \frac{\sqrt{2}\sqrt{Em}}{\hbar},$$

$$Eq(A6) := \psi(x) = C1 \sin(kx) + C2 \cos(kx).$$

Тепер перепишемо *cos* і *sin* через експоненти та змінимо константи інтегрування *C1* і *C2* на суму та різницю двох нових констант *A* і *B*

```
> combine(convert(Eq(A6), exp));
eval(subs(x=0, rhs(Eq(A6))))=A+B;
eval(subs(x=Pi/2/k, rhs(Eq(A6))))=(B-A)/i;
Eq(A7) := simplify(subs(%, %, %%));
```

$$\psi(x) = -\frac{1}{2}i C1(e^{ikx} - e^{-ikx}) + C2\left(\frac{1}{2}e^{ikx} + \frac{1}{2}e^{-ikx}\right),$$

$$C1 = -i(B - A),$$

$$C2 = A + B,$$

$$Eq(A7) := \psi(x) = B e^{-ikx} + A e^{ikx}.$$

Розв'язком рівняння Шредінгера є плоскі хвилі з хвильовим числом *k*, яке може бути додатним чи від'ємним. Якщо ці стаціонарні розв'язки поєднати із їхньою залежністю від часу, як показано у рівнянні (A2), то отримаємо, що хвильова функція вільної частинки задається двома плоскими хвилями

```
> combine(expand(subs(Eq(A7), Eq(A2)), exp));
```

$$\psi(x, t) = B e^{-\frac{itE}{\hbar} - ikx} + A e^{-\frac{itE}{\hbar} + ikx}.$$

Оскільки *k* може бути як додатним так і від'ємним, то можна записати загальний розв'язок незалежного від часу рівняння Шредінгера для вільної частки компактніше

```
> Eq(A8) := combine(subs(subs(A=N, B=0, Eq(A7)), Eq(A2)));
```

$$Eq(A8) := \psi(x, t) = N e^{-\frac{itE}{\hbar} + ikx}.$$

При *k*>0 (A8) – це хвиля, що поширюється в додатному напрямку осі *x*, а площини постійної фази описуються виразом

```
> Eq(A9) := op(1, subs(N=1, rhs(Eq(A8))))=constant;
```

$$Eq(A9) := -\frac{itE}{\hbar} + ikx = const.$$

Якщо як *E*, так і *k* додатні, то фазова швидкість *dx/dt* теж додатна, і хвиля поширюється вправо

```
> 0<diff(solve(Eq(A9), x), t);
```

$$0 < \frac{E}{k\hbar}.$$

Аналогічно, для $k < 0$, рівняння (A8) описує хвилю, що поширюється у від'ємному напрямку осі x

```
> op(1,subs(N=1,k=-abs(`k`),rhs(Eq(A8))))=constant;
diff(solve(%,x),t)<0;
```

$$-\frac{itE}{\hbar} - i|k|x = \text{const},$$

$$-\frac{E}{|k|\hbar} < 0.$$

Отже, розв'язком рівняння Шредінгера для вільної частинки є плоскі хвилі, що описуються рівнянням (A8). Хвильове число k , задане за допомогою рівняння (A5), додатне для хвиль, які поширюються зліва направо і від'ємне для хвиль, які поширюються справа наліво.

2.2.2. В. Потік ймовірності та його збереження

Після одержання загального розв'язку рівняння Шредінгера слід забезпечення правильне нормування хвильової функції. Проте, при нормуванні плоских хвиль виникають певні проблеми. Плоска хвиля має постійну густину ймовірності, тобто $|\psi(x,t)|^2$ є однаковим для всіх x . Якщо взяти квадрат модуля (A8), то знайдемо

```
> abs(lhs(Eq(A8)))^2=abs(rhs(Eq(A8)))^2;
```

$$|\psi(x,t)|^2 = |N|^2.$$

Отже, плоску хвилю не можна віднормувати, оскільки

```
> Int(abs(N)^2,x=-infinity..infinity)=int(abs(N)^2,x=-
infinity..infinity);
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} |N|^2 dx = \infty.$$

Це пов'язано з тим, що плоска хвиля описує постійний потік частинок, тобто потік, який містить нескінченну кількість частинок

```
> Eq(B1):=j(x,t)=-
i*`&hbar`/2/m*(conjugate(psi(x,t))*Diff(psi(x,t),x) -
Diff(conjugate(psi(x,t)),x)*psi(x,t));
```

$$Eq(B1):=j(x,t) = -\frac{1}{m} \left(\frac{1}{2} i\hbar \left(\overline{\psi(x,t)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\psi(x,t)} \right) \psi(x,t) \right) \right).$$

Щоб зрозуміти, чому $j(x,t)$ – густина потоку ймовірності є сталою, візьмемо похідну від $j(x,t)$ по x

```
> Eq(B2) := subs(phi(x,t)=conjugate(psi(x,t)), diff=Diff, diff(
subs(conjugate(psi(x,t))=
phi(x,t), Diff=diff, Eq(B1)), x));
```

$$Eq(B2) := \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = -\frac{1}{m} \left(\frac{1}{2} i \hbar \left(\overline{\psi(x,t)} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) \right) - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\psi(x,t)} \right) \psi(x,t) \right) \right).$$

Тепер замінимо другу похідну від $\psi(x,t)$ у наведеному виразі. З цією метою використаємо рівняння Шредінгера (A1)

```
> diff(psi(x,t), x$2):
```

```
Eq(B3) := subs(diff=Diff, %=solve(Eq(A1), %));
```

$$Eq(B3) := \frac{\partial^2}{\partial x^2} j(x,t) = -\frac{2i \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \right) m}{\hbar}.$$

Крім того, потрібно записати рівняння, комплексно спряжене до (A1)

```
> Eq(B4) := subs(diff=Diff, i=-i,
psi(x,t)=conjugate(psi(x,t)), Eq(B3));
```

$$Eq(B4) := \frac{\partial^2}{\partial x^2} \overline{\psi(x,t)} = \frac{2i \left(\frac{\partial}{\partial t} \overline{\psi(x,t)} \right) m}{\hbar}.$$

Тепер підставимо рівняння (B3) та (B4) у (B2).

```
> Eq(B5) := subs(phi(x,t)=conjugate(psi(x,t)),
simplify(subs(Eq(B3),
subs(conjugate(psi(x,t))=phi(x,t), Eq(B4)),
subs(conjugate(psi(x,t))=phi(x,t), Eq(B2)))));
```

$$Eq(B5) := \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = -\overline{\psi(x,t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial t} \overline{\psi(x,t)} \right) \psi(x,t).$$

Справа, фактично, маємо повну похідну по часу. Тепер додамо похідну по часу від густини ймовірності у обидві сторони рівняння, тоді

```
> lhs(Eq(B6))=simplify((subs(conjugate(psi(x,t))=
phi(x,t), Diff=diff, rhs(Eq(B6))))); Eq(B7) := lhs(%)=0;
```

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\psi(x, t)} \psi(x, t)) &= \\ &= -\phi(x, t) \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) \right) \psi(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} (\phi(x, t) \psi(x, t)), \\ Eq(B7) := \frac{\partial}{\partial x} j(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\psi(x, t)} \psi(x, t)) &= 0. \end{aligned}$$

Це рівняння аналогічне до рівняння неперервності для густини заряду та струму в електродинаміці

$$> \text{div} * j(x, t) + \text{Diff}(\rho(x, t), t) = 0;$$

$$\text{div} j(x, t) + \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = 0.$$

Зазначимо, що для стаціонарних станів, тобто станів, які описує рівняння (A2), густина потоку ймовірності також не залежить від часу

$$\begin{aligned} > \text{subs}(\text{conjugate}(\text{lhs}(\text{Eq}(A2))) = \text{simplify}(\text{conjugate}(\text{rhs}(\text{Eq}(A2))), \text{power}), \text{Eq}(A2), \text{Eq}(B1)); \\ \text{``} = \text{subs}(\text{phi}(x) = \text{conjugate}(\text{psi}(x)), \text{simplify}(\text{subs}(\text{conjugate}(\text{psi}(x)) = \text{phi}(x), \text{Diff} = \text{diff}, \text{rhs}(\%))))); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} j(x, t) &= -\frac{1}{m} \left(\frac{1}{2} i\hbar \left(e^{\frac{itE}{\hbar}} \overline{\psi(x)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(e^{-\frac{itE}{\hbar}} \psi(x) \right) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(e^{\frac{itE}{\hbar}} \overline{\psi(x)} \right) \right) e^{-\frac{itE}{\hbar}} \psi(x) \right) \right) = \\ &= \frac{\frac{1}{2} i\hbar \left(-\overline{\psi(x)} \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right) + \left(\frac{d}{dx} \overline{\psi(x)} \right) \psi(x) \right)}{m}. \end{aligned}$$

Отже, для стаціонарних станів (B1), густина потоку не залежить від часу

$$> \text{Eq}(B8) := j(x) = \text{subs}(\text{psi}(x, t) = \text{psi}(x), \text{Diff} = \text{diff}, \text{rhs}(\text{Eq}(B1)));$$

$$Eq(B8) := j(x) = -\frac{\frac{1}{2} i\hbar \left(\overline{\psi(x)} \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right) - \left(\frac{d}{dx} \overline{\psi(x)} \right) \psi(x) \right)}{m}.$$

Використаємо цей вираз для обчислення потоку частинок у плоскій хвилі, аналогічно до рівняння (A8), а потім визначимо константу нормування N так, щоб $j(x)$ узгоджувався із потоком частинок в експерименті

$$> \text{subs}(\text{conjugate}(N) * N = \text{abs}(N)^2, \text{simplify}(\text{subs}(\text{subs}(A=N, B=0, \text{Eq}(A7)), \text{Eq}(B8)))));$$

$$j(x) = \frac{\hbar k |N|^2}{m}$$

2.2.3. С. Опис вільної частинки хвильовим пакетом

Вище розглянуто стаціонарні стани та показано, як їх можна використовувати для опису сталого потоку частинок, як функції часу. Одна частинка повинна бути локалізована, тобто, вона повинна десь бути, хоча точно невідомо де саме. Для хвильової функції локалізованої частки це означає, що вона повинна мати скінчену ширину, яку слід пов'язати із невизначеністю положення частинки Δx . У деякий момент часу можна очікувати, що розподіл ймовірності частинки, локалізованої навколо $x=x_0$, буде мати приблизно такий вигляд

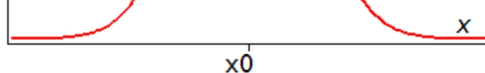
```
> plot3:=plot(4*exp(-x^2),x=-3..3,scaling=constrained,
axes=frame, tickmarks=[[0=`x0 `], []],labels=[``,``]):
plot4:=plot(1.46,x=-0.9..0.9,color=black): display
(plot3,plot4, textplot([2.8,0.2,`x `]), textplot([-
2.2,3.9,`prob density`]), textplot([-0.9,1.47,`<`]),
textplot([0.9,1.47,`>`]), textplot([0,1.67,`width`]));
```

(рис. 8).

З часом цей профіль рухається, віддаляючись від x_0 із середньою швидкістю частинки. Щоб з'ясувати, як розподіл густини ймовірності змінюється з часом, слід розрахувати часову залежність хвильової функції з рівняння Шредінгера (A1) і взяти квадрат її модуля. Найзручнішим способом дослідження часової залежності хвильової функції є розбиття профілю на суперпозицію стаціонарних станів, а саме – плоских хвиль.

З розділу A відомо, що хвильовою функцією, яка описує плоску хвилю з хвильовим числом k є $\phi_k(x, t)$

```
> Eq(C1):=phi[k](x,t)=rhs(Eq(A8));
```



$$Eq(C1) := \phi_k(x, t) = N e^{-\frac{itE}{\hbar} + ikx}.$$

Можна перевірити чи ця функція є розв'язком рівняння Шредінгера (A1), підставляючи (C1) у (A21)

```
> Eq(C2):=simplify(subs(psi(x,t)=rhs(Eq(C1)),Eq(A1)));
```

$$Eq(C2) := N E e^{\frac{i(-tE+kx\hbar)}{\hbar}} = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 N k^2 e^{\frac{i(-tE+kx\hbar)}{\hbar}}}{m}.$$

Отже, (C1) є розв'язком рівняння Шредінгера, якщо енергія E і хвильове число k пов'язані між собою співвідношенням

```
> Eq(C3):=E=solve(Eq(C2),E);
```


$$Eq(C3) := E = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k^2}{m}.$$

Запишемо хвильову функцію $\psi_k(x, t)$ у вигляді суперпозиції стаціонарних станів $\phi_k(x, t)$ з коефіцієнтами c_k , квадрат модуля кожного з яких є ймовірністю того, що частинка опиниться в стаціонарному стані з хвильовим числом k

$$> \text{psi}(x, t) = c[k[1]] * \text{phi}[k[1]](x, t) + c[k[2]] * \text{phi}[k[2]](x, t) + c[k[3]] * \text{phi}[k[3]](x, t) + c[k[4]] * \text{phi}[k[4]](x, t) + \dots;$$

$$\psi(x, t) = c_{k_1} \phi_{k_1}(x, t) + c_{k_2} \phi_{k_2}(x, t) + c_{k_3} \phi_{k_3}(x, t) + c_{k_4} \phi_{k_4}(x, t) + \dots$$

Однак, у випадку вільної частинки хвильове число k може набувати будь-якого значення, тобто воно є неперервною змінною. Отже, отримуємо не суму по різних k , а інтеграл за цією змінною

$$> Eq(C4) := \text{psi}(x, t) = \text{int}(c[k] * \text{phi}[k](x, t), k = -\text{infinity}.. \text{infinity});$$

$$Eq(C4) := \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_k \phi_k(x, t) dk.$$

Знайдемо, яким повинен бути коефіцієнт c_k . Якщо ставити вимогу, щоб середній імпульс частинки був $p_0 = \hbar k_0$, то слід вибрати за c_k функцію, яка досягла максимуму в околі k_0 . Існують різні можливості, але вибір її у формі функції Гауса найоптимальніший, тому що тоді інтеграл по k у рівнянні (C4) матиме відносно простий вигляд. Параметр σ впливає на те, скільки k_0 слід включити в інтеграл, іншими словами, наскільки широкий або вузький пік можна одержати

$$> Eq(C5) := c[k] = \exp(-(k - k_0)^2 / (2 * \sigma^2));$$

$$Eq(C5) := c_k = e^{-\frac{1}{2} \frac{(k - k_0)^2}{\sigma^2}}.$$

Використавши функцію Гауса як коефіцієнт c_k в рівнянні (C4), отримуємо те, що називається гаусівським хвильовим пакетом

$$> \text{psi}(x, t) = \text{Int}(\text{rhs}(Eq(C5)) * \text{lhs}(Eq(C1)), k = -\text{infinity}.. \text{infinity});$$

$$Eq(C6) := \text{subs}(Eq(C3), \text{subs}(Eq(C5), Eq(C1), \%));$$

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2} \frac{(k - k_0)^2}{\sigma^2}} \phi_k(x, t) dk,$$

$$Eq(C6) := \psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2} \frac{(k - k_0)^2}{\sigma^2}} N e^{-\frac{1}{2} i \hbar k^2 t / m + i k x} dk.$$

Для оцінки інтеграла по k врахуємо, що він має фундаментальну форму

```
> Eq(C7) := Int(exp(-a2*k^2+a1*k+a0), k=-infinity..infinity) = combine(expand(int(exp(-a2*k^2+a1*k+a0), k=-infinity..infinity)));
```

$$Eq(C7) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a_2 k^2 + a_1 k + a_0} dk = \sqrt{\frac{\pi}{a_2}} e^{a_0 + \frac{a_1^2}{4 a_2}}.$$

Інтеграл збіжний, і ця формула справедлива, якщо дійсна частина константи a_2 додатна. У інтегралі рівняння (С6) константами є

```
> collect(op(1, op(1, simplify(subs(N=1, rhs(Eq(C6)))))), k):
Eq(C8) := a2 = -coeff(%, k, 2); Eq(C9) := a1 = coeff(%, k, 1);
Eq(C10) := a0 = coeff(%%, k, 0);
```

$$Eq(C8) := a_2 = \frac{1}{2} \frac{i\sigma^2 \hbar + m}{\sigma^2 m},$$

$$Eq(C9) := a_1 = -\frac{1}{2} \frac{-2i\sigma^2 x m - 2k_0 m}{\sigma^2 m},$$

$$Eq(C10) := a_0 = -\frac{1}{2} \frac{k_0^2}{\sigma^2}.$$

Використаємо формулу (С7) з значеннями a_0 , a_1 та a_2 при знаходженні інтеграла в (С6) і отримаємо хвильову функцію $\psi_k(x, t)$

```
> Eq(C11) := psi(x, t) = N * sqrt(Pi / rhs(Eq(C8))) * exp(simplify(rhs(Eq(C10)) + rhs(Eq(C9))^2 / 4 / rhs(Eq(C8))));
```

$$Eq(C11) := \psi(x, t) = N \sqrt{2} \sigma \sqrt{\frac{\pi m}{i\sigma^2 \hbar + m}} e^{-\frac{\frac{1}{2} i(k_0^2 \hbar - i m \sigma^2 x^2 - 2 m x k_0)}{1\sigma^2 \hbar + m}}.$$

Щоб знайти густину ймовірності, візьмемо квадрат модуля

```
> Eq(C12) := abs(psi(x, t))^2 = abs(N)^2 * Pi / abs(rhs(Eq(C8))) * exp(factor(2 * rhs(Eq(C10)) + Re(evalc(rhs(Eq(C9))^2 / 2 / rhs(Eq(C8))))));
```

$$Eq(C12) := |\psi(x, t)|^2 = \frac{2|N|^2 \pi \sigma^2 m e^{-\frac{\sigma^2 (k_0 \hbar - x m)^2}{m^2 + \sigma^4 t^2 \hbar^2}}}{\sqrt{m^2 + \sigma^4 t^2 \hbar^2}}.$$

На відміну від плоскої хвилі, яка має рівномірну густину ймовірності, і тому не може бути нормована, хвильовий пакет Гауса має гаусівську густину ймовірності, яку можна проінтегрувати від $-\infty$ до $+\infty$. Так можна знайти постійну нормування N , прирівнюючи інтеграл від густини ймовірності до 1

```
> int(lhs(Eq(C12)),x=-infinity..infinity)=
int(rhs(Eq(C12)),x=-infinity..infinity);
Eq(C13):=N=1/combine(sqrt(subs(N=1,rhs(%)))));
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 2\pi^{3/2} |N|^2 \sigma,$$

$$Eq(C13) := N = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi^{3/2} \sigma}}.$$

Використавши у (C11) цей коефіцієнт нормування, для хвильової функції отримуємо

```
> Eq(C14):=simplify(subs(Eq(C13),Eq(C11)));
```

$$Eq(C14) := \psi(x, t) = \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{i\sigma^2 t \hbar + m}} (\sqrt{\sigma m}) e^{-\frac{\frac{1}{2}i(k_0^2 t \hbar - im\sigma^2 x^2 - 2mxk_0)}{i\sigma^2 t \hbar + m}}.$$

Нормована густина ймовірності для гаусівського хвильового пакета має вигляд

```
> Eq(C15):=simplify(subs(Eq(C13),Eq(C12)));
```

$$Eq(C15) := |\psi(x, t)|^2 = \frac{\sigma m e^{-\frac{\sigma^2 (k_0 t \hbar - x m)^2}{m^2 + \sigma^4 t^2 \hbar^2}}}{\sqrt{\pi} \sqrt{m^2 + \sigma^4 t^2 \hbar^2}}.$$

Вона має максимум в точці, у якій аргумент експоненти рівний нулю. Центр хвильового пакета рухається з постійною швидкістю

```
>Eq(C16):=x/t=solve(2*rhs(Eq(C10))+Re(evalc(rhs(Eq(C9))^
2/2/ rhs(Eq(C8))))=0,x)[1]/t;
```

$$Eq(C16) := \frac{x}{t} = \frac{k_0 \hbar}{m}.$$

Ширина хвильового пакета визначається квадратним коренем коефіцієнта перед x^2 у експоненті. Таким чином, ширина пакета є функцією від часу

```
>Eq(C17):=width=simplify(2*sigma*sqrt(expand(rhs(Eq(C8))
*subs(i=-i,rhs(Eq(C8))))));
```

$$Eq(C17) := width = \frac{\sqrt{m^2 + \sigma^4 t^2 \hbar^2}}{\sigma m}.$$

Тепер побудуємо ширину хвильового пакета, як функцію часу. При $t=0$ ширина хвильового пакета відображає квантово-механічну невизначеність Δx , а розпливання пакета з часом пояснюється тим, що

різні компоненти $\phi_k(x, t)$ в хвильовому пакеті внаслідок дисперсії рухаються з різними швидкостями $k\hbar/m$. Таким чином, протягом великих проміжків часу поширення хвильового пакету, його протяжність, змінюється з часом приблизно лінійно

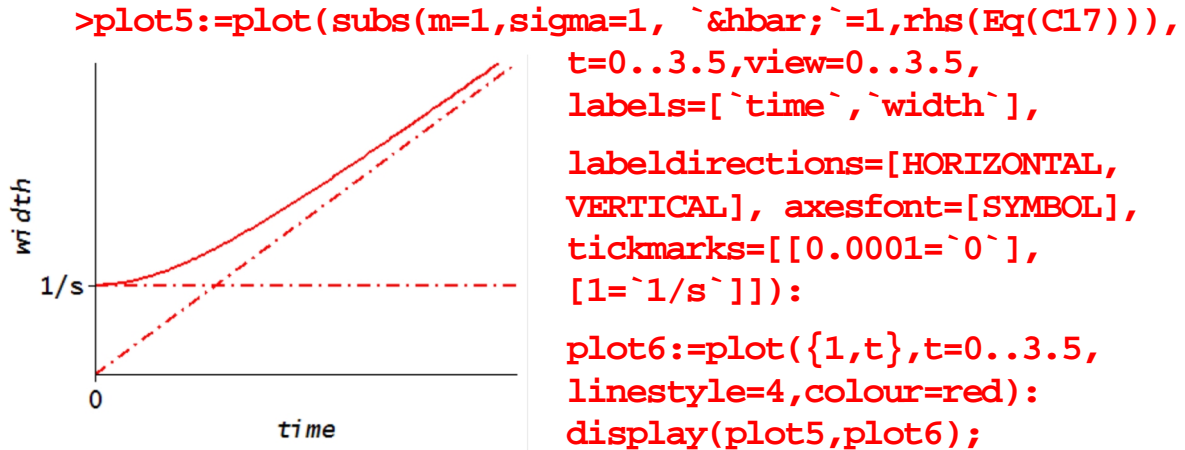


Рис. 9

(рис. 9)

2.2.4. D. Гаусівські хвильові пакети та співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Тепер нескладно розрахувати положення x хвильового пакета. Результат підтверджує, що центр хвильового пакета рухається з постійною швидкістю

```

>`<x>`=Int(conjugate(psi(x,t))*x*psi(x,t),x=-
infinity..infinity);
Eq(D1):=`<x>`=int(x*rhs(Eq(C15)),x=-infinity..infinity);

```

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x,t)} x \psi(x,t) dx,$$

$$Eq(D1) := \langle x \rangle = \frac{k_0 t \hbar}{m}.$$

Обчисливши очікувану величину імпульсу, знайдемо, що він дорівнює $\hbar k_0$, як і очікувалося. (Це було фактично нашим відправним пунктом при побудові хвильового пакета.)

```

>`<p>`=-i*`&hbar;`*Int(conjugate(psi(x,t))*diff
(psi(x,t),x),x=-infinity..infinity);
simplify(int(simplify(-i*`&hbar;`*subs(i=-
i,rhs(Eq(C14)))*diff(rhs(Eq(C14)),x)),x=-
infinity..infinity)):Eq(D2):=`<p>`=simplify(sqrt(%^2));

```

$$\langle p \rangle = -i\hbar \left(\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(x,t)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \right) dx \right),$$

$$Eq(D2) := \langle p \rangle = \hbar k_0.$$

У частині С показано, що хвильовий пакет поширюється, а отже дисперсія в точці x буде залежати від часу. Розрахунок показує, що це справді так

```
> `<`*x^2*`>`=Int(x^2*abs(psi(x,t))^2,x=-
infinity..infinity);
`<`*x^2*`>`=int(x^2*rhs(Eq(C15)),x=-infinity..infinity);
Eq(D3):=Delta^2*x=rhs(%)-rhs(Eq(D1))^2;
```

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x,t)|^2 dx,$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{k_0^2 t^2 \hbar^2}{m^2} + \frac{1}{2} \frac{m^2 + \sigma^4 t^2 \hbar^2}{\sigma^2 m^2},$$

$$Eq(D3) := \Delta^2 x = \frac{1}{2} \frac{m^2 + \sigma^4 t^2 \hbar^2}{\sigma^2 m^2}.$$

При побудові хвильового пакету зазначалося, що параметри контролюються, відповідно до режимів, які включено до пакета. Таким чином, дисперсія буде постійною і пов'язаною із σ .

```
> `<`*p^2*`>`= -`&hbar;`^2*Int(conjugate(psi(x,t))*
Diff(psi(x,t),x$2),x=-infinity..infinity);
simplify(int(simplify(-`&hbar;`^2* subs(i=-
i,rhs(Eq(C14))) * diff(rhs(Eq(C14)),x$2) ),x=-
infinity..infinity)):
`<`*p^2*`>`=simplify(sqrt(evalc(%^2)));
Eq(D4):=Delta^2*p=simplify(rhs(%)-rhs(Eq(D2))^2);
```

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,t) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) \right) dx \right),$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (2k_0^2 + \sigma^2),$$

$$Eq(D4) := \Delta^2 p = \frac{1}{2} \hbar^2 \sigma^2.$$

Згідно із принципом невизначеності Гейзенберга, $\frac{\hbar}{2} \leq \Delta p \Delta x$ і це узгоджується з результатом, який знайдено для $\Delta p \Delta x$

```
> `&hbar;`*sqrt(expand(rhs(Eq(D3))*rhs(Eq(D4)))/
`&hbar;`^2));
```

$$\frac{1}{2}\hbar \sqrt{1 + \frac{\sigma^4 t^2 \hbar^2}{m^2}}.$$

Цікавим аспектом цього є те, що при $t=0$, невизначеність задовольняється знаком рівності. Такі властивості мають лише дуже особливі стани, і їх називають станами мінімальної невизначеності, зокрема і гаусівські стани при $t=0$.

2.3. Квантова механіка частинки в прямокутній потенціальній ямі

2.3.1. А. Стационарні стани

Одновимірний рух частинки з масою m описується рівнянням Шредінгера для її хвильової функції $\psi(x, t)$

```
> Eq(A1) := i * hbar * diff(psi(x,t), t) = -
hbar^2 / (2 * m) * diff(psi(x,t), x^2) + V(x) * psi(x,t);
```

$$Eq(A1) := i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \right)}{m} + V(x) \psi(x, t).$$

(A1) є рівнянням у частинних похідних для $\psi(x, t)$, оскільки функція $\psi(x, t)$ залежить від двох параметрів x та t , а також похідних від $\psi(x, t)$, відносно цих двох параметрів. Це дозволяє вирішити набагато складніші задачі, ніж звичайне диференціальне рівняння, яке містить тільки похідні відносно одного параметра. Однак, серед диференціальних рівнянь в частинних похідних воно належить до відносно легкого типу. Щоб це побачити перенесемо всі доданки рівняння в одну сторону

```
> 0 = -lhs(Eq(A1)) + rhs(Eq(A1));
```

$$0 = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) - \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \right)}{m} + V(x) \psi(x, t).$$

По-перше, це рівняння є лінійним по $\psi(x, t)$. Це означає, що різні внески, які належать $\psi(x, t)$ просто додано один до одного, але ніколи не перемножуються один на одного. По-друге, у рівнянні немає змішаних похідних типу $\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right)$. Розв'язок такого рівняння є добутком функції, яка залежить тільки від t та функції, яка залежить тільки від x

```
> Eq(A2) := psi(x,t) = Theta(t) * psi(x);
```

$$Eq(A2) := \psi(x, t) = \theta(t) \psi(x).$$

Якщо підставити рівняння (A2) у рівняння Шредінгера (A1), то отримуємо

```
> Eq(A3) := simplify(subs(Eq(A2), Eq(A1))); lhs(%) =
factor(rhs(%));
```

$$Eq(A3) := i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} (\theta(t) \psi(x)) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \theta(t) \psi(x) \right)}{m} - 2mV(x) \theta(t) \psi(x).$$

$$i\hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right) \psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{1}{m} \left(\theta(t) \left(\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right) - 2m V(x) \psi(x) \right) \right).$$

Щоб побачити, що змінні у рівнянні справді відокремлюються, поділимо обидві його сторони на добуток $\theta(t) \psi(x)$

> Eq(A4) := simplify(Eq(A3)/Theta(t)/psi(x));

$$\text{Eq(A4)} := \frac{i\hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right)}{\theta(t)} = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right) - 2m V(x) \psi(x)}{m \psi(x)}.$$

Тепер очевидно, що ліва сторона залежить тільки від t , а права – лише від x . Однак, оскільки дві сторони повинні бути однаковими для всіх t та всіх x , вони повинні дорівнювати константі, яку позначимо E .

> Eq(A5a) := lhs(Eq(A4)) = E; Eq(A5b) := E = rhs(Eq(A4));

$$\text{Eq(A5a)} := \frac{i\hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right)}{\theta(t)} = E,$$

$$\text{Eq(A5b)} := E = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right) - 2m V(x) \psi(x)}{m \psi(x)}.$$

Таким чином, задача значно спрощується. Замість диференціального рівняння з частинними похідними (A1), отримано два звичайних диференціальних рівняння, із яких одне першого, а інше – другого порядку. Почнемо з легшого рівняння першого порядку, яке можна достатньо просто розв'язати

> Eq(A5a)*Theta(t); dsolve(%,Theta(t));

$$i\hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right) = E\theta(t)$$

$$\theta(t) = C_1 e^{-iEt/\hbar}.$$

Константа інтегрування C_1 тут не є суттєвою, оскільки розглядаємо загальну хвильову функцію $\psi(x, t) = \theta(t) \psi(x)$, яку буде віднормовано пізніше. Зручно прийняти $|\theta(t)| = 1$ і, таким чином, отримаємо загальну хвильову функцію

> Eq(A6) := psi(x,t) = exp(-i*t*E/`ℏ`) * psi(x);

$$\text{Eq(A6)} := \psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x).$$

Хвильові функції цього типу називаються стаціонарними розв'язками рівняння Шредінгера або стаціонарними станами, оскільки для них густина ймовірності не залежить від часу


```
>Diff(abs(psi(x,t))^2,t)=diff(rhs(Eq(A6))*conjugate(rhs(Eq(A6))),t);
```

$$\frac{\partial}{\partial t} (|\psi(x,t)|^2) = 0.$$

Рівняння (A5b), що залишилося, називається стаціонарним рівнянням Шредінгера

```
> Eq(A7):=psi(x)*Eq(A5b);
```

$$\text{Eq(A7)} := E\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right) - 2m V(x) \psi(x)}{m}.$$

Оскільки, права частина цього рівняння є нічим іншим, як наслідком дії до $\psi(x)$ гамільтоніана H , постійна E , яка множиться на $\psi(x)$ зліва буде сумарною енергією стану – саме тому її позначено E .

2.3.2. В. Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера для частинки в прямокутній потенціальній ямі

Перш ніж розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера, потрібно визначити потенціал $V(x)$, у полі якого рухається частинка. У цій задачі розглянемо потенціал прямокутної потенціальної ями із нескінченно високими стінами. Це є дещо штучним вибором, але він зберігає математику, необхідну для розв'язку найпростішого стаціонарного рівняння Шредінгера. Ширина ями визначається протяжністю від $x=0$ до $x=L$. Між цими двома точками потенціал дорівнює нулю, а у всіх інших точках він нескінченний

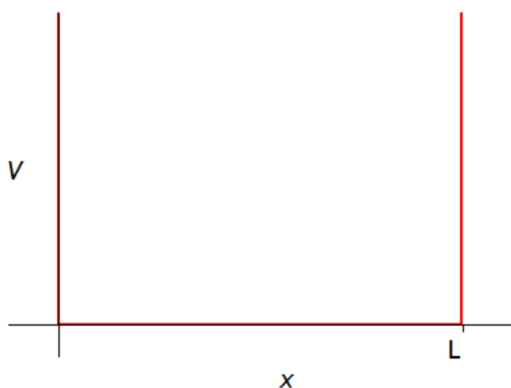


Рис. 10

```
> Eq(B1):=V(x)=piecewise( x<0,
infinity, 0<x and x<L, 0, x>L,
infinity);
plot(6-6*Heaviside(4-x)*
Heaviside(x),x=-0.5..4.5,V=-
0.5..5,tickmarks=[[4=`L`
],[0=`0`]], colour=red,
thickness=3);
```

$$\text{Eq(B1)} := V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0, \\ 0 & 0 < x \text{ та } x < L, \\ \infty & x > L. \end{cases}$$

(рис. 10).

Якщо розглянути, як цей потенціал впливає на стаціонарне рівняння Шредінгера (A7), то стане зрозуміло, що для скінченного значення повної енергії E хвильова функція $\psi(x)$ повинна бути нульовою у точках, де потенціал нескінченний

```
> psi(x)=piecewise( x<=0, 0, 0<x and x<L, `some
function`, x>=L, 0);
```

$$\psi(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0, \\ \text{some function} & 0 < x \text{ and } x < L, \\ \infty & x \geq L. \end{cases}$$

Це означає, що потрібно розв'язувати стаціонарне рівняння Шредінгера лише між точками $x=0$ і $x=L$, де потенціал $V(x)$ дорівнює нулю

```
> Eq(B2):=subs(V(x)=0,Eq(A7));
```

$$\text{Eq}(B2) := E\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m}.$$

Розв'язки є прийнятними лише тоді, коли вони задовольняють граничні умови на стінках ями

```
> Eq(B3a):=psi(0)=0;`and`;Eq(B3b):=psi(L)=0;
```

$$\begin{aligned} \text{Eq}(B3a) &:= \psi(0) = 0, \\ &\text{and} \\ \text{Eq}(B3b) &:= \psi(L) = 0. \end{aligned}$$

Рівняння (B2) легко розв'язати; його загальним розв'язком є лінійна комбінація синусів і косинусів

```
> Eq(B4):=dsolve(Eq(B2),psi(x));
```

$$\text{Eq}(B4) := \psi(x) = _C_1 \sin\left(\frac{\sqrt{2mE} x}{\hbar}\right) + _C_2 \cos\left(\frac{\sqrt{2mE} x}{\hbar}\right).$$

Якщо перевірити, як поведуться розв'язки при $x=0$, то можна побачити, що константа інтегрування перед косинусом повинна бути рівною нулю, якщо виконуватиметься гранична умова при $x=0$. З іншого боку синус, завжди задовольняє (B3a)

```
>Eq(B5):=subs(eval(subs(x=0,rhs(Eq(B4))))=0,eval(subs(x=
Pi/sqrt(E*m)*`&hbar`;`/2/
sqrt(2),rhs(Eq(B4))))=
N,_C1=N,Eq(B4));
```

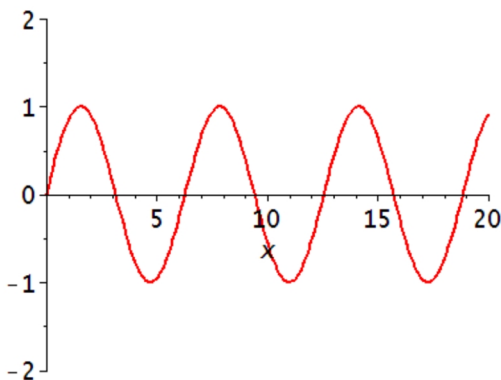


Рис. 11

$$\text{Eq}(B4) := \psi(x) = N \sin\left(\frac{\sqrt{2mE} x}{\hbar}\right).$$

Побудуємо функцію синус

```
> plot(sin(x),x=0..20,-2..2);
```

(рис. 11).

Значення синуса буде нулем, коли його аргумент є цілим числом, кратним π . Отже, якщо виконується

гранична умова (B3b) при $x=L$, то слід вимагати, щоб для $x=L$ аргумент синусу співпав із числом, кратним π

```
> Eq(B6) := subs(x=L, (op(1, op(2, rhs(Eq(B5)))))) = n*Pi;
```

$$Eq(B6) := \frac{\sqrt{2mEL}}{\hbar} = n\pi.$$

Цей результат означає, що енергія E може мати лише певні значення. Якщо розв'язати наведене вище рівняння та визначити можливі значення для E за допомогою індексу n , то знайдемо

```
> Eq(B7) := E[n] = solve(Eq(B6), E);
```

$$Eq(B7) := E_n = \frac{1}{2} \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{mL^2}.$$

Отже, на відміну від класичної фізики, де енергія E – неперервна змінна, у квантовій механіці енергія зв'язаної системи – квантована. Звичайно, найважливішим (але дещо більш складнішим для розрахунку) прикладом зв'язаної системи є зв'язаний в атомі електрон, і одним із великих успіхів квантової механіки було пояснення того, чому атоми випромінюють і поглинають світло тільки певної визначеної частоти. Це відбувається тому, що енергія, яку може мати електрон, квантується, а коли атом випромінює або поглинає світло, енергія світла передається електрону або електрон втрачає її, але при цьому він може випромінювати або поглинути певну дозволу, але не довільну енергію.

Якщо підставити дозволених рівні енергії у рівняння для хвильової функції (B5), знайдемо хвильову функцію частинки з енергією E_n

```
> Eq(B8) := psi[n](x) = subs(`&hbar;` = solve(Eq(B6), `&hbar;`), rhs(Eq(B5)));
```

$$Eq(B8) := \psi_n(x) = N \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right).$$

Переконаємося, що ці хвильові функції правильно нормовані. Оскільки, хвильова функція за межами інтервалу $0 < x < L$ рівна нулю, інтеграл нормування беруть у межах від 0 до L

```
> int(abs(lhs(Eq(B8)))^2, x=0..L) = abs(N)^2 * int(subs(N=1, rhs(Eq(B8)))^2, x=0..L);
```

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{1}{2} |N|^2 L.$$

Зовсім нескладно знайти N , яке зробить інтеграл нормування рівним 1. Отже, можемо правильно записати нормовану хвильову функцію $\psi_n(x)$ для частинки у стані із енергією E_n

```
> N = sqrt(2/L); Eq(B9) := subs(%, Eq(B8));
```

$$N = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$Eq(B9) := \psi_n(x) = \frac{\sqrt{2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}{\sqrt{L}}.$$

Якщо побудувати хвильові функції для найнижчих чотирьох енергій, то видно, що це дійсно хвилі, які просто «вписуються» в яму і на будь-якому її краї – рівні нулю

```
>plot({seq(subs(n=k,L=1,rhs(Eq(B9))),k=1..4)},x=0..1,labels=['x/L','psi']);
```

(рис. 12).

Ці хвильові функції різні, інтеграл від добутку цих різних хвильових функцій рівний нулю. Така властивість називається умовою ортогональності хвильових функцій

```
>Eq(B10):=int(conjugate(psi[k](x))*psi[n](x),x=0..L)=int
```

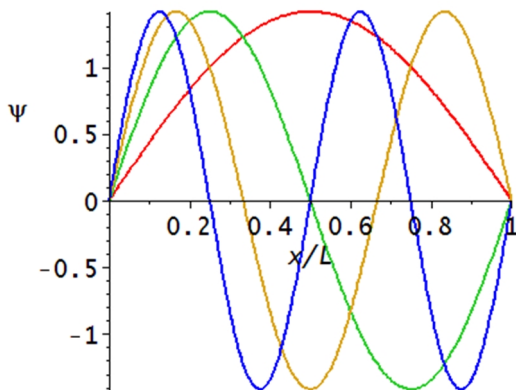


Рис. 12.

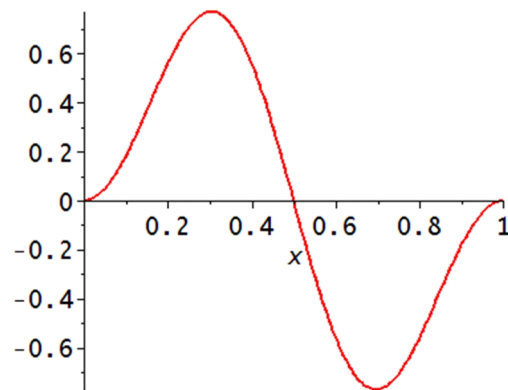


Рис. 13.

```
(subs(n=k,rhs(Eq(B9)))*rhs(Eq(B9)),x=0..L);
```

$$Eq(B10) := \int_0^L \overline{\psi_k(x)} \psi_n(x) dx = 0.$$

А це є те ж саме, що і сума двох косинусів

```
> sin(k*x*Pi/L)*sin(n*x*Pi/L): %=combine(%);
```

$$\sin\left(\frac{\pi k x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) = \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi k x}{L} - \frac{\pi n x}{L}\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi k x}{L} + \frac{\pi n x}{L}\right).$$

Права частина знаходиться на інтервалі $0 < x < L$, а k і n – цілі числа – тому вони точно компенсують один одного. Наприклад, добуток перших двох хвильових функцій, $\psi_1(x)$ і $\psi_2(x)$ виглядає так

```
> plot(sin(x*Pi)*sin(2*x*Pi),x=0..1);
```

(рис. 13).

Єдиним виключенням є випадок $n=k$, коли інтеграл містить один косинус помножений на другий косинус. Але у цьому випадку матимемо просто інтеграл нормування для $\psi_n(x)$

```
>int(conjugate(psi[n](x))*psi[n](x),x=0..L)=int((rhs(Eq(B9))^2),x=0..L);
```

$$\int_0^L \overline{\psi_n(x)} \psi_n(x) dx = 1.$$

2.4. Напівпроникна перегородка

Розглянемо частинку, поміщену між двома непроникними стінками, розташованими в точках $x=-a$ і $x=+a$. Крім того, в точці $x=0$ знаходиться нескінченно вузька і нескінченно висока напівпрозора перегородка. З'ясуємо вплив перегородки на стаціонарні стани (задача 19 [7]).

Як впливає із наведеного в [7] розв'язку, стаціонарні стани розглянутої системи поділяються на парні, що задовольняють рівняння

$$Eq(19a) := k \cot(ka) = -\Omega,$$

і непарні, які визначаються рівнянням

$$Eq(19b) := k \cot(ka) = -\infty.$$

Для непарних власних функцій з рівняння (19b) можна отримати дійсний вираз

$$u_n^-(x) = \pm \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a} + \pi n\right), n = 1, 2, 3, \dots$$

Побудуємо графіки перших трьох власних функцій при $a = 1$ і $n = 1, 2, 3, \dots$ (рис. 14):

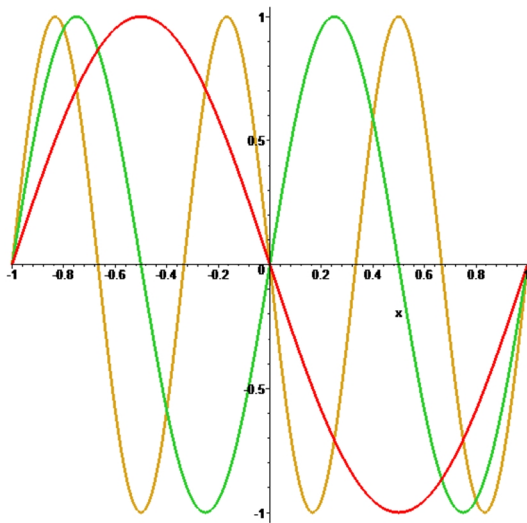


Рис. 14

```
>#Flueggel9; restart;
```

```
>u1:=(a,n,x)-1/sqrt(a)*  
sin(Pi*n*(x/a+1));
```

$$u1 := (a, n, x) \rightarrow \frac{\sin\left(\pi n \left(\frac{x}{a} + 1\right)\right)}{\sqrt{a}}$$

```
>plot[u1(1,1, x), u1(1,2, x),  
u1(1,3, x)],x=-1..1);
```

Всі ці функції перетворюються в нуль не тільки під стінками, але й на перегородці (для забезпечення неперервності і непарності). Що стосується парних функцій, що задовольняють умову (19a), то для них власні значення дійсно можна отримати тільки чисельно. Для цього потрібно чисельно розв'язати рівняння (19a) для заданого значення Ωa , причому кожне власне значення k_n^+ лежить в інтервалі $\pi\left(n - \frac{1}{2}\right) < k_n^+ a < \pi n$. Задамо множину передбачуваних значень Ωa змінною *om*

```
>om:=[0,1/4,1/2,1,2,4,10,100,1000,1e+6];
```

$$om := \left[0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1, 2, 4, 10, 100, 1000, 10^7\right]$$

і розрахуємо відповідні їм власні значення величини $k_n^+ a$

```

>n2:=5;
n3:=nops(om);
kna:=array(1..n3,1..n2);
oma:=array(1..n2);
for nz from 1 to n3 do
z:=op(nz,om):
for n from 1 to n2 do
kna[nz,n]:=fsolve(y*cot(y)=-z,y,Pi*(n-1)..Pi*n):;
od;
od;

```

Отримані значення збережені в масиві *kna* і їх можна вивести у вигляді таблиці:

```
>print (kna);
```

1.570796327	4.712388980	7.853981634	10.99557429	14.13716694
1.715507153	4.764808915	7.885674079	11.01826000	14.15482692
1.836597203	4.815842318	7.917052685	11.04082982	14.17243207
2.028757838	4.913180439	7.978665712	11.08553841	14.20743673
2.288929728	5.086985094	8.096163603	11.17270587	14.27635292
2.570431560	5.354031841	8.302929183	11.33482558	14.40797112
2.862772588	5.760557933	8.708313831	11.70267808	14.73347234
3.110497702	6.221054828	9.331730126	12.44258102	15.55366297
3.138454210	6.276908481	9.415362876	12.55381746	15.69227228
3.141589512	6.283179024	9.424768536	12.56635805	15.70794756

Ці рівні енергії можна зобразити графічно (рис. 15) та простежити їх зміну від ступеня непрозорості перегородки (від прозорої до непрозорої)

```

>plot([kna[a,1],kna[a,2],kna[a,3],kna[a,4],kna[a,5]],
a=1..n3);

```

Зобразимо тепер графіки власних функцій $u_n^+(a, b_n, x)$, $b_n = k_n^+ a, n = 1, 2, 3, \dots$ з додатною парністю

```

>u2:=(a,b,x) → -1/sqrt(a*(1-
sin(2*b)/(2*b)))*sin(b*(abs(x)/a-1));

```

$$u_2 := (a, b, x) \rightarrow -\frac{\sin\left(b\left(\frac{|x|}{a} - 1\right)\right)}{\sqrt{a\left(1 - \frac{1}{2} \frac{\sin(2b)}{b}\right)}}$$

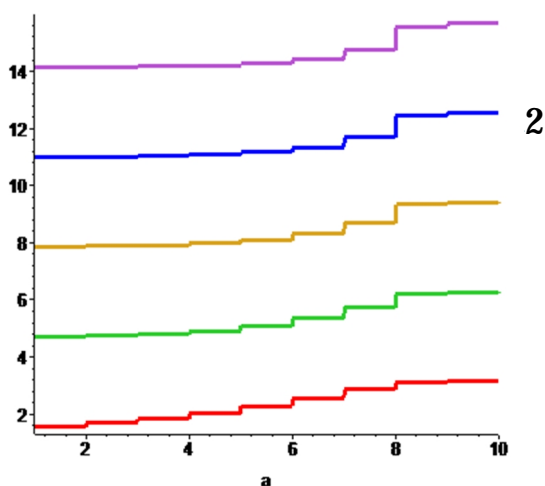


Рис. 15.

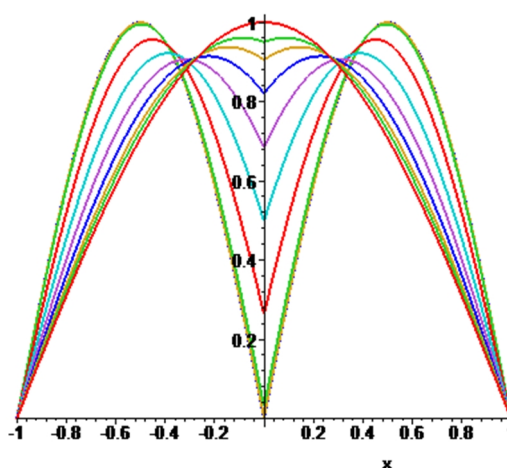


Рис. 16.

```

>for j1 to n2 do
plot([u2(1,kna[1,j1],x),u2(1,kna[2,j1],x),u2(1,kna[3,j1],
,x),u2(1,kna[4,j1],x),u2(1,kna[5,j1],x),
u2(1,kna[6,j1],x),u2(1,kna[7,j1],x),u2(1,kna[8,j1],x),u2
(1,kna[9,j1],x),u2(1,kna[10,j1],x)],x=-1..1);od;

```

На рис. 16 наведено графік, який відповідає станам з найменшим n для різних значень коефіцієнта непрозорості (перший стовбчик наведеної таблиці). У той же час, програма може зобразити будь-яку комбінацію графіків, у т.ч. на одному рисунку, що відкриває багато цікавих можливостей при аналізі теоретичної інформації, проведенні обчислювальних експериментів, перевірці розв'язків на відповідність початковим умовам, тощо.

2.5. Розв'язок рівняння Шредінгера для довільного потенціалу

2.5.1. А. Умови неперервності хвильової функції

Рух частинки у полі потенціалу $V(x)$ описується залежним від часу рівнянням Шредінгера для хвильової функції $\psi(x,t)$

$$\text{> Eq(A1)} := i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t);$$

$$\text{Eq(A1)} := i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) \right)}{m} + V(x)\psi(x,t).$$

Відомо, що найефективнішим способом вивчення динамічних систем є представлення розв'язку рівняння Шредінгера суперпозицією стаціонарних станів. Хвильова функція стаціонарного стану містить фазу, що залежить від часу, та незалежну від часу частину $\psi(x,t)$

$$\text{> } \psi(x,t) = \exp(-iEt/\hbar) \psi(x);$$

$$\psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$$

Незалежна від часу частина хвильової функції $\psi(x,t)$ називається хвильовою функцією стаціонарного стану або власною функцією оператора енергії, і вона задовольняє стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\text{> Eq(A2)} := E\psi(x) = \text{subs}(\psi(x,t)=\psi(x), \text{rhs}(\text{Eq(A1)}));$$

$$\text{Eq(A2)} := E\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + V(x)\psi(x).$$

Ця хвильова функція повинна бути нормованою, тобто квадрат її модуля має бути скінченим

$$\text{> } \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty;$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty.$$

Раніше йшла мова про те, що хвильова функція не повинна бути розбіжною. Проте існують додаткові умови, які слід накласти на хвильову функцію $\psi(x,t)$.

(i) $\psi(x,t)$ повинна бути неперервною для всіх x .

Якщо $\psi(x,t)$ має розрив, то це призведе до нескінченної похідної. Але рівняння Шредінгера (A2) містить другу похідну від $\psi(x,t)$, яка при розриві буде ще складнішою, ніж розрив першої похідної. Це означає, що вона має розбіжність у правій частині рівняння (A2), а ліва частина рівняння (A2) скінчена в цій точці (хоча вона й має розрив). Отже, неможливо задовольнити рівняння Шредінгера (A2) в будь-якій точці, якщо $\psi(x,t)$ розривна. Тому $\psi(x,t)$ повинна бути неперервною

```
> subs( steepness=10 ,arctan(steepness*(x-1))/Pi+0.5):
plot( {%,diff(%,x)},x=0...2);
```

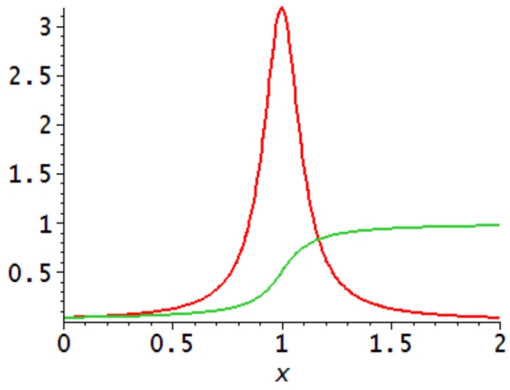


Рис. 17

(рис. 17)

(ii) $\frac{d}{dx}\psi(x)$ повинна бути неперервною для будь-якого скінченного потенціалу $V(x)$.

Якщо перша похідна від $\psi(x,t)$ була б розривною, то друга похідна була б нескінченною. Такий ріст, що з'являється у правій частині рівняння (A2), нічим не може компенсуватися у

лівій частині, і тому рівняння Шредінгера не буде задовольнятися. Однак, у кількох дуже екзотичних випадках ріст $\psi(x,t)$ може компенсуватися також нескінченим ростом потенціалу $V(x)$, і що важливо, при цьому може задовольнятися рівняння Шредінгера. Прикладом тут може бути "потенціальна яма" із нескінченно високими стінками. У цьому випадку хвильова функція (синя лінія на графіку) визначається, як синусоїдальна функція між стінками, та нуль за межами ями. Або, іншими словами, це косинус всередині та нуль за межами ями, і тому він має розрив на стінках. Однак, оскільки стінки нескінченно високі, $V(x)$ нескінченний на стінках і тому може компенсувати розбіжності $\frac{d}{dx}\psi(x)$

```
> pa1:=plot(6-6*Heaviside(4-x)*Heaviside(x),x=-
0.5..4.5,V=-2.5..5,tickmarks=
[[4=`L`],[0=`0`]],labels=[`x`
`,`V],colour=red,thickness=3):
pa2:=plot(piecewise(x<0,0.05,
x>0 and x<4,2*sin(x*Pi/4),
x>4,0.05),x=-0.5..4.5,
colour=blue,thickness=3):
pa3:=plot(piecewise(x<0,-
0.05,x>0 and
x<4,2*cos(x*Pi/4),x>4,-0.05),
x=-0.5..4.5,colour=green,
thickness=3):
display(pa1,pa2,pa3);
```

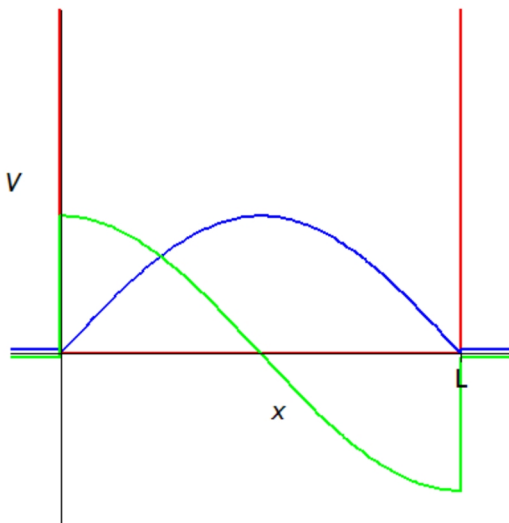


Рис. 18

(рис. 18).

Таким чином, для скінчених потенціалів $V(x)$ як хвильова функція $\psi(x)$, так і її перша похідна $\frac{d}{dx}\psi(x)$ повинні бути неперервними для всіх x .

2.5.2. В. Зміст власних значень

Для визначення характеру поведінки квантової частинки потрібно розв'язати рівняння Шредінгера (A2). Гамільтоніан записується, як

> Eq(B1) := H = -`ℏ`^2/2/m*Diff(` ` ,x\$2)+V(x);

$$Eq(B1) := H = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)}{m} + V(x).$$

У інших позначеннях стаціонарне рівняння Шредінгера має простий вигляд

> Eq(B2) := E*psi(x)=H*psi(x);

$$Eq(B2) := E\psi(x) = H\psi(x).$$

H справа діє на хвильову функцію $\psi(x)$, тобто диференціює її двічі у першому доданку і домножує її на $V(x)$ у другому доданку. Ліва частина рівняння Шредінгера (B2) рівна $\psi(x)$ помноженій на число E . Для більшості функцій ліва і права частини рівняння (B2) не будуть однаковими. Тільки деякі $\psi(x)$ задовольнятимуть рівняння. Така функція $\psi(x)$, що задовольняє рівняння (B2) називається власною функцією оператора H , а константа E – власним значенням H . Кожна власна функція дає певне власне значення у правій частині рівняння (B2), хоча може статися, що дві (або більше) власні функції мають однакове власне значення. Отже, система має набір власних значень енергії E , які є її дозволеними рівнями енергії, а кожне власне значення відповідає одній або декільком власним функціям $\psi(x)$.

> Eq(B3) := E*psi[E](x)=H*psi[E](x);

$$Eq(B3) := E\psi_E(x) = H\psi_E(x).$$

Розглянемо приклад. Припустимо, що хвильова функція є контуром Лоренца, який задовольняє всім вимогам, які ставляться до хвильової функції: вона спадає на нескінченності, нормується, а також є неперервною для всіх x .

> Eq(B4) := psi(x)=sqrt(2/Pi)/(1+x^2);
plot(sqrt(2/Pi)/(1+x^2), x=-5..5);

$$Eq(B4) := \psi(x) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi} (1 + x^2)}.$$

(рис. 19).

Якщо застосувати перший доданок оператора Гамільтона H (рівняння (B1)), то для цієї хвильової функції ми повинні отримати контур Лоренца

> Eq(B5) := -`ℏ`^2/2/m*diff(psi(x),x\$2)=-
`ℏ`^2/2/m*sqrt(2/Pi)*simplify(diff(1/(1+x^2),x\$2));

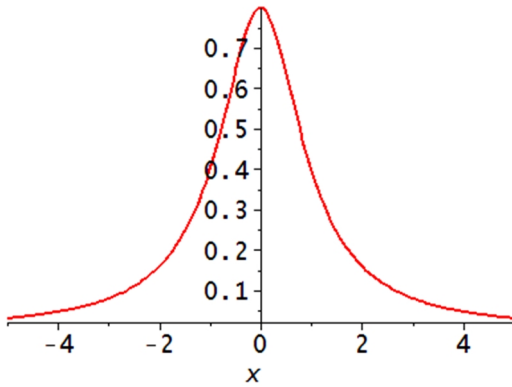


Рис. 19.

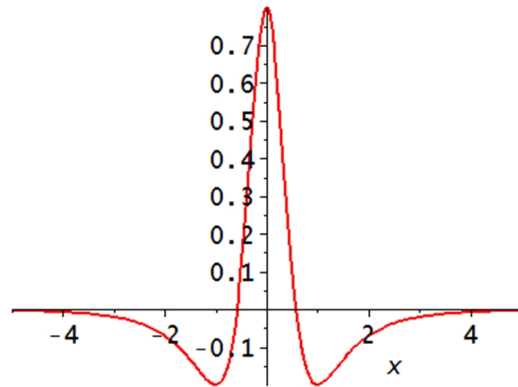


Рис. 20.

```
plot(subs(m=1,`&hbar;`=1,rhs(%)),x=-5..5);
```

$$Eq(B5) := -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} = \frac{\hbar^2 \sqrt{2} (3x^2 - 1)}{m \sqrt{\pi} (1 + x^2)^3}.$$

(рис. 20).

Перевіримо, чи є $\psi(x)$ у рівнянні (B4) власною функцією для всіх гамільтоніанів H . Розглянемо квадратичний потенціал

```
> V(x)=`x`^2/2; plot(rhs(%),`x`=-5..5);
```

$$V(x) = \frac{1}{2} x^2.$$

(рис. 21).

Тепер застосовуємо повний Гамільтоніан (B1) до обраної хвильової функції (зелена лінія)

```
> rhs(Eq(B1))*psi(x)=rhs(Eq(B5))+1/2*x^2*rhs(Eq(B4));
plot({subs(m=1,`&hbar;`=1,rhs(%)),rhs(Eq(B4))},x=-5..5,colour=[red,green]);
```

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)}{m} + V(x) \right) \psi(x) = \frac{\hbar^2 \sqrt{2} (3x^2 - 1)}{m \sqrt{\pi} (1 + x^2)^3} + \frac{1}{2} \frac{x^2 \sqrt{2}}{\sqrt{\pi} (1 + x^2)}.$$

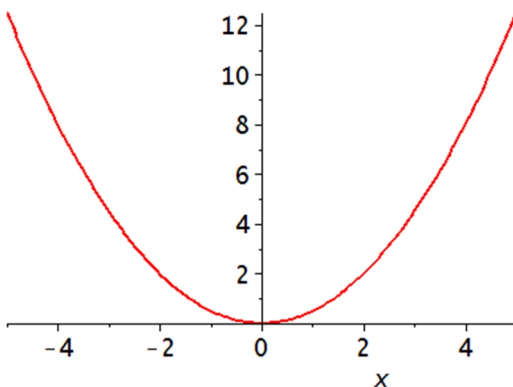


Рис. 21.

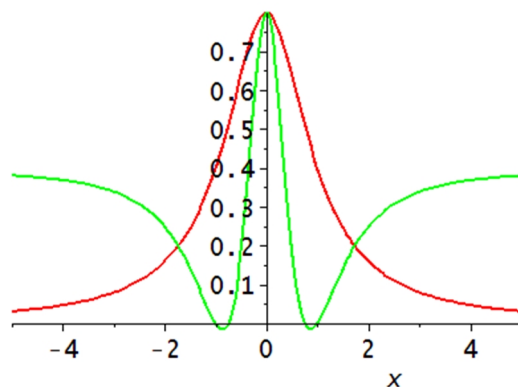


Рис. 22.

(рис. 22).

$H\psi(x)$ явно не пропорційний до $\psi(x)$, а отже $\psi(x)$ не є власною функцією гамільтоніана з квадратичним потенціалом. Тобто, знаходження власної функції є складним завданням, оскільки потрібно дотримуватися відповідності до певних умов.

Якщо вибрати за хвильову функцію замість лоренціана, функцію Гауса, то $H\psi(x)$ буде пропорційним до $\psi(x)$, але тільки якщо вибрати правильний коефіцієнт у показнику

```
> psi(x)=N*exp(-sqrt(m)*x^2/2/`&hbar;`);
subs(V(x)=x^2/2,rhs(Eq(B1)))*psi(x)=simplify(-
`&hbar;`^2/2/m*diff(rhs(%),x$2)+x^2/2*rhs(%));
```

$$\psi(x) = Ne^{-\frac{1\sqrt{m}x^2}{2\hbar}},$$

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial x^2}\right)}{m} + \frac{1}{2}x^2\right)\psi(x) = \frac{1}{2}\frac{\hbar Ne^{-\frac{1\sqrt{m}x^2}{2\hbar}}}{\sqrt{m}}.$$

Отже, дія оператора H на хвильову функцію $\psi(x)$ дає певний вираз, пропорційний до $\psi(x)$. Хвильова функція у цьому випадку є власною функцією оператора H . Тому замість того, щоб спробувати вгадати власну функцію простіше знаходити власні функції, розв'язуючи диференціальне рівняння (A2) – стаціонарне рівняння Шредінгера. У розділі С показано, як це зробити для потенціалу у вигляді прямокутної потенціальної ями.

Тепер коротко проаналізуємо енергію власних станів. Розглянемо, наприклад, такий потенціал (червона лінія) і три різних енергії (зелена, коричнева та синя лінії), які відповідають різним власним енергіям

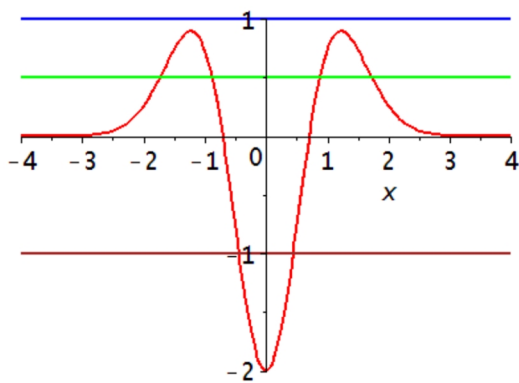


Рис. 23

```
> d1:=plot((4*x^2-2)*exp(-x^2),x=-4..4): d2a:=plot(-1.0,
x=-4..4,colour=brown):
d2b:=plot(1.0,x=-4..4,
colour=blue): d2c:=plot(0.5,x=-
4..4,colour=green):
display(d1,d2a,d2b,d2c);
```

(рис. 23).

Можливими є три типи власних значень:

(i). Зв'язаний стан (коричнева лінія) – енергія E лежить між -2 (нижня частина потенціалу) та 0 . Кінетична енергія ($E - V(x)$) додатна тільки в скінченій області (тут $E = -1.0$ приблизно між $x = -0,5$ і $x = 0,5$). Класична частинка взагалі не може рухатися за межами цього інтервалу. Квантова ж частинка може знаходитися за межами класичної області, але частинка є зв'язаною і вона не може вийти з області. Зв'язані стани мають дискретні значення енергії.

(ii) Незв'язаний стан (синя лінія) – енергія E лежить вище $0,9$ (вершина максимуму потенціальної енергії). Кінетична енергія ($E - V(x)$) додатна для всіх x , отже частинка може рухатися по всьому простору. Енергія E є неперервною змінною, як і для випадку класичної частинки. Прикладом незв'язаних станів може бути плоска хвиля.

(iii) Стан тунелювання (зелена лінія) – енергія E лежить між 0 і $0,9$. Кінетична енергія ($E - V(x)$) додатна у деяких областях. Тому є одна або декілька класично заборонених областей, так що частинку можна утримувати в обмеженій області. На наведеному графіку класична частинка з енергією E в діапазоні від 0 до $0,9$, не може перетнути бар'єр. Вона може або залишитися зліва від $x=-1,2$, або між $x=-1,2$ і $x=1,2$, або праворуч від $x=1,2$. Проте квантові частинки поведуть себе по іншому, вони можуть проникати через бар'єри, хоча тунелювання і відбувається повільніше. Енергія E для тунельних станів є неперервною, як і для незв'язаних станів.

2.5.3. С. Приклад: зв'язані стани у прямокутній ямі

Як приклад, розглянемо потенціал прямокутної ями. Для цього виберемо потенціал, який дорівнює постійній $-V$ в області довжиною L , між $x=-L/2$ і $x=L/2$, і дорівнює нулю за межами цієї області. Як було показано у розділі А, потенціал може мати розриви, тобто змінюватися стрибком від одного значення до іншого для будь-якої квантово-механічної частинки

```
> Eq(C1):=V(x)=piecewise( x<-L/2, 0, -L/2<x and x<L/2, -
V, x>L/2,0);
```

```
p1:=plot(-Heaviside(2-x)*Heaviside(x+2),x=-4..4.,V=-
1.2..0.3,tickmarks=[[2=`L/2`, -2=`-
L/2`],[0=`0`]],labels=[``,``],colour=red,thickness=2):
p2:=textplot([-0.3,0.25,`V(x)`]):
p3:=textplot([3.8,0.07,`x`]): p41:=textplot([-3,-
0.5,`Region I`],font=[TIMES,ROMAN,14]):
```

```
p42:=textplot([-0.7,-0.5,`Region
II`],font=[TIMES,ROMAN,14]): p43:=textplot([3,-
0.5,`Region III`],font=[TIMES,ROMAN,14]): p5:=plot(-
0.8,x=-2..2,color=blue):
display(p1,p2,p3,p41,p42,p43,p5);
```

$$Eq(C1) := V(x) = \begin{cases} 0 & x < -\frac{1}{2}L, \\ -V & -\frac{1}{2}L < x, \text{ and } x < \frac{1}{2}L, \\ 0 & \frac{1}{2}L < x. \end{cases}$$

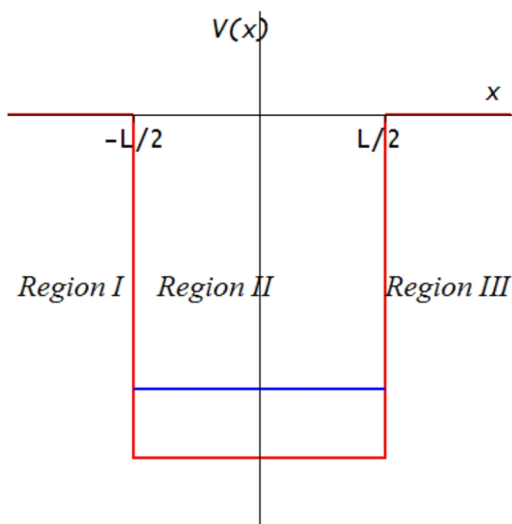


Рис. 24

(рис. 24).

Стратегія розв'язку задачі полягає у тому, що рівняння Шредингера слід розв'язувати окремо для кожної із областей з постійним потенціалом. Після того, як знайдено всі розв'язки, їх слід зшити, використовуючи умови неперервності хвильової функції та її першої похідної.

У нашому випадку вісь x можна розділити на три області, як це показано на рисунку. У областях I та III потенціал дорівнює нулю, а рівняння Шредингера має такий самий вигляд, як і для випадку вільної частинки

> Eq(C2):=subs(psi(x)=psi[`I,III`](x),V(x)=0,Eq(A2));

$$Eq(C2) := E\psi_{I,III}(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi_{I,III}(x) \right)}{m}$$

Будемо шукати розв'язок, який є енергією, для від'ємного значення E . Наведене диференціальне рівняння має експоненційно зростаючі і спадаючі розв'язки

> dsolve(Eq(C2),psi[`I,III`](x));

$$\psi_{I,III}(x) = C_1 e^{\frac{\sqrt{-2mEx}}{\hbar}} + C_2 e^{-\frac{\sqrt{-2mEx}}{\hbar}}$$

Відомо, що хвильові функції повинні спадати. Отже, у області I повинні бути лише експоненти з додатними аргументами, а у області III – лише експоненти із від'ємними аргументами

> Eq(C3):=psi[I]=C*exp(sqrt(-2*m*E)*x/`ℏ`);

Eq(C4):=psi[III]=D*exp(-sqrt(-2*m*E)*x/`ℏ`);

$$Eq(C3) := \psi_I(x) = C e^{\frac{\sqrt{-2mEx}}{\hbar}}$$

$$Eq(C4) := \psi_{III}(x) = D e^{-\frac{\sqrt{-2mEx}}{\hbar}}$$

Отже, хвильові функції матимуть наступний вигляд

> d3:=plot(exp(x),x=-6..-3,0..0.08,tickmarks=[[3=-L/2],[-3=-L/2],[0=0]]):
d4:=plot(exp(-x),x=3..6):

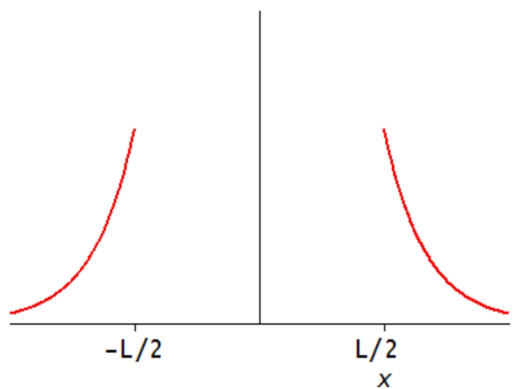


Рис. 25

`display(d3,d4);`

(рис. 25).

Всередині ями потенціал $V(x)$ – від’ємний, сталий і дорівнює $-V$. Отже, рівняння Шредингера перетворюється на

`> Eq(C5):=subs(psi(x)=psi[`II`](x),V(x)=-V,Eq(A2));`

$$Eq(C5) := E\psi_{II}(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi_{II}(x) \right)}{m} - V \psi_{II}(x).$$

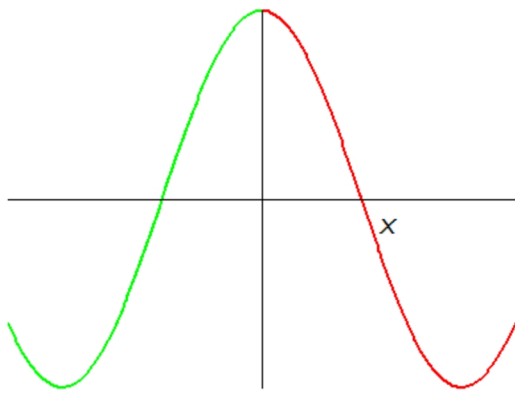
Оскільки $(E+V)$ – додатна величина, то розв’язок рівняння Шредингера буде коливним

`> dsolve(Eq(C5),psi[`II`](x));`

$$\psi_{II}(x) = C_1 \sin\left(\frac{\sqrt{2m(E+V)}x}{\hbar}\right) + C_2 \cos\left(\frac{\sqrt{2m(E+V)}x}{\hbar}\right).$$

Тут вже не можна виключити деякі розв’язки з фізичних міркувань, тому потрібно враховувати всі. При цьому, розв’язок, який містить косинус буде парним, тобто $\psi(x) = \psi(-x)$, а розв’язок, який містить синус – непарним, тобто $\psi(x) = -\psi(-x)$

`> Eq(C6):=psi[`II,even`](x)=A*cos(sqrt(2*(E+V)*m)*x/`&hbar`
r;`); d5:=plot(cos(x),x=0..4,tickmarks=[[],[]]):`



`d6:=plot(cos(x),x=-4..0,tickmarks=[[],[]],
colour=green): display(d5,d6);`

(рис. 26).

$$Eq(C6) := \psi_{II,even}(x) = A \cos\left(\frac{\sqrt{2m(E+V)}x}{\hbar}\right).$$

Отже, для області *I* розв’язком є (C3), для області *II* – (C6), а для області *III* – (C4). Потрібно, щоб хвильова функція була неперервною в точках зшивання. Неперервність $\psi(x)$ при $x=-L/2$ задається рівнянням (7a), а при $x=L/2$ – рівнянням (7b)

`> rhs(Eq(C3))=rhs(Eq(C6)): Eq(C7a):=subs(x=-L/2,%);
rhs(Eq(C4))=rhs(Eq(C6)): Eq(C7b):=subs(x=L/2,%);`

$$Eq(C7a) := C e^{\frac{1\sqrt{-2mEL}}{2\hbar}} = A \cos\left(-\frac{1}{2} \frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}\right)$$

$$Eq(C7b) := D e^{\frac{1\sqrt{-2mEL}}{2\hbar}} = A \cos\left(\frac{1}{2} \frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}\right)$$

По-друге, повинна виконуватися умова, щоб $\frac{d}{dx}\psi(x)$ була неперервною, що дає рівняння (C7c) при $x=-L/2$ та рівняння (C7d) при $x=L/2$

```
> diff(rhs(Eq(C3)),x)=diff(rhs(Eq(C6)),x);
Eq(C7c):=subs(x=-L/2,%);
diff(rhs(Eq(C4)),x)=diff(rhs(Eq(C6)),x);
Eq(C7d):=subs(x=L/2,%);
```

$$Eq(C7c) := \frac{C\sqrt{-2mE}e^{-\frac{1\sqrt{-2mE}L}{2\hbar}}}{\hbar} = \frac{A\sin\left(-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}\right)\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar},$$

$$Eq(C7d) := -\frac{D\sqrt{-2mE}e^{-\frac{1\sqrt{-2mE}L}{2\hbar}}}{\hbar} = \frac{A\sin\left(\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}\right)\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}.$$

Два наведені рівняння є однаковими, за винятком коефіцієнтів C і D . Отже, потрібно вибрати, що $C = D$.

Для того, щоб знайти рівняння для допустимих енергій, поділимо рівняння (C7c) на рівняння (C7a) або рівняння (C7d) на рівняння (C7b), що дасть той же самий результат

```
>Eq(C8):=lhs(Eq(C7c))/lhs(Eq(C7a))=rhs(Eq(C7c))/rhs(Eq(C7a));
```

$$Eq(C8) := \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = -\frac{\sin\left(-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}\right)\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar \cos\left(-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}\right)}.$$

Рівняння (C8) – нелінійне рівняння для енергії E . Його можна розв'язати наближено для області, де розв'язки існують. З цією метою спростимо вигляд рівняння до менш складного, ввівши такі позначення

```
> Eq(C9):=k=sqrt(2*(E+V)*m)/`&hbar;`;
Eq(C10):=kappa=sqrt(2*(-E)*m)/`&hbar;`;
```

$$Eq(C9) := k = \frac{\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar},$$

$$Eq(C10) := \kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Використовуючи ці позначення, рівняння (C8) записується

```
> Eq(C11):=kappa=tan(k*L/2)*k;
```

$$Eq(C11) := \kappa = \tan\left(\frac{1}{2}kL\right)k.$$

Проте, рівняння (C8) мало лише одну невідому, а саме E , а рівняння (C11) тепер містить дві невідомі k і κ . Це означає, що одного рівняння

(C11) недостатньо; потрібно враховувати ще й взаємозалежність між k та κ . Взявши квадрати рівняння (C9) та рівняння (C10) та додавши їх, отримаємо зручне співвідношення, яке пов'язує k та κ

```
>Eq(C12):=kappa^2+k^2=simplify(rhs(Eq(C9))^2+
rhs(Eq(C10))^2);
```

$$Eq(C12) := \kappa^2 + k^2 = \frac{2mV}{\hbar^2}.$$

Отже, тепер потрібно розв'язувати рівняння (C11) та (C12). Зробимо це графічно. Побудуємо графік залежності κ від k для обох рівнянь: (C11) (червоні лінії) і (C12) (сині лінії). Будь-які точки перетину є одночасними розв'язками обох рівнянь. Функція у правій частині рівняння (C11) дуже схожа до тангенса, а рівняння (12) є рівнянням кола. Радіус кола залежить від того, наскільки великим є V . На рисунку наведено графіки рівняння (C12) для трьох різних радіусів, тобто для різних значень константи V . Для найменшого V – червона крива, є тільки одне власне значення енергії; для більших V ми отримуємо два, три або й більше значень

```
>t1:=plot(k*tan(k),k=0..Pi/2,kappa=0..8,scaling=constrained,labels=[`k`,`kappa`]): t2:=plot(k*tan(k),k=Pi/2..3*Pi/2,kappa=0..8,scaling=constrained): t3:=plot(k*tan(k),k=3*Pi/2..5*Pi/2,kappa=0..8,scaling=constrained): t4:=plot(sqrt(4-k^2),k=0..2,color=blue): t5:=plot(sqrt(16-k^2),k=0..4,color=blue): t6:=plot(sqrt(49-k^2),k=0..7,color=blue): display(t1,t2,t3,t4,t5,t6);
```

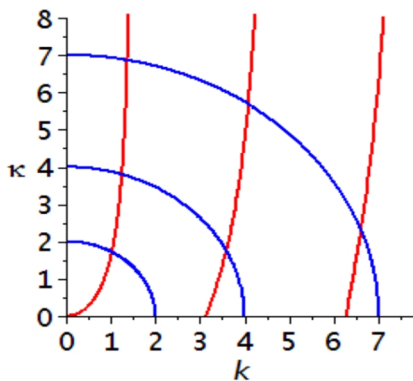


Рис. 27

(рис. 27).

Визначивши власні значення енергії, можна використовувати будь-який параметр (C7a-d) для розрахунку коефіцієнтів C/A та D/A , а також коефіцієнтів нормування. Знайшовши їх, отримаємо

```
> s1:=plot(cos(1.2524*x),x=-1..1,tickmarks=[[1=`L/2`,`-1=-L/2`],[0=`0`]]): s4:=plot(cos(3.5953*x),x=-1..1,colour=green): s2:=plot(0.3131*exp(3.7989*(x+1)),x=-2..-1): s5:=plot(-0.8988*exp(1.7532*(x+1)),x=-2..-1,colour=green): s3:=plot(0.3131*exp(-3.7989*(x-1)),x=1..2): s6:=plot(-0.8988*exp(-1.7532*(x-1)),x=1..2,colour=green): display(s1,s2,s3,s4,s5,s6);
```

(рис. 28).

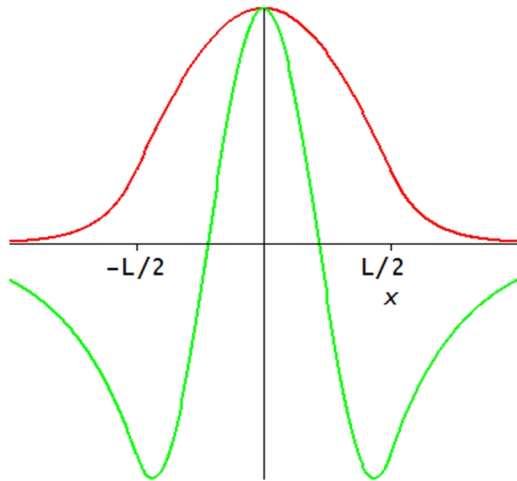


Рис. 28

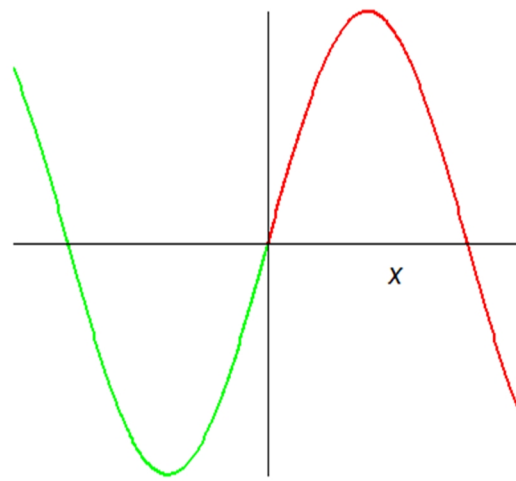


Рис. 29

Тепер розглянемо розв'язки у вигляді синуса в області II. Такі розв'язки є непарними, тому що для них $\psi(x)$ (червона лінія) і $\psi(-x)$ (зелена лінія) – це перевернуті зображення один одного, тобто $\psi(x) = -\psi(-x)$. Таким чином, дзеркальне відбивання призводить до неперервності хвильової функції

```
>Eq(C13):=psi[ `II,odd` ](x)=B*sin(sqrt(2*(E+V)*m)*x/`&hbar
r;`);d7:=plot(sin(x),x=0..4,tickmarks=[[ ],[ ]]):
d8:=plot(sin(x),x=-4..0,tickmarks=[[ ],[ ]],colour=green):
display(d7,d8);
```

$$Eq(C13) := \psi_{II,odd}(x) = B \sin\left(\frac{\sqrt{2m(E+V)}x}{\hbar}\right),$$

(рис. 29).

Вимога неперервності $\psi(x)$ у точках $-L/2$ та $L/2$, задається рівняннями (C14a) та (C14b)

```
> rhs(Eq(C3))=rhs(Eq(C13)): Eq(C14a):=subs(x=-L/2,%);
rhs(Eq(C4))=rhs(Eq(C13)): Eq(C14b):=subs(x=L/2,%);
```

$$Eq(C14a) := C e^{-\frac{1\sqrt{-2mE}L}{2\hbar}} = B \sin\left(-\frac{1\sqrt{2m(E+V)}L}{2\hbar}\right),$$

$$Eq(C14b) = D e^{-\frac{1\sqrt{-2mE}L}{2\hbar}} = B \sin\left(\frac{1\sqrt{2m(E+V)}L}{2\hbar}\right).$$

Вимога неперервності $\frac{d}{dx}\psi(x)$ для точок $-L/2$ та $L/2$, задається рівняннями (C14c) та (C14d)

```
> diff(rhs(Eq(C3)),x)=diff(rhs(Eq(C13)),x):
Eq(C14c):=subs(x=-L/2,%);
```

```
diff(rhs(Eq(C4)),x)=diff(rhs(Eq(C13)),x):
Eq(C14d):=subs(x=L/2,%);
```

$$Eq(C14c) := \frac{C\sqrt{-2mE} e^{-\frac{1\sqrt{-2mEL}}{2\hbar}}}{\hbar} = \frac{B\cos\left(-\frac{1\sqrt{2m(E+V)L}}{2\hbar}\right)\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}$$

$$Eq(C14d) := \frac{D\sqrt{-2mE} e^{-\frac{1\sqrt{-2mEL}}{2\hbar}}}{\hbar} = \frac{B\cos\left(\frac{1\sqrt{2m(E+V)L}}{2\hbar}\right)\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}.$$

Якщо для C і D прийняти, що $C = -D$, то

```
>Eq(C15):=lhs(Eq(C14c))/lhs(Eq(C14a))=rhs(Eq(C14c))/rhs(
Eq(C14a));
```

$$Eq(C15) := \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} = \frac{\cos\left(-\frac{1\sqrt{2m(E+V)L}}{2\hbar}\right)\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar \sin\left(-\frac{1\sqrt{2m(E+V)L}}{2\hbar}\right)}.$$

Якщо ж використати позначення k та κ з рівнянь (C9) та (C10), то можемо отримати

```
> Eq(C16):=kappa=-k*cot(k*L/2);
```

$$Eq(C16) := \kappa = -k \cot\left(\frac{1}{2}kL\right).$$

Знаходимо тепер графічно спільні розв'язки рівнянь (C16) і (C12), побудувавши κ як функцію від k . Рівняння (C12) дає коло, радіус якого залежить від V (сині лінії). Рівняння (C16) дає щось дуже схоже до котангенса (червоні лінії). Кількість перетинів, а отже, і кількість радіусів кола, яка відповідно до рівняння (C12), пропорційна \sqrt{V}

```
> t7:=plot(-
x*cot(x),x=0..Pi,kappa=0..8,scaling=constrained,labels=[
`x`,`kappa`]);
t8:=plot(-
x*cot(x),x=Pi..2*Pi,kappa=0..8,scaling=constrained):
t9:=plot(-
x*cot(x),x=2*Pi..3*Pi,kappa=0..8,scaling=constrained):
t10:=plot(sqrt(1-x^2),x=0..2,color=blue):
t11:=plot(sqrt(16-x^2),x=0..4,color=blue):
t12:=plot(sqrt(49-x^2),x=0..7,color=blue):
display(t7,t8,t9,t10,t11,t12);
```

(рис. 30).

На рис. 31 наведено дві найпопулярніші хвильові функції

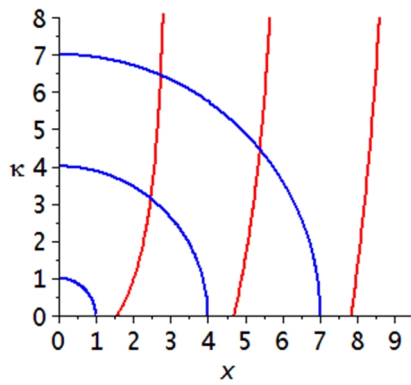


Рис. 30.

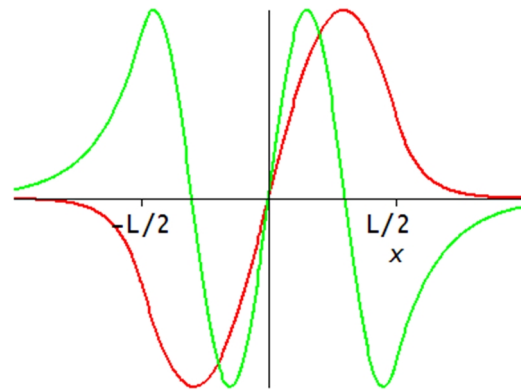


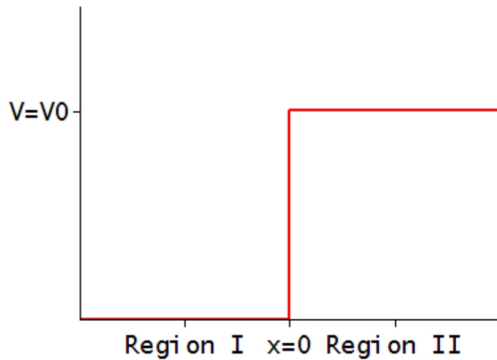
Рис. 31.

```
> t1:=plot(sin(2.6788*x),x=-1..1,tickmarks=[[1=`L/2`,-
1=`-L/2`],[0=`0`]]): t4:=plot(sin(5.226*x),x=-1..1,
colour=green): t2:=plot(-0.4465*exp(5.3688*(x+1)),x=-
2..-1): t5:=plot(0.871*exp(2.9478*(x+1)),x=-2..-
1,colour=green): t3:=plot(0.4465*exp(-5.3688*(x-
1)),x=1..2): t6:=plot(-0.871*exp(-2.9478*(x-
1)),x=1..2,colour=green): display(t1,t2,t3,t4,t5,t6);
```

2.6. Відбивання та проходження хвиль на потенціальному бар'єрі

2.6.1. А. Розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера на потенціальному бар'єрі

З'ясуємо, що відбувається із мікрочастинкою на потенціальному бар'єрі. Для цього розглянемо бар'єр, який зліва від точки $x=0$ має нульову потенціальну енергію, а справа має висоту V_0 . Таким чином, потенціал $V(x)$ матиме вигляд



```
> plot1:=plot(Heaviside(x-
3),x=0..6,0..1.5,
tickmarks=[[1.5=`Region
I`,3=`x=0`,4.5=`Region
II`],[1=`V=V0`]],
labels=[``,``]): display(plot1);
```

Рис. 32

(рис. 32)

Рух частинки з масою m у цьому потенціалі описується рівнянням Шредінгера

```
> Eq(A1):=i*ħ;`diff(psi(x,t),t)=-
`ħ;`^2/2/m*diff(psi(x,t),
x$2)+V(x)*psi(x,t);
```

$$Eq(A1):=i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\right)=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)\right)}{m}+V(x)\psi(x,t)$$

Знайдемо стаціонарні стани, які описуються цим рівнянням

```
> Eq(A2):=psi(x,t)=exp(-i*t*E/ħ;`)*psi(x);
```

$$Eq(A2):=\psi(x,t)=e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$$

Даний розв'язок є стаціонарним, оскільки для нього густина ймовірності не залежить від часу

```
>Diff(abs(psi(x,t))^2,t)=diff(rhs(Eq(A2))*conjugate(rhs(
Eq(A2))),t);
```

$$\frac{d}{dt}(|\psi(x,t)|^2)=0$$

Підставивши рівняння (A2) в (A1), отримаємо стаціонарне рівняння Шредінгера для $\psi(x)$

```
> Eq(A3):=expand(subs(Eq(A2),Eq(A1))/exp(-
i*t*E/ħ;`));
```

$$Eq(A3) := E\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + V(x)\psi(x).$$

Розв'яжемо це рівняння для випадку $E > V_0$, тобто для випадку, коли повна енергія частинки більша, від висоти потенціальної сходинок. Класична частинка просто сповільниться сходиною потенціалу, а у квантовій механіці існує певна ймовірність того, що частинка відіб'ється від сходинок, навіть якщо її кінетична енергія є більшою від висоти

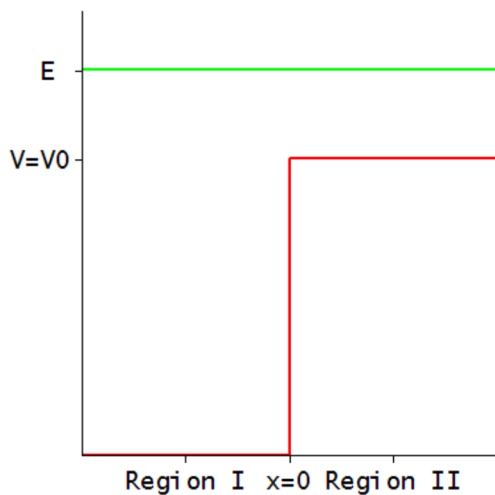


Рис. 33

сходинок. Графік потенціалу $V(x)$ (червона лінія) та енергії E (зелена лінія) для випадку, який розглядається, матимуть вигляд

```
> plot2:=plot(Heaviside(x-3),x=0..6,0..1.5, tickmarks=
[[1.5=`Region I`,3=`x=0`,4.5=`Region II`],[1=`V=V0`,1.3=`E`]], labels=[``,``]): plot3:=
plot(1.3,x=0..6,colour=green, labels=[``,``]): display (plot3,
plot2);
```

(рис. 33).

Для розв'язку рівняння Шредінгера поділимо вісь x на інтервали, для яких потенціал є постійним. Далі розв'яжемо рівняння Шредінгера на кожному із інтервалів і зшиємо розв'язки, вимагаючи, щоб хвильова функція $\psi(x)$ та її перша похідна були неперервними на границі інтервалів.

Розв'язок на інтервалі I

На інтервалі I, де $x < 0$, маємо $V(x)=0$. Стационарне рівняння Шредінгера (A3) матиме такий же вигляд, як і для вільної частинки

```
> Eq(A4) := subs(V(x)=0, Eq(A3));
```

$$Eq(A4) := E\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m}.$$

Для додатніх E розв'язком будуть плоскі хвилі

```
> Eq(A5) := dsolve(Eq(A4), psi(x));
```

$$Eq(A5) := \psi(x) = C_1 \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}\right) + C_2 \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}\right).$$

Щоб спростити вираз, позначимо хвильове число у першому інтервалі, як k_I

```
> Eq(A6) := k[I] = sqrt(2*E*m/`&hbar`;^2);
```

$$Eq(A6) := k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Перепишемо ці розв'язки через експоненти

```
> Eq(A7) := simplify(convert(subs(`&hbar;` = solve(Eq(A6), `&hbar;`), Eq(A5)), exp), power);
```

$$Eq(A7) := \psi(x) = -\frac{1}{2}iC_1(e^{ik_Ix} - e^{-ik_Ix}) + C_2\left(\frac{1}{2}e^{ik_Ix} + \frac{1}{2}e^{-ik_Ix}\right).$$

Перевизначимо константи інтегрування.

```
> Eq(A8) := eval(subs(x=0, rhs(Eq(A7)))) = A+B,
eval(subs(x=Pi/2/k[I], rhs(Eq(A7)))) = i*(A-B);
```

$$Eq(A8) := C_2 = A + B, \quad C_1 = i(A - B).$$

Тоді рівняння (A7) перепишеться у простішій формі

```
> Eq(A9) := simplify(expand(subs(Eq(A8), Eq(A7)), power));
```

$$Eq(A9) := \psi(x) = Ae^{ik_Ix} + Be^{-ik_Ix}$$

Це загальний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера (A3) в області I, де $x < 0$ та $V(x) = 0$. Отриманий загальний розв'язок, не залежить від часу

```
> Eq(A10) := simplify(subs(Eq(A9), Eq(A2)));
```

$$Eq(A10) := \psi(x, t) = A e^{i\frac{(-Et + k_Ix\hbar)}{\hbar}} + B e^{-i\frac{(Et + k_Ix\hbar)}{\hbar}}.$$

Доданок з коефіцієнтом A у рівнянні (A10) – це хвиля, що поширюється у додатному напрямку вісі $0x$, тобто рухається зліва направо. Рівні постійної фази описуються рівнянням

```
> Eq(A11) := op(1, subs(A=1, B=0, rhs(Eq(A10)))) = constant;
```

$$Eq(A11) := \frac{i(-Et + k_Ix\hbar)}{\hbar} = const.$$

Якщо E – додатна, то фазова швидкість цієї хвилі також додатна, а отже, вона поширюється справа наліво

```
> 0 < diff(solve(Eq(A11), x), t);
```

$$0 < \frac{E}{k_I\hbar}.$$

Аналогічно, доданок з коефіцієнтом B у рівнянні (A10) – це хвиля, яка поширюється у від'ємному напрямку вісі $0x$ і має від'ємну фазову швидкість

```
> Eq(A12) := op(1, subs(A=0, B=1, rhs(Eq(A10)))) = constant;
```

```
diff(solve(Eq(A12), x), t) < 0;
```


$$Eq(A12) := -\frac{i(Et + k_I x \hbar)}{\hbar} = const,$$

$$-\frac{E}{k_I \hbar} < 0.$$

Розв'язок на інтервалі II

Розв'яжемо рівняння Шредінгера в області II, де $x > 0$. Тут $V(x) = V_0$. Стационарне рівняння Шредінгера (A3) матиме вигляд

> Eq(A13) := subs(V(x)=V0, Eq(A3));

$$Eq(A13) := E\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + V_0 \psi(x).$$

Зрозуміло, що насправді це таке ж рівняння, як і для області I, за винятком зміщення енергії

> Eq(A14) := collect(lhs(Eq(A13)) - V0*psi(x), psi(x)) = rhs(Eq(A13)) - V0*psi(x);

$$Eq(A14) := (E - V_0)\psi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m}.$$

За аналогією із хвильовим числом k_I у області I, в області II визначаємо хвильове число k_{II} . Слід зазначити, що k_{II} завжди є дійсним, оскільки припускається, що енергія перевищує висоту потенціальної сходи, тобто що $E > V_0$

> Eq(A15) := k[II] = sqrt(2*m*(E-V0))/`ℏ`;

$$Eq(A15) := k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}.$$

Використовуючи це позначення, отримаємо розв'язок для стационарного рівняння Шредінгера рівняння (A13)

> Eq(A16) := simplify(subs(`ℏ` = solve(Eq(A15), `ℏ`), dsolve(Eq(A14), psi(x))));

$$Eq(A16) := \psi(x) = C_1 \sin(k_{II}x) + C_2 \cos(k_{II}x).$$

Щодо області I, то можна переписати рівняння (A16) в експоненціальній формі

> Eq(A17) := simplify(convert(Eq(A16), exp), power);

$$Eq(A17) := \psi(x) = -\frac{1}{2} i C_1 (e^{ik_{II}x} - e^{-ik_{II}x}) + C_2 \left(\frac{1}{2} e^{ik_{II}x} + \frac{1}{2} e^{-ik_{II}x} \right).$$

Змінюючи константи інтегрування

```
> Eq(A18) := eval(subs(x=0, rhs(Eq(A16)))) = C+D,
eval(subs(x=Pi/2/k[II], rhs(Eq(A16)))) = i*(C-D);
```

$$Eq(A18) := C_2 = C + D, \quad C_1 = i(C - D),$$

отримаємо загальний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера (A13) в області II

```
> Eq(A19) := simplify(expand(subs(Eq(A18), Eq(A17)), power));
```

$$Eq(A19) := \psi(x) = Ce^{ik_{II}x} + De^{-ik_{II}x}.$$

У розв'язках в області I, доданок із знаком "плюс" перед $ik_{II}x$ для додатних E і k_{II} відповідає хвилі, що поширюється у додатному напрямку $0x$, а доданок із $-ik_{II}x$ у експоненті відповідає хвилі, що поширюється у від'ємному напрямку $0x$.

Зшивання розв'язків на межі бар'єру

Для того, щоб знайти розв'язки рівняння Шредінгера по всій осі $0x$, слід узгодити розв'язки для областей I і II при $x=0$.

Хвилі, що падають зліва

Почнемо з розгляду хвилі, що падає на потенціальний бар'єр зліва. Така хвиля частково відбивається, а частково проходить. Схематично це можна зобразити так

```
> display(plot1, textplot([1.8, 1.4, `incident >>> `]),
textplot([1.7, 1.2, `<<< reflected `]),
textplot([4.4, 1.3, `transmitted >>> `]));
```

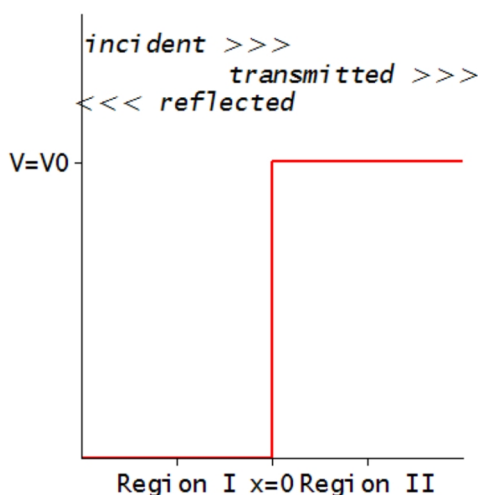


Рис. 34

(рис. 34).

Відповідно до (A9), розв'язок рівняння Шредінгера в області I є сумою падаючої хвилі (з знаком плюс перед ik_Ix) і відбитої хвилі (з знаком мінус перед ik_Ix)

```
> Eq(A9);
```

$$\psi(x) = Ae^{ik_Ix} + Be^{-ik_Ix}.$$

У області II загальний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера задається рівнянням (A19), але в цій області є лише хвиля, що пройшла (зі знаком плюс перед $ik_{II}x$)

```
> Eq(A20) := subs(D=0, Eq(A19));
```

$$Eq(A20) := \psi(x) = Ce^{ik_{II}x}.$$

Розв'язки для двох областей I та II пов'язані між собою наступними умовами неперервності при $x=0$

(i) ψ повинна бути неперервною (інакше її похідна в цій точці буде нескінченною),

(ii) $\frac{d}{dx}\psi(x)$ повинна бути неперервною (інакше $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$ а, отже, й кінетична енергія у цій точці будуть нескінченними).

З рівнянь (A19) та (A20) видно, що неперервність ψ (умова (i)) призводить до рівняння

>Eq(A21) := eval(subs(x=0, rhs(Eq(A9)) = rhs(Eq(A20))));

$$Eq(A21) := A + B = C.$$

Неперервність першої похідної (умова (ii)) дає співвідношення

>Eq(A22) := expand(subs(x=0, diff(rhs(Eq(A9)), x) / i = diff(rhs(Eq(A20)), x) / i));

$$Eq(A22) := Ak_I - k_II B = Ck_{II}.$$

Рівняння (A21) та (A22) – це два рівняння для трьох невідомих A , B і C . Третє рівняння можна знайти з умови нормування загальної хвильової функції. Виразимо амплітуду B відбитої хвилі та амплітуду C хвилі, що пройшла в через амплітуду A падаючої хвилі. Розв'язок рівняння (A21) та рівняння (A22) для B та C записується

**>solve({Eq(A21), Eq(A22)}, {B, C}): Eq(A23) := B = subs(%, B);
Eq(A24) := C = subs(%, C);**

$$Eq(A23) := B = \frac{A(k_I - k_{II})}{k_I + k_{II}},$$

$$Eq(A24) := C = \frac{2Ak_I}{k_I + k_{II}}.$$

Тепер підставимо вирази для B та C у рівняння (A9) та (A20) для хвильової функції в областях I та II, відповідно.

У області I, тобто при $x < 0$, розв'язок має вигляд

> Eq(A25) := subs(Eq(A23), Eq(A9));

$$Eq(A25) := \psi(x) = Ae^{ik_I x} + \frac{e^{-ik_I x} A(k_I - k_{II})}{k_I + k_{II}}.$$

У області II, тобто для $x > 0$, розв'язок буде

> Eq(A26) := subs(Eq(A24), Eq(A20));

$$Eq(A26) := \psi(x) = \frac{2Ak_I e^{ik_{II} x}}{k_I + k_{II}}.$$

Загальний розв'язок для хвилі, що падає зліва, одержимо з рівняння (A25) при $x < 0$ та з рівняння (A26) при $x > 0$. Це задовольняє вищезгадані умови неперервності: обидві $\psi(x)$ та їх перші похідні неперервні при $x = 0$.

Хвилі, що падають справа

Розглянемо хвилю, що падає на потенціальну сходинку справа. Схематичне зображення для цього випадку наведено нижче

```
> display(plot1, textplot([4.3, 1.4, '<<< incident`'],
textplot([4.4, 1.2, `reflected >>>`]),
textplot([1.6, 1.3, '<<< transmitted`']));
```

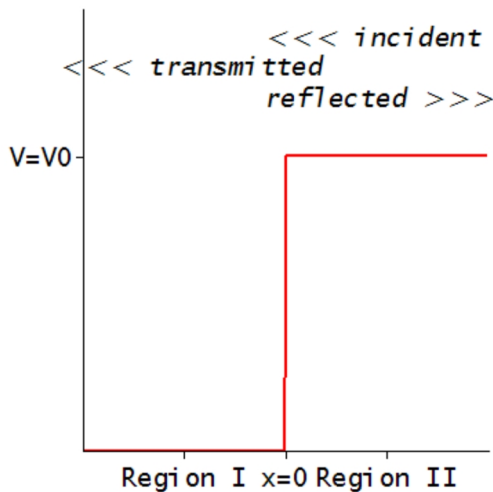


Рис. 35

(рис. 35).

У області I тепер поширюється хвиля лише зліва (знак мінус перед $ik_I x$). З рівняння (A9) отримуємо

```
> Eq(A27) := subs(A=0, Eq(A9));
```

$$Eq(A27) := \psi(x) = B e^{-ik_I x}.$$

У області II розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера є суперпозицією падаючої (зі знаком мінус перед $ik_{II} x$) та відбитої хвиль (з знаком плюс перед $ik_{II} x$), як вказано у рівнянні (A19)

```
> Eq(A19) := Eq(A19);
```

$$Eq(A19) := \psi(x) = C e^{ik_{II} x} + D e^{-ik_{II} x}.$$

З умови неперервності $\psi(x)$ при $x=0$ (умова (i)), із врахуванням (A27) та (A19), отримаємо

```
> Eq(A28) := eval(subs(x=0, rhs(Eq(A27)) = rhs(Eq(A19))));
```

$$Eq(A28) := B = C + D.$$

Неперервність першої похідної від $\psi(x)$ (умова (ii)) призводить до рівняння

```
> Eq(A29) := expand(subs(x=0, diff(rhs(Eq(A27)), x) / i = diff(rhs(Eq(A19)), x) / i));
```

$$Eq(A29) := -k_I B = C k_{II} - k_{II} D.$$

Коефіцієнт D тепер є амплітудою падаючої хвилі. Щоб виразити амплітуду C відбитої хвилі та амплітуду B хвилі, що пройшла через D , використаємо рівняння (A28) та (A29)

```
> solve({Eq(A28), Eq(A29)}, {B, C}): Eq(A30) := B = subs(%, B);
Eq(A31) := C = subs(%, C);
```

$$Eq(A30) := B = \frac{2k_{II} D}{k_I + k_{II}},$$

$$Eq(A31) := C = -\frac{D(k_I - k_{II})}{k_I + k_{II}}.$$

Як і раніше, замінімо вирази для B і C з рівняння (A27) та (A19) для хвильової функції в областях I та II, відповідно.

У області I, тобто при $x < 0$, отримуємо розв'язок

> Eq(A32) := subs(Eq(A30), Eq(A27));

$$Eq(A32) := \psi(x) = \frac{2e^{-ik_I x} k_{II} D}{k_I + k_{II}}.$$

У області II, тобто для $x > 0$ стаціонарний розв'язок має вигляд

> Eq(A33) := subs(Eq(A31), Eq(A19));

$$Eq(A33) := \psi(x) = -\frac{D(k_I - k_{II})e^{ik_{II}x}}{k_I + k_{II}} + De^{-ik_{II}x}.$$

Загальний розв'язок для падаючої хвилі $\psi(x)$ задається рівнянням (A32) при $x < 0$ та рівнянням (A33) при $x > 0$. Вони задовольняють необхідні умови неперервності обох $\psi(x)$ та їх перших похідних при $x = 0$.

2.6.2. В. Можливості відбивання та проходження для стаціонарного потоку частинок

Аналізуючи розв'язки (A25) та (A26), а також у розв'язки (A32) та (A33), бачимо, що завжди існують відбиті потоки, коли частинки рухаються в області швидкої зміни потенціалу, незалежно від того, чи це швидкозмінний підйом чи швидкозмінний спад потенціалу. У цій частині розв'язку задачі кількісно оцінимо таке твердження та обчислимо ймовірності відбивання й проходження. Відомо, що густина ймовірності потоку $j(x, t)$ є мірою того, скільки часток за одиницю часу перебувають у плоскій хвилі

> Eq(B1) := j(x, t) = -
i * hbar / 2 / m * (conjugate(psi(x, t)) * Diff(psi(x, t), x) -
Diff(conjugate(psi(x, t)), x) * psi(x, t));

$$Eq(B1) := j(x, t)$$

$$= -\frac{1}{m} \left(\frac{1}{2} i\hbar \left(\overline{\psi(x, t)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} \overline{\psi(x, t)} \right) \psi(x, t) \right) \right).$$

Для стаціонарних станів (B1) вираз для густини струму спрощується

> Eq(B2) := j(x) = subs(psi(x, t) = psi(x), Diff = diff,
rhs(Eq(B1)));

$$Eq(B2) := j(x) = -\frac{\frac{1}{2} i\hbar \left(\overline{\psi(x)} \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right) - \left(\frac{d}{dx} \overline{\psi(x)} \right) \psi(x) \right)}{m}.$$

Розглянемо лише хвилі, що падають зліва. Для них розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера заданий формулою (A25) для $x < 0$ і (A26) при $x > 0$

> **Eq(B3) := psi(x) = subs(k[II]=k[I], rhs(Eq(A25))) ;**

$$Eq(B3) := \psi(x) = Ae^{ik_I x}.$$

Щоб отримати падаючий потік, використаємо (B3) у формулі для $j(x)$ із (B2)

> **expand(subs(j(x) = `incident current`, Eq(B3), Eq(B2))) :
Eq(B4) := subs(k1=k[I], simplify(subs(k[I]=k1, %))) ;**

$$Eq(B4) := \text{incident current} = \frac{\hbar |A|^2 k_I}{m}.$$

У рівнянні (A25) вибираємо частину хвилі, яка відбиває бар'єр

> **Eq(B5) := psi(x) = rhs(Eq(A25)) - rhs(Eq(B3)) ;**

$$Eq(B5) := \psi(x) = \frac{e^{-ik_I x} A (k_I - k_{II})}{k_I + k_{II}}.$$

Підставляємо (B5) в (B2) для визначення $j(x)$ відбитого потоку

> **subs(conjugate(psi(x)) = subs(i=-
i, A=conjugate(A), rhs(Eq(B5))), Eq(B2)) :
subs(j(x) = `reflected current`, Eq(B5), %) :
Eq(B6) := factor(subs(k1=k[I], k2=k[II], simplify(subs(k[I]=
k1, k[II]=k2, %)))) ;**

$$Eq(B6) := \text{reflected current} = -\frac{\hbar |A|^2 k_I (k_I - k_{II})^2}{m (k_I + k_{II})^2}.$$

Частина хвилі, що пройшла, задана формулою (A26).

> **Eq(B7) := psi(x) = rhs(Eq(A26)) ;**

$$Eq(B7) := \psi(x) = \frac{2Ak_I e^{-ik_{II} x}}{k_I + k_{II}}.$$

Використаємо (B7) для $j(x)$ і отримаємо густину потоку, що пройшов

> **subs(conjugate(psi(x)) = subs(i=-
i, A=conjugate(A), rhs(Eq(B7))), Eq(B2)) :
subs(j(x) = `transmitted current`, Eq(B7), %) :
Eq(B8) := subs(k1=k[I], k2=k[II], simplify(subs(k[I]=k1, k[II]
]=k2, Diff=diff, %))) ;**

$$Eq(B8) := \text{transmitted current} = \frac{4\hbar k_I^2 |A|^2 k_{II}}{m (k_I + k_{II})^2}.$$

Тепер, коли розраховано частину відбитого потоку і того, що пройшов, можемо встановити їх відношення один до другого.

Ймовірність відбивання – це відношення густини відбитого потоку, до густини падаючого потоку, тобто

> Eq(B9):=`reflection probability`=`abs(reflected current / incident current)`;

$$Eq(B9) := reflection\ probability = \left| \frac{reflected\ current}{incident\ current} \right|.$$

Використовуючи результати із рівняння (B4) та (B6), отримуємо

> Eq(B10):=`simplify(subs(Eq(B4), Eq(B6), Eq(B9)))`;

$$Eq(B10) := reflection\ probability = \left| -\frac{(k_I - k_{II})^2}{(k_I + k_{II})^2} \right|.$$

Аналогічно, ймовірність проходження – це відношення потоку, що пройшов до падаючого

> Eq(B11):=`transmission probability`=`abs(transmitted current / incident current)`;

$$Eq(B11) := transmission\ probability = \left| \frac{transmitted\ current}{incident\ current} \right|.$$

З рівнянь (B4) та (B8) отримаємо

> Eq(B12):=`subs(Eq(B4), Eq(B8), Eq(B11))`;

$$Eq(B12) := transmission\ probability = \left| \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2} \right|.$$

Розглянемо залежність ймовірності відбивання та проходження (B10) і (B12) від енергії E частинок. Вводячи вирази для хвильових чисел з рівнянь (A6) та (A15) у рівняння (B10) та (B12), можемо отримати ймовірності відбивання та проходження, як функції від E/V_0

> `q(B13):=simplify(subs(Eq(A6), Eq(A15),`

`E=E/V0*V0, Eq(B10)))`;

`Eq(B14):=simplify(subs(Eq(A6), Eq(A15),`

`E=E/V0*V0, Eq(B12)))`;

$$Eq(B13) := reflection\ probability = \frac{\left(-1 + \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1} \right)^2}{\left(1 + \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1} \right)^2},$$

$$Eq(B14) := \text{transmission probability} = 4 \frac{\sqrt{\frac{E}{V_0} - 1} \frac{E}{V_0}}{\left(1 + \sqrt{\frac{E}{V_0} - 1} \frac{E}{V_0}\right)^2}$$

Залежності цих ймовірностей, як функції енергії E в одиницях висоти потенціальної сходинок V_0 виглядають так

```
p1:=plot(rhs(Eq(B13)),`E/V0`=1..2.0,color=blue):
p2:=plot(rhs(Eq(B14)),`E/V0`=1..2.0,color=red):
display(p1,p2,txtplot([1.8,0.85,`transmission`]),txtplot([1.8,0.15,`reflection`]),labels=[`E / V0`,`probability`]);
```

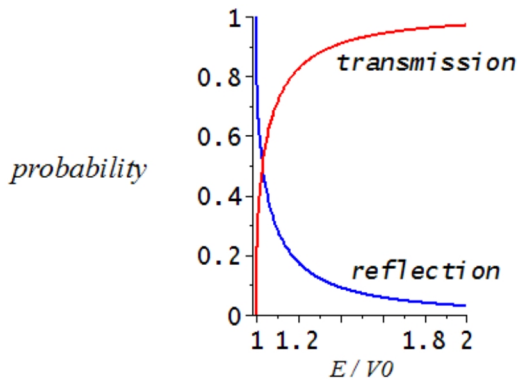


Рис. 36

(рис. 36).

Для енергій E , що перевищують порогове значення V_0 , ймовірність відбивання практично дорівнює одиниці, а ймовірність проходження, відповідно, близька до нуля. Коли енергія зростає, зростає і ймовірність проходження, а ймовірність відбивання зменшується. Для великих енергій ймовірність проходження наближається до 1, а ймовірність

відбивання прямує до нуля. Іншими словами, частинки з енергіями, які значно перевищують висоту потенціальної сходинок, взагалі не сприймають сходинок. Очевидно, що сума цих ймовірностей повинна бути збережена. Додаючи рівняння (B10) та еквівалент (B12), можна переконатися, що сума ймовірностей відбивання та проходження завжди однакова.

```
>lhs(Eq(B10))+lhs(Eq(B12))=simplify(subs(k[I]=k1,k[II]=k2,rhs(Eq(B10))+rhs(Eq(B12))))
```

$$\text{reflection probability} + \text{transmission probability} = 1.$$

2.6.3. С. Відбивання та проходження хвильового пакета на потенціальному бар'єрі

У цьому розділі опишемо відбивання і проходження однієї частинки на потенціальному бар'єрі. Розглянемо хвильовий пакет, який падає зліва.

Відповідно до рівнянь (A25) (та (A2)), функція $\phi_k(x, t)$ для $x < 0$

>Eq(C1):=phi[k](x<0,t)=exp(-
i*E*t/ħ)*subs(k[I]=k,rhs(Eq(A25)));

$$Eq(C1) := \phi_k(x < 0, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \left(A e^{ikx} + \frac{e^{-ikx} A (k - k_{II})}{k + k_{II}} \right).$$

Для $x > 0$ функція $\phi_k(x, t)$ задана формулою (A26)

>Eq(C2):=phi[k](0<x,t)=exp(-
i*E*t/ħ)*subs(k[I]=k,rhs(Eq(A26)));

$$Eq(C2) := \phi_k(0 < x, t) = \frac{2e^{-\frac{iEt}{\hbar}} A k e^{ik_{II}x}}{k + k_{II}}.$$

Оскільки, $\phi_k(x, t)$ позначена своїм хвильовим числом, то відповідно, виконано заміну k_I на k . Повернувшись до рівняння (A6), можна побачити, що співвідношення між енергією E та хвильовим числом падаючої хвилі k є наступним

> Eq(C3):=E =1/2*k^2*ħ^2/m;

$$Eq(C3) := E = \frac{1}{2} \frac{k^2 \hbar^2}{m}.$$

Відповідно до рівняння (A15), хвильове число k_{II} хвилі, яка пройшла, складає

> Eq(A15):=Eq(A15);

$$Eq(A15):=k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}.$$

Звідси виразимо k_{II} через хвильове число падаючої хвилі k

>Eq(C4):=k[II]=sqrt(simplify((subs(Eq(C3),rhs(Eq(A15))))
^2));

$$Eq(C4) := k_{II} = \frac{\sqrt{k^2 \hbar^2 - 2mV_0}}{\hbar}.$$

Із рівняння (C1) для функції ϕ_k отримуємо

> Eq(C5):=incident_wave=exp(-i*E*t/ħ)*exp(i*k*x);

$$Eq(C5) := \text{incident wave} = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{ikx}.$$

Відбита частина у (C1) має протилежний знак перед ikx в експоненті

>Eq(C6):=reflected_wave=exp(-i*E*t/ħ)*exp(-
i*k*x)*R(k);

$$Eq(C6) := \text{reflected wave} = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{-ikx} R(k).$$

Тут введено позначення $R(k)$ для коефіцієнта відбивання хвилі. Таким чином, здійснено перехід від хвильового числа k_{II} хвилі, що пройшла, замінивши рівняння (C4) на (C1) та отримано для $R(k)$

```
>Eq(C7):=R(k)=simplify(subs(A=1,x=0,t=0,k[I]=k,Eq(C4),rhs(Eq(C1)))-1);
```

$$Eq(C7) := R(k) = \frac{k\hbar - \sqrt{k^2\hbar^2 - 2mV_0}}{k\hbar + \sqrt{k^2\hbar^2 - 2mV_0}}.$$

ϕ_k для хвилі, що пройшла є функцією (C2) для $x > 0$

```
>Eq(C8):=transmitted_wave=exp(-i*E*t/\hbar)*subs(Eq(C4),exp(i*k[II]*x))*T(k);
```

$$Eq(C8) := transmitted\ wave = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{\frac{i\sqrt{\hbar^2 k^2 - 2mV_0}x}{\hbar}} T(k).$$

Використовуючи рівняння (C4) в (C1), можна побачити, що коефіцієнт $T(k)$ хвилі, що пройшла визначається співвідношенням

```
>Eq(C9):=T(k)=simplify(subs(A=1,x=0,t=0,k[I]=k,Eq(C4),rhs(Eq(C2))));
```

$$Eq(C9) := T(k) = \frac{2\hbar k}{\hbar k + \sqrt{\hbar^2 k^2 - 2mV_0}}.$$

Як і для вільних частинок, формуємо $\phi_k(x,t)$ хвильових пакетів підсумовуючи їх з ваговою функцією Гауса, які центровані навколо середнього хвильового числа k_0 . Крім того, помножимо вагову функцію Гауса на фазовий множник $\exp(-ikx_0)$, що забезпечує центрування хвильового пакета при $x = x_0$ для $t=0$.

```
> Eq(C10):=weight=exp(-(k-k0)^2/2/sigma^2)*exp(-i*k*x0);
```

$$Eq(C10) := weight = e^{-\frac{1(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx_0}.$$

Використовуючи цю вагову функцію, для хвильової функції падаючого хвильового пакета отримаємо

```
>Eq(C11):=psi[incident](x,t)=Int(rhs(Eq(C10))*subs(Eq(C3),rhs(Eq(C5))),k=-infinity..infinity);
```

$$Eq(C11) := \psi_{incident}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx_0} e^{-\frac{ik^2\hbar t}{2m}} e^{ikx} dk.$$

Тут використано наближення, поширивши інтегрування до $-\infty$. Центр хвильового пакету знаходиться у точці k_0 . Якщо σ – мале, то вагова функція (B10) на великих відстанях прямує нуля. Надалі будемо використовувати вказану апроксимацію без подальшого згадування.

Інтегральний вираз (C11) є випадком, який розглядається і для вільних частинок

```
> Eq(C12):=Int(exp(-a2*k^2+a1*k+a0),k=-
infinity..infinity)= combine(expand(int(exp(-
a2*k^2+a1*k+a0),k=-infinity..infinity)));`;
```

$$Eq(C12) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a_2 k^2 + a_1 k + a_0} dk = \sqrt{\frac{\pi}{a_2}} e^{a_0 + \frac{a_1^2}{4a_2}}.$$

Три константи a_2 , a_1 та a_0 тепер задані

```
> op(1,combine(op(1,rhs(Eq(C11))))): tmp:=collect(%,k):
Eq(C13):=a2[inc]=-coeff(tmp,k,2);
Eq(C14):=a1[inc]=coeff(tmp,k,1);
Eq(C15):=a0[inc]=coeff(tmp,k,0);
```

$$Eq(C13) := a_{2inc} = \frac{1}{2\sigma^2} + \frac{i\hbar t}{2m},$$

$$Eq(C14) := a_{1inc} = \frac{k_0}{\sigma^2} - ix_0 + ix,$$

$$Eq(C15) := a_{0inc} = -\frac{1}{2} \frac{k_0^2}{\sigma^2}.$$

З точки зору цих констант можна записати хвильову функцію падаючої хвилі як

```
>Eq(C16):=psi[incident](x,t)=sqrt(Pi/a2[inc])*exp(phi[in
c]); Eq(C17):=phi[inc]=a0[inc]+a1[inc]^2/4/a2[inc];
```

$$Eq(C16) := \psi_{incident}(x, t) = \sqrt{\frac{\pi}{a_{2inc}}} e^{\phi_{inc}},$$

$$Eq(C17) := \phi_{inc} = a_{0inc} + \frac{1}{4} \frac{a_{1inc}^2}{a_{2inc}}$$

Зробимо те ж саме для відбитого хвильового пакета. Беремо відбиту хвилю (С6), помножимо її на вагову функцію (С10) та інтегруємо по k .

```
>Eq(C18):=psi[reflected](x,t)=Int(rhs(Eq(C10))*subs(Eq(C
3),rhs(Eq(C6))), k=-infinity..infinity);
```

$$Eq(C18) := \psi_{reflected}(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx_0} e^{-\frac{ik^2\hbar t}{2m}} e^{-ikx} R(k) dk.$$

Цей інтеграл складніший від попереднього, оскільки коефіцієнт $R(k)$ також залежить від k . Однак, оскільки $R(k)$ значно повільніше змінюється від k , порівняно з експонентами, можемо наблизити $R(k)$ його значенням у центрі хвильового пакета k_0 , тобто середнім хвильовим числом. $R(k_0)$ тоді буде константою, яку назвемо R

```
> Eq(C19):=R=simplify(subs(k=k0,rhs(Eq(C7))));
```

$$Eq(C19) := R = \frac{\hbar k_0 - \sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}}{\hbar k_0 + \sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}}$$

З таким наближенням для відбитого хвильового пакета маємо

> Eq(C20) := lhs(Eq(C18)) = R * subs(R(k)=1, rhs(Eq(C18)));

$$Eq(C20) := \psi_{reflected}(x, t) = R \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx_0} e^{-\frac{ik^2 \hbar t}{2m}} e^{-ikx} dk \right).$$

Це знову є інтегралом вигляду (C12). Константи a_2 , a_1 та a_0 наступні

> op(1, combine(op(1, rhs(Eq(C20))/R))):

tmp:=collect(%,k): Eq(C21):=a2[refl]=-coeff(tmp,k,2);

Eq(C22):=a1[refl]=coeff(tmp,k,1);

Eq(C23):=a0[refl]=coeff(tmp,k,0);

$$Eq(C21) := a_{2refl} = \frac{1}{2\sigma^2} + \frac{i\hbar t}{2m},$$

$$Eq(C22) := a_{1refl} = \frac{k_0}{\sigma^2} - ix_0 - ix,$$

$$Eq(C23) := a_{0refl} = -\frac{1}{2} \frac{k_0^2}{\sigma^2}.$$

Використовуючи інтеграл (C12), можна записати хвильову функцію відбитого хвильового пакета

> Eq(C24) := psi[reflected](x,t) = sqrt(Pi/a2[refl]) * R * exp(phi[refl]);

Eq(C25) := phi[refl] = a0[refl] + a1[refl]^2/4/a2[refl];

$$Eq(C24) := \psi_{refl}(x, t) = \sqrt{\frac{\pi}{a_{2refl}}} Re^{\phi_{refl}},$$

$$Eq(C25) := \phi_{refl} = a_{0refl} + \frac{1}{4} \frac{a_{1refl}^2}{a_{2refl}}.$$

Так само можна побудувати хвильовий пакет для хвилі, що пройшла. Для цього помножимо хвильову функцію (C8) з ваговою функцією (C10) і проінтегруємо по k

> Eq(C26) := psi[transmitted](x,t) = Int(rhs(Eq(C10)) * subs(Eq(C3), rhs(Eq(C8))), k=-infinity..infinity);

$$Eq(C26) := \psi_{transmitted}(x, t)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx_0} e^{-\frac{ik^2 \hbar t}{2m}} e^{\frac{i\sqrt{k^2 \hbar^2 - 2mV_0} x}{\hbar}} T(k) dk.$$

Так само, як це робили для $R(\mathbf{k})$, змінний коефіцієнт $T(\mathbf{k})$ замінимо його значенням у центрі хвильового пакета k_0 і назвемо константу $T(\mathbf{k}_0) = T$

> Eq(C27) := T = subs(k=k0, rhs(Eq(C9)));

$$Eq(C27) := T = \frac{2\hbar k_0}{k_0\hbar + \sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}} .$$

Це означає, що коефіцієнт T можна винести з під інтегралу та спростити Eq (C26) до

> Eq(C28) := lhs(Eq(C26)) = T * subs(T(k)=1, rhs(Eq(C26)));

$$Eq(C28) := \psi_{transmitted}(x, t) = T \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx_0} e^{-\frac{ik^2\hbar t}{2m}} e^{\frac{i\sqrt{\hbar^2 k^2 - 2mV_0}x}{\hbar}} dk \right).$$

Цей інтеграл все ще є складним, оскільки коефіцієнт перед експонентою нелінійний по змінній k . Однак, ця нелінійна функція від k змінюється повільно.

Можемо розкласти у ряд Тейлора внесок навколо центру хвильового пакету k_0 і знехтувати внесками порядку $(k - k_0)^2$ і вище

> Eq(C29) := rhs(Eq(C4)) = subs(k=k0, rhs(Eq(C4))) + subs(k=k0, diff(rhs(Eq(C4)), k)) * (k - k0);

$$Eq(C29) := \frac{\sqrt{\hbar^2 k^2 - 2mV_0}}{\hbar} = \frac{\sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}}{\hbar} + \frac{\hbar k_0 (k - k_0)}{\sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}} .$$

Підставляючи розклад у ряд Тейлора в рівняння (C28), отримаємо

> Eq(C30) := psi[transmitted](x, t) = T * Int(rhs(Eq(C10)) * subs(Eq(C3), exp(-i*E*t/\hbar)) * exp(i*rhs(Eq(C29))*x), k = -infinity..infinity);

$$Eq(C30) := \psi_{transmitted}(x, t) = T \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1(k-k_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-ikx_0} e^{-\frac{ik^2\hbar t}{2m}} e^{i\left(\frac{\sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}}{\hbar} + \frac{\hbar k_0 (k - k_0)}{\sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}}\right)x} (dk) \right).$$

Інтеграл (C30) містить експоненціальні лінійні та квадратичні внески від k . Звідси знову одержуємо рівняння (C12), але тепер із наступними коефіцієнтами

> op(1, combine(op(1, rhs(Eq(C30))/T))):

tmp := collect(%, k): Eq(C31) := a2[trans] = -coeff(tmp, k, 2);

Eq(C32) := a1[trans] = coeff(tmp, k, 1);

Eq(C33) := a0[trans] = coeff(tmp, k, 0);

$$Eq(C31) := a_{2trans} = \frac{1}{2\sigma^2} + \frac{i\hbar t}{2m},$$

$$Eq(C32) := a_{1trans} = \frac{i\hbar k_0 x}{\sqrt{\hbar^2 k_0^2 - 2mV_0}} - ix_0 + \frac{k_0}{\sigma^2},$$

$$Eq(C33) := a_{0trans} = -\frac{1}{2} \frac{k_0^2}{\sigma^2} + i \left(\frac{\sqrt{k_0^2 \hbar^2 - 2mV_0}}{\hbar} - \frac{\hbar k_0^2}{\sqrt{k_0^2 \hbar^2 - 2mV_0}} \right) x.$$

Приймаючи ці коефіцієнти як скорочення, можна використовувати інтеграл (C12) для запису хвильового пакета, що пройшов, у вигляді

> Eq(C34) := psi[transmitted](x, t) = sqrt(Pi/a2[trans]) * T * exp(phi[trans]);

Eq(C35) := phi[trans] = a0[trans] + a1[trans]^2 / 4 / a2[trans];

$$Eq(C34) := \psi_{transmitted}(x, t) = \sqrt{\frac{\pi}{a_{2trans}}} T e^{\phi_{trans}},$$

$$Eq(C35) := \phi_{trans} = a_{0trans} + \frac{1}{4} \frac{a_{1trans}^2}{a_{2trans}}.$$

Тепер розраховано всі окремі компоненти хвильового пакета, і можна знайти їх суперпозицію. Хвильова функція хвильового пакета

> Eq(C36) := psi(x < 0, t) = psi[incident](x, t) + psi[reflected](x, t);

Eq(C37) := psi(x > 0, t) = psi[transmitted](x, t);

$$Eq(C36) := \psi(x < 0, t) = \psi_{incident}(x, t) + \psi_{reflected}(x, t),$$

$$Eq(C37) := \psi(0 < x, t) = \psi_{transmitted}(x, t).$$

Спочатку розглянемо хвильову функцію для $x < 0$. Замінімо рівняння (C16) на (C24) для відбитої частини хвильового пакета

> Eq(C38) := subs(Eq(C16), Eq(C24), Eq(C36));

$$Eq(C38) := \psi(x < 0, t) = \sqrt{\frac{\pi}{a_{2inc}}} e^{\phi_{inc}} + \sqrt{\frac{\pi}{a_{2refl}}} R e^{\phi_{refl}}.$$

Зауважимо, що у рівняннях (C13) і (C21) $a_{2inc} = a_{2inc}$, а квадрат модуля хвильової функції для розрахунку густини ймовірності набуває вигляду

> Eq(C39) := abs(psi(x < 0, t))^2 = Pi / abs(a2[inc]) * combine(expand((exp(phi[inc]) + R * exp(phi[refl])) * (exp(conjugate(phi[inc])) + R * exp(conjugate(phi[refl]))))));

$$\begin{aligned}
 Eq(C39) &:= |\psi(x < 0, t)|^2 \\
 &= \frac{1}{|a_{2inc}|} \left(\pi \left(e^{\phi_{inc} + \overline{\phi_{inc}}} + Re e^{\phi_{inc} + \overline{\phi_{refl}}} + Re e^{\phi_{refl} + \overline{\phi_{inc}}} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + R^2 e^{\phi_{refl} + \overline{\phi_{refl}}} \right) \right).
 \end{aligned}$$

Замінімо a_{2inc} з рівнянь (C13), а також ϕ_{inc} і ϕ_{refl} з (C17) й (C25), відповідно, та отримаємо

```

> evalc(subs(Eq(C13), Eq(C14), Eq(C15), Eq(C17))) :
evalc(subs(Eq(C21), Eq(C22), Eq(C23), Eq(C25))) :
simplify(subs(%, %, Eq(C13), rhs(Eq(C39))), power) :
Eq(C40) := abs(psi(x < 0, t))^2 = factor(evalc(%));

```

$$\begin{aligned}
 Eq(C40) &:= |\psi(x < 0, t)|^2 \\
 &= \frac{1}{\sqrt{m^2 + \hbar^2 \sigma^4 t^2}} \left(2\pi \sigma^2 m \left(e^{-\frac{\sigma^2 (\hbar k_0 t + m x_0 - m x)^2}{m^2 + \hbar^2 \sigma^4 t^2}} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 2Re \frac{\sigma^2 (2\hbar k_0 t m x_0 + \hbar^2 k_0^2 t^2 + m^2 x_0^2 + m^2 x^2)}{m^2 + \hbar^2 \sigma^4 t^2} \cos \left(\frac{1}{m^2 + t^2 \hbar^2 \sigma^4} \left(2m x (-k_0 m \right. \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \left. + \sigma^4 \hbar x_0 t \right) \right) \right) + R^2 e^{-\frac{\sigma^2 (\hbar k_0 t + m x_0 + m x)^2}{m^2 + \hbar^2 \sigma^4 t^2}} \right).
 \end{aligned}$$

Наведений вираз є сумою двох гауссівських хвильових пакетів та інтерференційних доданків. Знаменники дробів в експонентах такі ж, як і для вільного хвильового пакета за відсутності будь-якого потенціалу. Отже, хвильові пакети, розглянуті вище, поширюються в часі так, як вільний хвильовий пакет. Упорядкуємо наведений вище вираз, ввівши позначення W для квадрата півширини

```

> Eq(C41) := W = simplify(2*sigma*sqrt(expand(rhs(Eq(C13))*subs(i=-i, rhs(Eq(C13))))))^2;

```

$$Eq(C41) := W = \frac{m^2 + \hbar^2 \sigma^4 t^2}{\sigma^2 m^2}.$$

За допомогою цього позначення та заміни $v_0 = k_0 \hbar / m$ для середньої швидкості пакета, отримуємо остаточний вираз для густини ймовірності хвильового пакета в лівому півпросторі $x < 0$

```

> Eq(C42) := simplify(subs(`&hbar;`^2 = solve(Eq(C41), `&hbar;`^2), subs(k0 = m*v0/`&hbar;`, Eq(C40))), power);

```

$$Eq(C42) := |\psi(x < \mathbf{0}, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{W}} \left(2\pi\sigma \left(e^{-\frac{(v_0 t + x_0 - x)^2}{W}} + 2R e^{-\frac{v_0 t x_0 + v_0^2 t^2 + x_0^2 + x^2}{W}} \cos \left(\frac{1}{(m\hbar W \sigma^2)(2x(-m^2 v_0 + \sigma^4 t \hbar^2 x_0))} \right) + R^2 e^{-\frac{(v_0 t + x_0 + x)^2}{W}} \right) \right).$$

Слід чітко розрізняти три внески у густину ймовірності (C42). Коефіцієнт для падаючого пакету дорівнює одиниці (множник перед експонентою), для відбитого пакету – R^2 , і для інтерференційного доданку складає $2R$. Візьмемо від’ємне значення для x_0 . Тоді падаючий пакет починається від $x = x_0$ при $t = \mathbf{0}$ і поширюється вправо зі швидкістю v_0 до наступної сходинки. Після цього його більше немає і з цього моменту експонента буде мати пік при додатних x , коли $\psi(x < \mathbf{0}, t)$ не є дійсною.

Відбитий пакет, який відповідає доданку із коефіцієнтом біля експоненти R^2 починається при $x = -x_0$ у момент $t = \mathbf{0}$. Він теж не буде тут видимим, оскільки значення « $-x_0$ » є додатним і виходить за область визначення $\psi(x < \mathbf{0}, t)$. Цей пакет поширюється вправо зі швидкістю $-v_0$. Для часу $t = |x_0|/v_0$, коли падаючий пакет сягає кроку при $x = \mathbf{0}$, відбитий пакет стає видимим для $x < \mathbf{0}$.

Доданок, який відповідає за інтерференцію (він має коефіцієнт $2R$), має піки, коли аргумент експоненти дорівнює нулю. Оскільки, чисельник можна записати, як $(v_0 t + x_0)^2 + x^2$, то легко можна побачити, що таке трапиться, коли $t = |x_0|/v_0$ і $x = \mathbf{0}$. Отже, інтерференційний доданок дає внесок лише за умови, коли падаючий і відбитий пакети зустрічаються на певному кроці і лише у безпосередній близькості до сходинки. Він описує взаємодію між падаючим і відбитим пакетами.

Для розрахунку густини ймовірності у правому півпросторі ($x > \mathbf{0}$), візьмемо квадрат модуля хвильового пакета, що пройшов (C34). Підставивши (C35) у вираз для ψ , отримаємо шукану інтерференцію між падаючим та відбитим пакетами

```
> v0=(k0^2-K0^2)*`&hbar;`^2/2/m:
simplify(subs(%,Eq(C32)),power):
simplify(subs(%%,Eq(C33)),power):

abs(psi(x>0,t))^2=Pi/abs(rhs(Eq(C31)))*T^2*
exp(combine(2*Re(rhs(%))+Re(evalc(rhs(%%)^2/2/rhs(Eq(C31)
))))):

Eq(C43):=subs(K0=sqrt(k0^2-2*m*v0/`&hbar;`^2),%);
```


$$Eq(C43) := |\psi(0 < x, t)|^2$$

$$= \frac{2\pi T^2 e^{-\frac{k_0^2}{4\sigma^4} - \frac{1}{4}k_0^2 \frac{k_0^2 x^2}{\hbar^2} + \frac{1}{2} \frac{k_0 x x_0}{\sqrt{k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}} - \frac{1}{4}x_0^2 \left(\frac{1}{2\sigma^2} \frac{k_0^2 x}{\sqrt{k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}} - \frac{k_0 x_0}{2\sigma^2} \right) t \hbar}}{\sigma^2 + \frac{\sigma^2 \left(\frac{1}{4\sigma^4} + \frac{t^2 \hbar^2}{4m^2} \right)}{m \left(\frac{1}{4\sigma^4} + \frac{1}{4} \frac{t^2 \hbar^2}{m^2} \right)}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\sigma^4} + \frac{t^2 \hbar^2}{m^2}}}$$

Хвильовий пакет, що пройшов сповільнюється у порівнянні із падаючим хвильовим пакетом, що робить вище вказаний вираз складним. Введемо скорочення для співвідношення середньої швидкості пакету, який падає до середньої швидкості пакета, що пройшов

$$> Eq(C44) := \alpha = k_0 / \sqrt{k_0^2 - 2 * m * V_0 / \hbar^2};$$

$$Eq(C44) := \alpha = \frac{k_0}{\sqrt{k_0^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}}$$

Використовуючи це позначення та ті самі скорочення, що й раніше, для квадрата залежності півширини пакета та v_0 для середньої швидкості падаючого пакета, можемо записати остаточний результат для густини ймовірності у правій половині простору $x > 0$ у вигляді

$$> \text{simplify}(\text{subs}(V_0 = \text{solve}(\alpha^2 = k_0^2 / (k_0^2 - 2 * m * V_0 / \hbar^2), V_0), Eq(C43))):$$

$$Eq(C45) := \text{simplify}(\text{subs}(\hbar^2 = \text{solve}(Eq(C41), \hbar^2), \hbar^2), k_0 = m * v_0 / \hbar, \%), \text{power});$$

$$Eq(C45) := |\psi(0 < x, t)|^2 = \frac{2\pi\sigma T^2 e^{-\frac{(-v_0 t + \alpha x - x_0)^2}{w}}}{\sqrt{W}}$$

Отримано вираз для хвильового пакету, який рухається вправо зі швидкістю v_0/α . Для $t=0$ він має свій пік при $x = x_0/\alpha$, але там його не видно, тому що x_0 є від'ємним, а $\psi(x > 0, t)$ має місце лише для додатних x . При $t = x_0/v_0$, коли падаючі та відбиті пакети зустрічаються (для $x=0$), також утворюється пакет, що проходить і рухається далі вправо.

2.7. Віртуальні рівні

Потенціальна яма між точками $x=0$ і $x=a$. обмежена справа напівпрозорою перегородкою так, що між хвильовими функціями всередині і поза ямою існує лише слабкий зв'язок. Потрібно показати, що при великих значеннях коефіцієнта непроникності існують вузькі смуги енергії, для яких згаданий зв'язок стає досить сильним. Як приклад, розглянемо випадок $\frac{\Omega a}{\pi} = 50$ (Задача 27 із [7]).

Отримавши точні співвідношення для фазового кута δ

$$Eq(27.3) := \cot(ka + \delta) - \cot(ka) = 2 \frac{\Omega}{k},$$

та амплітуди A

$$Eq(27.4) = \frac{1}{A^2} = 1 + 4 \frac{\Omega}{k} \sin(ka) \cos(ka) + 4 \frac{\Omega^2}{k^2} \sin^2(ka),$$

$$Eq(27.4a) = \frac{1}{A^2} = 1 + 2 \frac{\Omega}{k} \sin(2ka) + 2 \frac{\Omega^2}{k^2} (1 - \cos(2ka)),$$

можна безпосередньо перейти до дослідження віртуальних рівнів.

Введемо позначення $\Omega a = p$ і $ka = b$ і складемо програму для розрахунку A і δ . Вираз для δ отримуємо з (27.3) шляхом застосування до цього співвідношення серії символьних операцій, включаючи символьний розв'язок рівняння за допомогою функції **solve**:

```
>#Fluegge27;
```

```
>restart; s:=factor(expand(cot(b+d)-cot(b)));
```

$$s := -\frac{1 + \cot(b)^2}{\cot(b) + \cot(d)}$$

```
>s2:=subs(cot(d)=1/r,s);
```

$$s2 := -\frac{1 + \cot(b)^2}{\cot(b) + \frac{1}{r}}.$$

Тут введено позначення $r = \tan(\delta)$ для шуканої величини, явний вигляд якої можна отримати як розв'язок рівняння $s2 = 2p/b$ відносно r :

```
>dr:=solve(s2=2*p/b,r);
```

$$dr := -2 \frac{p}{b + b \cot(b)^2 + 2p \cot(b)}$$

```
>dr2:=(b) → -2*p/(b+b*cot(b)^2+2*p*cot(b));
```

$$dr2 := b \rightarrow -2 \frac{p}{b + b \cot(b)^2 + 2p \cot(b)}.$$

Для знаходження екстремальних значень амплітуди, можна досліджувати величину $\frac{1}{A^2} = A2(b, p)$ по $ka = b$

```
A2:=(1+2*p/b*sin(2*b)+2*(p/b)^2*(1-cos(2*b)));
Ab:=factor(diff(A2,b)/2/p);
```

$$A2 := 1 + \frac{2p \sin(2b)}{b} + \frac{2p^2(1 - \cos(2b))}{b^2},$$

$$Ab := \frac{-\sin(2b)b + 2\cos(2b)b^2 - 2p + 2p\cos(2b) + 2p\sin(2b)b}{b^3}.$$

Очевидно, що похідна Ab є періодичною по параметру b функцією, корені якої слід шукати на інтервалі $(n-1)\pi \leq 2ka \leq n\pi$. При заданому значенні p можна зробити числовий розрахунок власних значень b_n , які відповідають максимальному або мінімальному проникненню зовнішньої хвилі всередині порожнини

```
>p:=50*Pi; bn:=proc(n) fsolve(Ab=0,b,Pi/2*(n-1)..Pi/2*n); end proc;
```

$$p := 50\pi$$

```
bn:=proc(n) fsolve(Ab=0,b,1/2*Pi*(n-1)..1/2*Pi*n) end proc
>bn(100);
```

156.6874228.

Аналогічно обчислюються і абсолютні значення амплітуди A

```
>A:=(b) -> 1/sqrt(1+2*p/b*sin(2*b)+2*(p/b)^2*(1-cos(2*b)));
```

Побудуємо тепер графіки отриманих величин. На рис. 37 зображено графік функції $\Phi(v)$

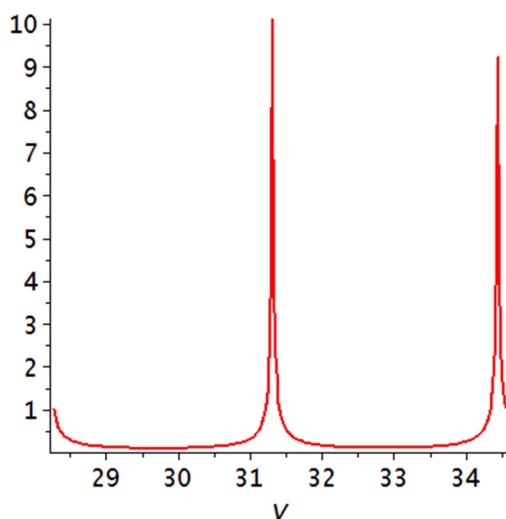


Рис. 37.

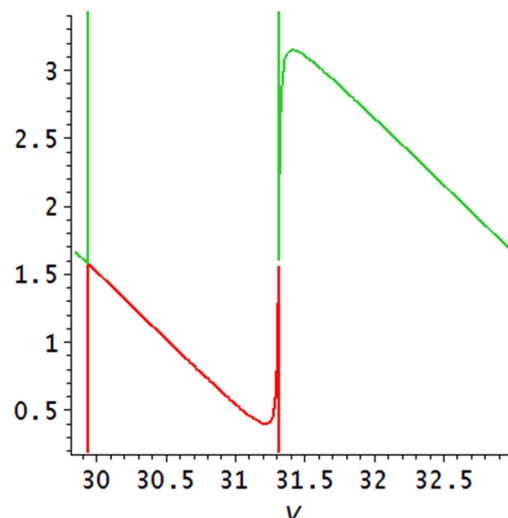


Рис. 38.

```
>plot(A(v),v=9*Pi..11*Pi);
```

Графік величини $\delta = \arctan(dr2(v))$ не має розривів, якщо $0 \leq \delta \leq \pi$. У цьому випадку результат представлений на рис. 38.

```
plot({arctan(dr2(v)),  
Pi+arctan(dr2(v))},v=19/2*Pi..21/2*Pi, 0.2..3.4);
```

2.8. Потенціальний гребінець Дірака (періодичний потенціал)

Цей періодичний потенціал утворений послідовністю δ -функцій Дірака. Визначмо зони дозволених значень енергії, якщо інтервал між сусідніми особливими точками дорівнює a (Задача 29 із [7]).

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na)$$

Умова для дозволених енергетичних зон визначається співвідношенням

$$Eq(29.7) := \cos(Ka) = \cos(Ka) + \frac{V_0}{k} \sin(ka).$$

Таким чином, визначення меж енергетичних зон у даному випадку зводиться до вирішення нерівності

$$Eq(29.8) := \left| \cos(Ka) + \frac{V_0}{k} \sin(ka) \right| \leq 1.$$

Нерівність

$$\left(\cos y + \frac{W}{y} \sin y \right)^2 \leq 1$$

перетворити до вигляду

$$\left(\frac{W^2}{y^2} - 2 \right) \sin^2 y + 2 \frac{W}{y} \sin y \cos y \leq 0.$$

Рівняння

$$\left(\frac{W^2}{y^2} - 2 \right) \sin^2 y + 2 \frac{W}{y} \sin y \cos y = 0$$

має дві групи розв'язків. По-перше, його коренями є точки $\sin y = 0$ або $y = n\pi$. Крім того, вказане рівняння задовольняють точки де $\cos y = \frac{y^2 - W^2}{2Wy}$. Такі точки є по одній на кожному з інтервалів $\pi(n-1) < y < n\pi$, а кожен з цих коренів можна знайти чисельно. Квадрати відповідних значень y визначають власні значення енергії границь зон

>#Fluegge 29 with 28;

restart;

>P:=(w,y) -> (cot(y)-y/2/w+w/2/y);

$$P := (W, y) \rightarrow \cot y - \frac{y}{2W} + \frac{W}{2y}$$

>w0:=4.0;

N:=10;

y_P:=matrix(4,N);

W0 := 4.0

N := 10

```

y_P := array(1..4,1..10, [])

>for n from 1 to N do
y_P[1,n]:=fsolve(P(w0,y),y=(n-1)*Pi..n*Pi);
y_P[2,n]:=evalf(Pi*n);
y_P[3,n]:=y_P[1,n]^2;
y_P[4,n]:=y_P[2,n]^2;
od;

```

які записуються в матрицю y_P і можуть бути використані для подальших розрахунків

```

>print(y_P);

[2.153747973, 4.577859456, 7.287194335, 10.17397019,
13.15666747, 16.19232721, 19.25912069, 22.34541174, 25.44459754
, 28.55270584]
[3.141592654, 6.283185308, 9.424777962, 12.56637062,
15.70796327, 18.84955592, 21.99114858, 25.13274123, 28.27433389
, 31.41592654]
[4.638630331, 20.95679720, 53.10320128, 103.5096694,
173.0978989, 262.1914605, 370.9137298, 499.3174258, 647.4275440
, 815.2570108]
[9.869604404, 39.47841761, 88.82643963, 157.9136706,
246.7401101, 355.3057584, 483.6106159, 631.6546817, 799.4379569
, 986.9604404].

```

Щоб зобразити графік, такий як на рис. 17 і рис. 18 в [7], необхідно за відомим k для дозволених зон обчислити значення K зі співвідношення (29.7). Це можна зробити, зокрема, так

```

>KY0:=(w,y) → arccos(cos(y)+w/y*sin(y));

```

$$KY := (w, y) \rightarrow \arccos(\cos y) + \frac{w \sin(y)}{y}$$

$$KY := (W, y) \rightarrow \arccos(\cos(y)) + \frac{W \sin(y)}{y}.$$

Графіки на рис. 18 будують, як графіки параметричних функцій

```

>plot([KY0(w0, y), y^2/Pi^2,
y=y_P[1,1]..y_P[2,1]]);
plot([Pi-KY0(w0, y)+Pi, y^2/Pi^2,
y=y_P[1,2]..y_P[2,2]]);
plot([KY0(w0, y)+2*Pi, y^2/Pi^2,
y=y_P[1,3]..y_P[2,3]]);

```

Графік, зображений на рис. 39 одержують складанням трьох попередніх і додатковим нанесенням параболи (іншим стилем). Додавання

графіків стає доступним після завантаження пакету **plots** і реалізується функцією **display** (рис. 39)

```
>with(plots):  
G1:=plot([KY0(w0,y),y^2/Pi^2,y=y_P[1,1]..y_P[2,1]]):  
G2:=plot([Pi-  
KY0(w0,y)+Pi,y^2/Pi^2,y=y_P[1,2]..y_P[2,2]]):  
G3:=plot([KY0(w0,y)+2*Pi,y^2/Pi^2,y=y_P[1,3]..y_P[2,3]])  
: G4:=plot(x^2/Pi^2,x=0..3*Pi,color=green,style=point):  
display([G1,G2,G3,G4]);
```

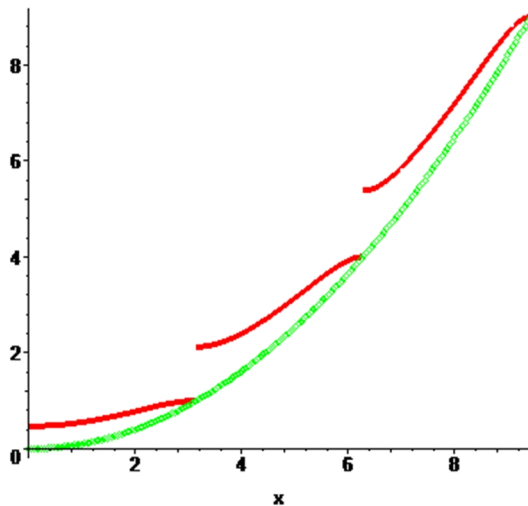


Рис. 39

2.9. Гармонічний осцилятор – аналітичний розв’язок

2.9.1. А. Рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора

У цій задачі вивчимо поведінку одновимірної коливної квантової системи. Для цього розв’яжемо стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\begin{aligned} > \text{Eq(A1)} := -\hbar^2/2/m * \text{diff}(\text{diff}(\psi(x), x), x) + \\ & V(x) * \psi(x) = E * \psi(x); \end{aligned}$$

$$\text{Eq(A1)} := -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + V(x) \psi(x) = E \psi(x).$$

Найпростішим класичним прикладом одномірного гармонічного осцилятора є вантаж, прикріплений до пружини, яка підкоряється закону Гука, тобто відновна сила F , пропорційна зміщенню x

$$> F = -K * x;$$

$$F = -Kx.$$

Оскільки, сила – це градієнт потенціалу, взятий із від’ємним знаком, то слід проінтегрувати F , щоб отримати потенціал $V(x)$

$$> F = -\text{diff}(V(x), x); V(x) = \text{int}(K * X, X = 0..x);$$

$$\begin{aligned} F &= -\left(\frac{d}{dx} V(x) \right), \\ V(x) &= \frac{1}{2} K x^2. \end{aligned}$$

Розглядаючи коливання, виразимо потенціал через циклічну частоту осцилятора ω , а не через константу пружності

$$> \omega = \text{sqrt}(K/m); K = \text{solve}(\%, K);$$

$$\begin{aligned} \omega &= \sqrt{\frac{K}{m}}, \\ K &= m \omega^2. \end{aligned}$$

Потенціал осцилятора виразимо тепер через циклічну частоту

$$> \text{Eq(A2)} := \text{subs}(V(x) = m/2 * \omega^2 * x^2, \text{Eq(A1)});$$

$$\begin{aligned} V(x) &= \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \\ V(x) &= \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \end{aligned}$$

Підставивши цей потенціал у рівняння (A1), одержимо рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора

$$\begin{aligned} > -\hbar^2/2/m * \text{diff}(\text{diff}(\psi(x), x), x) \\ & + V(x) * \psi(x) = E * \psi(x); \\ & V(x) = m/2 * \omega^2 * x^2; \text{Eq(A1)} := \text{subs}(\%, \%); \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + V(x) \psi(x) = E \psi(x),$$

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

$$\text{Eq(A1)} := -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x).$$

Змасштабуємо змінну x до нової змінної u , яка є зміщенням, що вимірюється в одиницях $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

> `Eq(A2) := x = sqrt(`ℏ`/m/omega)*u;`

`Eq(A3) := expand(dchange(Eq(A2), Eq(A1), [u], params=[`ℏ`
`, m, omega])/`ℏ`/omega*2);`

$$\text{Eq(A2)} := x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} u,$$

$$\text{Eq(A3)} := -\left(\frac{d^2}{du^2} \psi(u) \right) + u^2 \psi(u) = \frac{2E\psi(u)}{\hbar\omega}.$$

Тепер змасштабуємо енергію E і виразимо її в термінах безрозмірної змінної N , що спрощує рівняння

> `Eq(A4) := E = `ℏ`*omega*(N+1/2);`

`Eq(A5) := subs(%, Eq(A3));`

$$\text{Eq(A4)} := E = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right).$$

Нарешті, приведемо рівняння до стандартної форми для диференціальних рівнянь, перемістивши вклад з правої частини вліво

> `Eq(A6) := collect(lhs(Eq(A5)) - rhs(Eq(A5)), psi(u)) = 0;`

$$\text{Eq(A6)} = (u^2 - 2N - 1)\psi(u) - \left(\frac{d^2}{du^2} \psi(u) \right) = 0.$$

2.9.2. В. Асимптотичні розв'язки для великих значень аргумента

Підхід до аналітичного розв'язку диференціального рівняння другого порядку (А6) полягає у тому, щоб розв'язати задачу крок за кроком і з'ясувати, як поводить ся розв'язок асимптотично, тобто для великих значень аргументів. Для великих аргументів u , значення $u^2\psi(u)$ в рівнянні (А6) набагато більше від $(2N+1)\psi(u)$. Неважливе значення N , оскільки за достатньо великих аргументів u хвильова функція $\psi(u)$ буде

вести себе однаково для всіх скінчених значень N . Розглянемо рівняння для $N=0$.

```
> Eq(B1) := subs(N=0, Eq(A6));
```

$$Eq(B1) := (u^2 - 1)\psi(u) - \left(\frac{d^2}{du^2}\psi(u)\right) = 0.$$

Диференціальне рівняння другого порядку завжди має два лінійно незалежні розв'язки. Загальним його розв'язком є їх лінійна комбінація із довільними константами – C_1 і C_2 які є коефіцієнтами

```
> Eq(B2) := dsolve(Eq(B1), psi(u));
```

$$Eq(B2) := \psi(u) = C_1 e^{-\frac{1}{2}u^2} + C_2 e^{-\frac{1}{2}u^2} \operatorname{erf}(iu).$$

Розглянемо обидва розв'язки, щоб знайти їх вигляд. Функція Гауса, як хвильова функція, виглядає

```
> exp(-u^2/2); plot(%, u=-5...5);
```

$$e^{-\frac{1}{2}u^2}$$

(рис. 40).

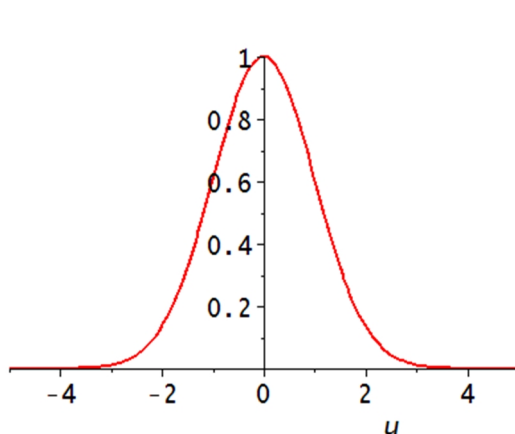


Рис. 40.

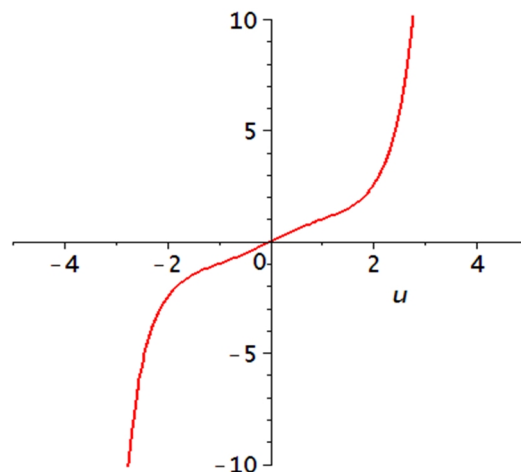


Рис. 41.

Інший розв'язок, який містить функцію помилки erf , зростає для великих значень аргументів

```
> subs(_C1=0, _C2=-i, rhs(Eq(B2))); plot(Re(%), u=-5...5, -10..10);
```

$$-ie^{-\frac{1}{2}u^2} \operatorname{erf}(iu)$$

(рис. 41).

Отже, слід виключити останню хвильову функцію як розв'язок, тому що, якщо б ми намагалися її віднормувати, то інтеграл нормування був би розбіжним

```
> Int(abs(psi(x))^2,x=-
infinity..infinity)=limit(x,x=infinity);
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \infty.$$

Асимптотично, для великих u , всі хвильові функції повинні поводитися, як перший розв'язок, тобто як $e^{-\frac{1}{2}u^2}$. Можна використовувати ці результати для пошуку точного розв'язку $\psi(u)$. Визначимо асимптотичну поведінку, виразивши $\psi(u)$ через нову функцію $h(u)$

```
> Eq(B3):=psi(u)=h(u)*exp(-u^2/2);
```

$$Eq(B3) := \psi(u) = h(u)e^{-\frac{1}{2}u^2}.$$

Підставивши цей вираз у (А6), отримуємо рівняння для функції $h(u)$

```
>Eq(B4):=combine(expand(subs(Eq(B3),
exp(u^2/2)*Eq(A6))));
```

$$Eq(B4) := -2h(u)N - \left(\frac{d^2}{du^2} h(u) \right) + 2 \left(\frac{d}{du} h(u) \right) u = 0.$$

За умови, що $h(u)$ має правильну поведінку на нескінченності, тобто не зростає експоненціально, заміна у рівнянні (В3) дає хвильову функцію з правильною асимптотичною поведінкою, і яка є нормованою. Це відбувається тому, що експонента спадає швидше, ніж будь-яка інша функція, тобто $h(u)$ може бути будь-якою, а асимптотична поведінка хвильової функції $\psi(u)$ все одно буде правильною

```
> u^n * exp(-u^2/2):
```

```
Eq(B5):=Limit(%,u=infinity)=limit(%,u=infinity);
```

$$Eq(B5) := \lim_{u \rightarrow \infty} u^n e^{-\frac{1}{2}u^2} = 0.$$

2.9.3. С. Розв'язок для невеликих значень аргументів і точний розв'язок

Тепер слід розв'язати рівняння (В4) і знайти $h(u)$. Після цього його слід помножити на $e^{-\frac{1}{2}u^2}$. Як видно із рівняння (В3), одержимо точну хвильову функцію $\psi(u)$. Проблема в тому, що рівняння (В4) як і раніше, є диференціальним рівнянням другого порядку, і його так само складно розв'язати, як і рівняння (А6) для $\psi(u)$. Якщо неможливо розв'язати диференціальне рівняння, то найкращим підходом є, як правило, спробувати асимптотичні розв'язки для великих значень аргументів, а потім розв'язати його для малих значень аргументів і, нарешті, «зв'язати їх разом». У ряді випадків ця стратегія навіть призводить до точного розв'язку диференціальних рівнянь, що матиме місце і тут.

Зазначимо, що асимптотичну поведінку для великих значень аргументів беруть до уваги при факторизації у рівнянні (B3). Тому одержимо розв'язок для $h(u)$ при невеликих значеннях аргументів. Для малих u $h(u)$ можна розкласти в ряд Тейлора при $u=0$

$$> h(u)=h(0)+Diff(h(0),u)*u+Diff(h(0),u$2)*u^2/2+`...`;$$

$$h(u) = h(0) + \left(\frac{d}{du}h(0)\right)u + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2}{du^2}h(0)\right)u^2 + \dots$$

Оскільки, похідні від $h(u)$ при $u=0$ – невідомі, можна називати коефіцієнти розкладу інакше: коефіцієнт перед u^k можемо назвати a_k . Потрібно в'яснити, які ці коефіцієнти пов'язані між собою, але одне, відомо напевно – їх не може бути нескінченно багато, тому що це руйнує асимптотичну поведінку для великих u . (Рівняння (B5) не дійсне для $n = \infty$). Інакше кажучи, розклади повинні закінчуватися на деякому скінченному числі, скажімо, L . Тоді, $h(u)$ є поліномом ступеня L

$$> h(u)=a[0]+a[1]*u+a[2]*u^2+a[3]*u^3+`...`;$$

$$Eq(C1) := h(u) = \text{sum}(a[k]*u^k, k=0..L);$$

$$h(u) = a_0 + a_1u + a_2u^2 + a_3u^3 + \dots,$$

$$Eq(C1) := h(u) = \sum_{k=0}^L a_k u^k.$$

Щоб знайти невідомі коефіцієнти, підставляємо поліноми (C1) у рівняння (B4) для $h(u)$

$$> \text{combine}(\text{simplify}(\text{expand}(\text{subs}(Eq(C1), Eq(B4)), \text{power})));$$

$$\sum_{k=0}^L (-(k-1)u^{k-2}ka_k - 2Na_ku^k + 2a_ku^k) = 0.$$

Далі розбиваємо суму на дві: одну із u^k а іншу із u^{k-2} . Тоді

$$> \text{sum}(2*(k-N)*a[k]*u^k, k=0..L) - \text{sum}(k*(k-1)*a[k]*u^{(k-2)}, k=2..L) = 0;$$

$$\sum_{k=0}^L 2(k-N)a_k u^k - \left(\sum_{k=2}^L (k-1)u^{k-2}ka_k \right) = 0.$$

Замість підсумовування по k від 2 до L у другій сумі можна змінити на $k=j+2$ і сума буде по j від 0 до $L-2$

$$> \text{sum}(2*(k-N)*a[k]*u^k, k=0..L) - \text{sum}(\text{subs}(k=j+2, k*(k-1)*a[k]*u^{(k-2)}), j=0..L-2) = 0;$$

$$\sum_{k=0}^L 2(k-N)a_k u^k - \left(\sum_{j=0}^{L-2} (j+1)u^j(j+2)a_{j+2} \right) = 0.$$

Якщо замінити обидва $k_{i,j}$ новим індексом, скажімо, q то можна об'єднати дві суми в одну, крім $(L-1)$ і L які запишемо окремо

$$\begin{aligned} &> \text{Eq}(C2) := \text{sum}((2*(q-N)*a[q]- \\ & (q+1)*(q+2)*a[q+2])*u^q, q=0..L-2) + 2*(L-1-N)*a[L- \\ & 1]*u^{(L-1)} + 2*(L-N)*a[L]*u^L=0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Eq}(C2) := & -\frac{a_{L-1}u^{L-1}(L-1)^2}{u^2} + \frac{a_{L-1}u^{L-1}(L-1)}{u^2} - \frac{a_L u^{L-1}(L-1)^2}{u} \\ & - \frac{a_L u^{L-1}(L-1)}{u} \\ & + \sum_{q=0}^{L-2} (-u^{q-2}a_q q^2 + u^{q-2}a_q q + 2u^q a_q q - 2u^q a_q N) \\ & + 2(L-1-N)a_{L-1}u^{L-1} + 2(L-N)a_L u^L = 0. \end{aligned}$$

Тепер маємо суму за степенями u , тобто зліва є многочлен за u . Із правої частини видно, що вона повинна дорівнювати нулю, і це повинно виконуватися для всіх u – тому що, слід знайти функцію $h(u)$ яка задовольняє диференціальне рівняння (B4) для усіх u , а не тільки для деяких особливих u . Єдиний спосіб зробити ліву частину нулем для всіх u – це взяти нуль за коефіцієнтами перед усіма степенями u . Отже, коефіцієнт перед u^q повинен бути

$$\begin{aligned} &> \text{Eq}(C3) := 2*(q-N)*a[q] - (q+1)*(q+2)*a[q+2]=0; \end{aligned}$$

$$\text{Eq}(C3) := 2(q-N)a_q - (q+1)(q+2)a_{q+2} = 0.$$

Це рівняння не дає змоги оцінити невідомі коефіцієнти a_k , але показує, як залежить наступний коефіцієнт від попереднього, крім одного. Так що 7-ий залежить від 5-го, 5-ий від 3-го, і 3-ій від 1-го, 8-ий залежить від 6-го, 6-ий від 4-го, 4-ий на 2-го, 2-ий на 0-го

$$\begin{aligned} &> \text{Eq}(C4) := a[q+2]=\text{solve}(\text{Eq}(C3), a[q+2]); \end{aligned}$$

$$\text{Eq}(C4) := a_{q+2} = -\frac{2(-q+N)a_q}{(q+1)(q+2)}.$$

Розглянемо інші два значення. Коефіцієнт u^L у рівнянні (C2) повинен бути нульовим. Ми знаємо, що a_L не може бути нульовим (тому що тоді $h(u)$ не буде поліномом ступеня L , а ступеня $L-1$ чи менше); отже $L-N$ повинен бути нульовим. Це означає, що N повинно бути додатним цілим числом

$$\begin{aligned} &> 2*(L-N)*a[L]=0; \text{Eq}(C5) := L-N=0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & 2(L-N)a_L = 0, \\ \text{Eq}(C5) := & L-N = 0 \end{aligned}$$

і коефіцієнт u^{L-1} у рівнянні (C2) повинен бути нульовим. Оскільки, як, вище було отримано, $L=N$, ми повинні мати $a_{L-1} = 0$

```
> 2*(L-1-N)*a[L-1]=0; Eq(C6):=a[L-1]=0;
```

$$2(L-1-N)a_{L-1} = 0,$$

$$Eq(C6) := a_{L-1} = 0.$$

Отже, розв'язок для $h(u)$ є поліномом ступеня L . Коефіцієнт a_{L-1} наступного вкладу u^{L-1} є нулем. Застосування рівняння (C4) показує, що a_{L-1}, a_{L-2}, \dots також повинні бути нульовими. Якщо L парне, тоді коефіцієнти всіх непарних u є нулями, і якщо L непарне, то коефіцієнти всіх u є нулями. Отже, розв'язок є або парним, або непарним многочленом по u . Розглянемо кілька прикладів.

Основний стан

Найменше можливе значення L для N є нулем. Підставимо його в (C1)

```
> N=0;simplify(expand(subs(L=0,Eq(C1))));
```

$$N = 0,$$

$$h(u) = a_0.$$

Підставляючи їх в рівняння (A4) і (B3), і виконуючи зворотну заміну u для x , рівняння (A2) дає розв'язок

```
> Eq(C7):=subs(N=0,Eq(A4)); subs(h(u)=a[0],Eq(B3));
```

```
Eq(C8):=subs(psi(u)=psi(x),u=solve(Eq(A2),u),%);
```

$$Eq(C7) := E = \frac{1}{2} \hbar \omega,$$

$$\psi(u) = a_0 e^{-\frac{1}{2}u^2},$$

$$Eq(C8) := \psi(x) = a_0 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}.$$

Коефіцієнт a_0 визначається з умови нормування $\psi(x)$

```
> Int(abs(psi(x))^2,x=-
infinity..infinity)=int(rhs(Eq(C8))^2,x=-
infinity..infinity);
a[0]=sqrt(solve(simplify(rhs(%))=1,a[0]^2));
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{a_0^2 \hbar \sqrt{\pi}}{\sqrt{m\omega \hbar}},$$

$$a_0 = \sqrt{\frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\pi \hbar}}}.$$

Вигляд хвильової функції

```
> plot(subs(m=1,`&hbar`=1,
omega=1,a[0]=Pi^(-1/4),rhs(Eq(C8))),x=-4..4);
```

(рис. 42).

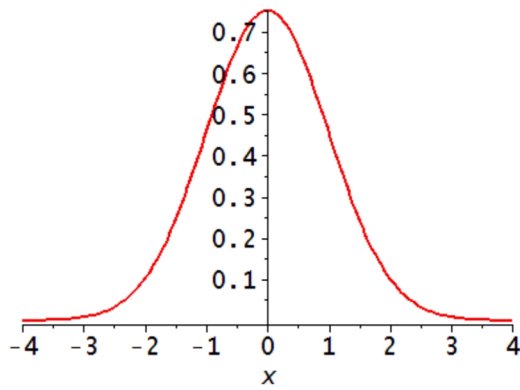


Рис. 42

Перший збуджений стан

Наступним можливим значенням $L \in 1$. Підставимо це значення в рівняння (C5) і (C1)

```
> N=1;simplify
(expand(subs(L=1,Eq(C1))));
```

$$N = 1,$$

$$h(u) = a_0 + a_1 u.$$

Із рівняння (C6) видно, що a_0 повинен зникати, що спрощує $h(u)$

```
> a[0]=0; h(u)=a[1]*u;
```

$$a_0 = 0,$$

$$h(u) = a_1 u.$$

Як і раніше, робимо наведену вище заміну (A4) і (B3). Тоді, використавши рівняння (A2), знаходимо розв'язок

```
> Eq(C9):=subs(N=1,Eq(A4)); subs(h(u)=a[1]*u,Eq(B3));
```

```
Eq(C10):=subs(psi(u)=psi(x),u=solve(Eq(A2),u),%);
```

$$Eq(C9) := E = \frac{3}{2} \hbar \omega,$$

$$\psi(u) = a_1 u e^{-\frac{1}{2}u^2},$$

$$Eq(C10) := \psi(x) = \frac{a_1 x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}.$$

Коефіцієнт a_1 знову визначається з нормування $\psi(x)$

```
> Int(abs(psi(x))^2,x=-
```

```
infinity..infinity)=int(rhs(Eq(C10))^2,x=-
infinity..infinity);
```

```
a[1]=sqrt(solve(simplify(rhs(%))=1,a[1]^2));
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{1}{2} \frac{a_1^2 \hbar \sqrt{\pi}}{\sqrt{\hbar m \omega}},$$

$$a_1 = \sqrt{2} \sqrt{\frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\pi\hbar}}}.$$

Отже, отримаємо такий вигляд хвильової функції

```
> plot(subs(m=1,`&hbar`=1,omega=1,a[1]=sqrt(2)*Pi^(-
1/4),rhs(Eq(C10))),x=-4..4);
```

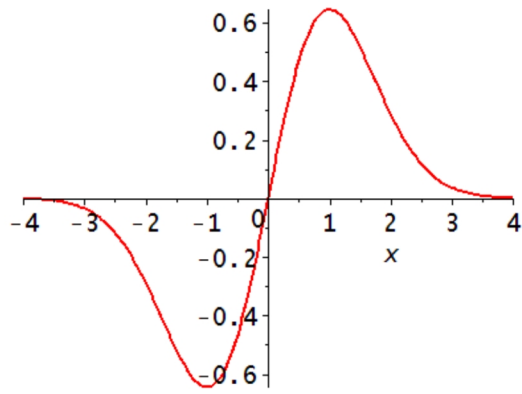


Рис. 43

(рис. 43)

*Другий збуджений стан*Наступним є $L=2$. Рівняння (C5) і

(C1) дають

```
> N=2;simplify(expand
(subs(L=2,Eq(C1))));
```

$$N = 2,$$

$$h(u) = a_0 + a_1 u + a_2 u^2.$$

Рівняння (C6) ставить вимогу

щоб a_1 зникало

```
> a[1]=0; h(u)=a[0]+a[2]*u^2;
```

$$a_1 = 0,$$

$$h(u) = a_0 + a_2 u^2.$$

Використаємо рівняння (C4) щоб визначити як a_2 залежить від a_0

```
> subs(q=0,N=2,Eq(C4)); h(u)=a[0]*(1-2*u^2);
```

$$a_2 = -2a_0,$$

$$h(u) = a_0(1 - 2u^2).$$

З рівнянь (A4), (B3), і (A2) отримуємо

```
> Eq(C11):=subs(N=2,Eq(A4)); subs(h(u)=a[0]*(1-
2*u^2),Eq(B3));
```

```
Eq(C12):=subs(psi(u)=psi(x),u=solve(Eq(A2),u),%);
```

$$Eq(C11) := E = \frac{5}{2} \hbar \omega,$$

$$\psi(u) = a_0(1 - 2u^2)e^{-\frac{1}{2}u^2},$$

$$Eq(C12) := \psi(x) = a_0 \left(1 - \frac{2m\omega x^2}{\hbar}\right) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}.$$

Як і раніше, коефіцієнт a_0 визначається з умови нормування $\psi(x)$

```
> Int(abs(psi(x))^2,x=-
infinity..infinity)=int(rhs(Eq(C12))^2,x=-
infinity..infinity);
a[0]=sqrt(solve(simplify(rhs(%))=1,a[0]^2));
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{2a_0^2 \hbar \sqrt{\pi}}{\sqrt{m\omega \hbar}},$$

$$a_0 = \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\pi \hbar}}}.$$

Отримуємо вигляд шуканої хвильової функції

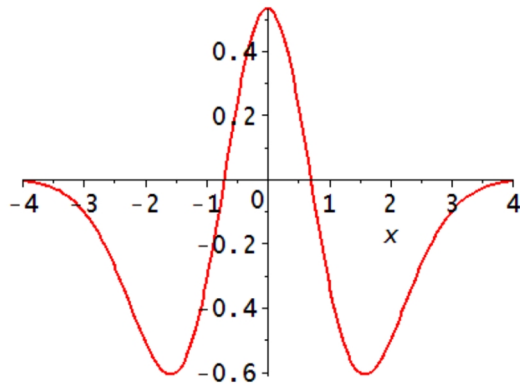


Рис. 44

поліномами Ерміта. Ось перелік перших десяти з них

```
> for j from 0 to 9 do h[j](u)=H(j,u) od;
```

$$h_0(u) = 1,$$

$$h_1(u) = 2u,$$

$$h_2(u) = -2 + 4u^2,$$

$$h_3(u) = 8u^3 - 12u,$$

$$h_4(u) = 12 + 16u^4 - 48u^2,$$

$$h_5(u) = 32u^5 - 160u^3 + 120u,$$

$$h_6(u) = -120 + 64u^6 - 480u^4 + 720u^2,$$

$$h_7(u) = 128u^7 - 1344u^5 + 3360u^3 - 1680u,$$

$$h_8(u) = 1680 + 256u^8 - 3584u^6 + 13440u^4 - 13440u^2,$$

$$h_9(u) = 512u^9 + 9216u^7 - 48384u^5 + 80640u^3 + 30240u.$$

Отже, можна записати загальний розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора, N -ий збуджений стан має енергію

```
> Eq(A4);
```

$$E = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right).$$

Хвильова функція цього стану є добутком N -го многочлена Ерміта і функції Гауса. Нормована хвильова функція є

```
>subs(h(u)=(m*omega/Pi/`&hbar;` )^(1/4)/sqrt(2^N*N!)*h[N](u),Eq(B3)); `with `*u=solve(Eq(A2),u);
```

$$\psi(u) = \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} h_N(u) e^{-\frac{1}{2}u^2}}{\sqrt{2^N N!}},$$

$$\text{де } u = \frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}.$$

```
> plot(subs(m=1,`&hbar;`=1,omega=1,a[0]=Pi^(-1/4)/sqrt(2),rhs(Eq(C12))),x=-4..4);
```

(рис. 44).

Многочлени Ерміта

Можна продовжити цей процес для інших цілих чисел L , а, отже, знайти хвильові функції для L -го збудженого стану. Але з математики відомо, що поліноми $h(u)$ називають

2.10. Чисельний підхід до задачі про гармонічний осцилятор

2.10.1.A. Гармонічний осцилятор

Розглянемо стаціонарне рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора масою m і частотою ω . Раніше було отримано потенціал інтегруванням рівняння для відновлюючої сили, що діє на пружину $F = -Kx$, та отримали $V(x) = \frac{1}{2}Kx^2$. Отже, отримується таке стаціонарне рівняння Шредінгера

$$Eq(A2) := -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x).$$

Розв'яжемо це диференціальне рівняння другого порядку чисельно. Для цього слід перетворити його коефіцієнти в числа, які були б зручні для реалізації обчислювального процесу. Цього можна досягнути шляхом масштабування рівняння. Замість x ми використаємо змінну u , яка все ще є зміщенням від положення рівноваги $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Тоді диференціальне рівняння (A2) для нової змінної u запишеться

> Eq(A3) := x = sqrt(`ℏ` / m / omega) * u;

Eq(A4) := expand(dchange(Eq(A3), Eq(A2), [u], params=[`ℏ`, `m, omega`]) / `ℏ` / omega * 2);

$$Eq(A3) := x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} u,$$

$$Eq(A4) := -\left(\frac{d^2}{du^2} \psi(u) \right) + u^2 \psi(u) = \frac{2E\psi(u)}{\hbar\omega}.$$

Ліва частина цього рівняння має зручний вигляд. Спростимо праву частину рівняння, вимірюючи енергію у одиницях $\hbar\omega$. Тоді права частина не буде містити жодних інших параметрів. Для зручності потрібно масштабувати до величини $\hbar\omega/2$ і ввести нову безрозмірна змінну N

> Eq(A5) := E = `ℏ` * omega * (N + 1/2);

$$Eq(A5) := E = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right).$$

Тоді стаціонарне рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора набуває такої безрозмірної форми, яку надалі можна використовувати для чисельного розв'язку у розділі C

> Eq(A6) := simplify(subs(Eq(A5), Eq(A4)));

$$Eq(A6) := -\left(\frac{d^2}{du^2} \psi(u) \right) + u^2 \psi(u) = (2N + 1) \psi(u).$$

2.10.2. В. Співвідношення між розв'язками різної парності

Раніше вже було враховано симетрію відносно $x=0$ для хвильової функції частинки у прямокутній потенціальній ямі. Парна хвильова функція $\psi(-x)$ була дзеркальним відображенням $\psi(x)$, а для непарної хвильової функції вони відрізнялися знаком одна від одної. Розглянемо хвильові функції гармонічного осцилятора. Якщо потенціал $V(x)$ є симетричним відносно $x=0$, тобто $V(x)=V(-x)$, тоді рух частинки повинен бути симетричним. Іншими словами, густина ймовірності $|\psi(x)|^2$ для знаходження частинки у положенні x також повинна бути симетричною, тобто потрібно мати $|\psi(-x)|^2 = |\psi(x)|^2$. Для парної хвильової функції $\psi(-x) = \psi(x)$, а для непарної хвильової функції $\psi(-x) = -\psi(x)$. Застосуємо ці міркування в околі точки $x=0$. Якщо хвильова функція регулярна при $x=0$, тобто, якщо вона там не має сингулярності, то для парних розв'язків $\frac{d}{dx}\psi(x=0) = 0$, а для непарних $\psi(x=0) = 0$.

Як приклад, розглянемо парну хвильову функцію

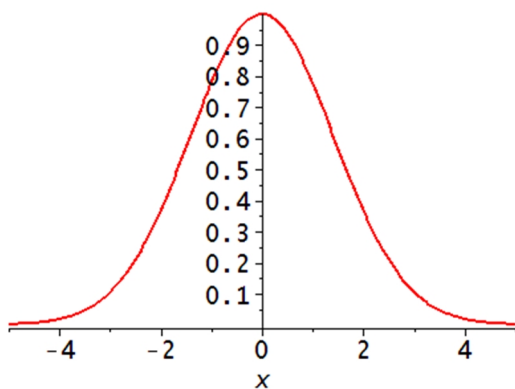


Рис. 45.

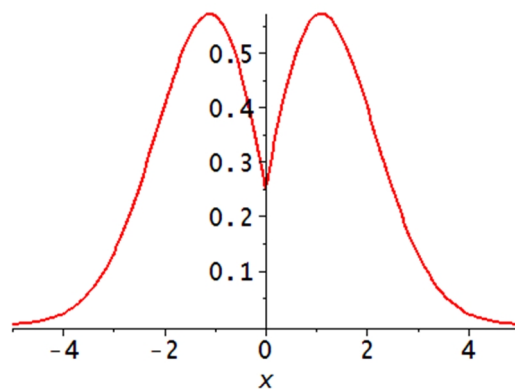


Рис. 46.

```
> plot(exp(-(x/2)^2),x=-5..5);
```

(рис. 45).

Для парної хвильової функції з похідною $\frac{d}{dx}\psi(x=0) \neq 0$ графік матиме вигляд

```
> plot((1/4+sin(abs(x/2)))*exp(-(x/2)^2),x=-5..5);
```

(рис. 46).

Дана функція – неприйнятна, оскільки вона має розрив при $x=0$, а це не задовольняє рівняння Шредінгера. Прикладом непарної хвильової функції є

```
> plot(sin(x)*exp(-(x/2)^2),x=-5..5);
```

(рис. 47).

Непарна хвильова функція з $\psi(x=0) \neq 0$ матиме такий вигляд

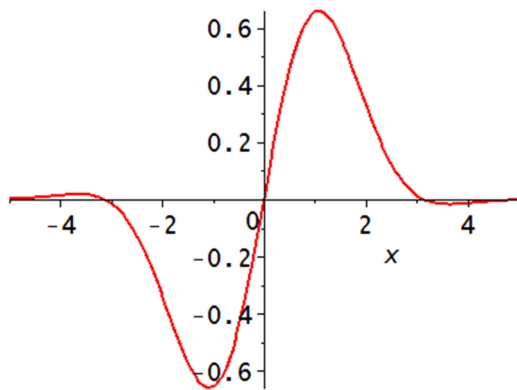


Рис. 47.

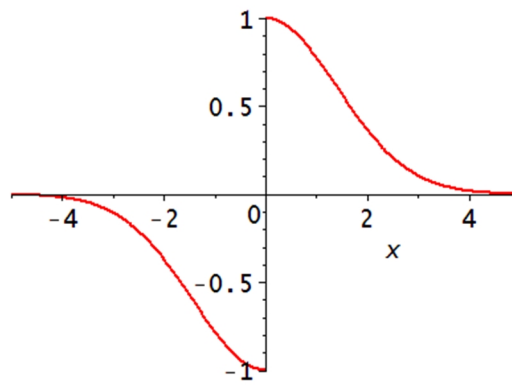


Рис. 48.

```
> P1:=plot(-exp(-(x/2)^2),x=-5..0):P2:=plot(exp(-(x/2)^2),x=0..5):display(P1,P2);
```

(рис. 48).

Зрозуміло, що вона неприйнятна як хвильова функція, оскільки $\psi(x)$ повинна бути неперервною для всіх x . Таким чином, ми бачимо, що парні хвильові функції в симетричному потенціалі повинні мати нульову першу похідну при $x=0$, але сама $\psi(x)$ може набувати будь-яких значень

```
> Eq(B1):=psi(0)=constant, Diff(psi(x=0),x)=0;
```

$$Eq(B1) := \psi(0) = \text{constant}, \quad \frac{d}{dx}\psi(x=0) = 0.$$

І навпаки, непарні хвильові функції повинні зникати при $x=0$, а їх похідні можуть мати будь-яке значення

```
> Eq(B2):=psi(0)=0,Diff(psi(x=0),x)=constant;
```

$$Eq(B2) := \psi(0) = 0, \quad \frac{d}{dx}\psi(x=0) = \text{constant}.$$

2.10.3. С. Особливості власних значень та власних функцій.

Тепер можна чисельно розв'язати рівняння Шредінгера для гармонічного осцилятора і з'ясувати зміст власних значень та власних функцій. Для цього треба розв'язати рівняння (А6), яке є змасштабованою версією рівняння Шредінгера – готовою до чисельної роботи

```
> Eq(A6);
```

$$-\left(\frac{d^2}{du^2}\psi(u)\right) + u^2\psi(u) = (2N + 1)\psi(u).$$

Це диференціальне рівняння другого порядку, тобто його слід двічі проінтегрувати. Кожне інтегрування додасть одну константу. Щоб визначити ці дві константи інтегрування, використаємо граничні умови, які щойно були одержані: рівняння (В1) для парних хвильових функцій та рівняння (В2) для непарних хвильових функцій. Тут не будемо

використовувати нормування, оскільки при побудові хвильової функції вона масштабуватиметься.

Почнемо з парних розв'язків (А6). Перепишемо граничні умови (С1) при $x=0$ у позначеннях Maple

```
> Eq(C1):=[psi(0)=1,D(psi)(0)=0];
```

$$Eq(C1) := [\psi(0) = 1, D(\psi)(0) = 0]$$

Якщо взяти, наприклад, $N=0$, то отримаємо правильний розв'язок, який описується гладкою функцією, яка добре збігається на нескінченності

```
> DEplot(subs( N=0 ,Eq(A6)),psi(u),u=-5..5,[Eq(C1)],psi=0..1,stepsize=.05);
```

(рис. 49).

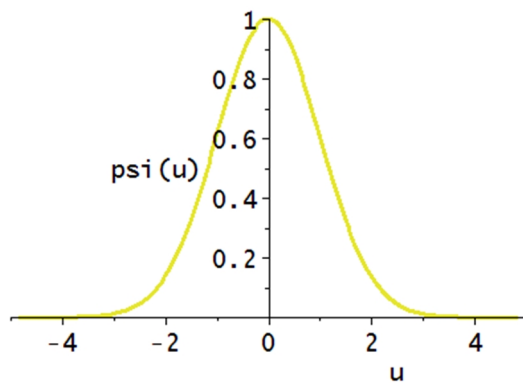


Рис. 49.

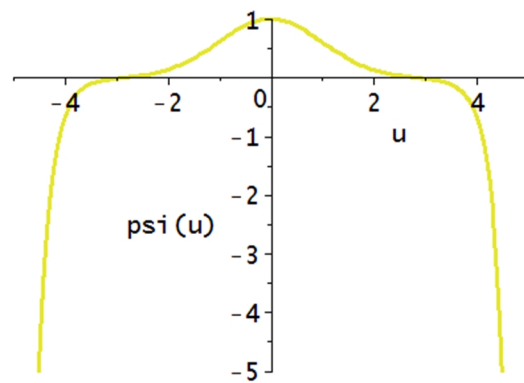


Рис. 50.

Це правильний початок – оскільки $N=0$ є власним значенням рівняння (А6). Але якщо вибрати $N = 0.001$, то розв'язок не буде добрим при великих значеннях аргумента

```
> DEplot(subs( N=0.001 ,Eq(A6)),psi(u),u=-5..5,[Eq(C1)],psi=-5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 50).

Подібна ситуація має місце і при $N = -0.001$. У цьому випадку розв'язок розбігається у протилежний бік

```
> DEplot(subs( N=-0.001 ,Eq(A6)),psi(u),u=-5..5,[Eq(C1)],psi=0..5,stepsize=.05);
```

(рис. 51).

Наступним значенням N , для якого можна отримати правильний розв'язок є 2

```
> DEplot(subs( N=2 ,Eq(A6)),psi(u),u=-5..5,[Eq(C1)],psi=-1.5..1.5,stepsize=.05);
```

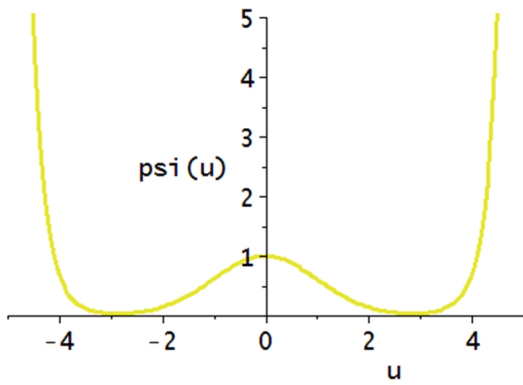


Рис. 51.

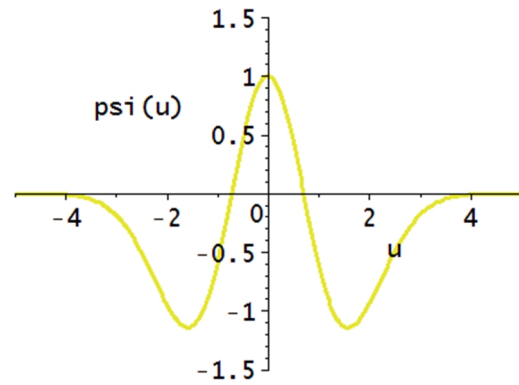


Рис. 52.

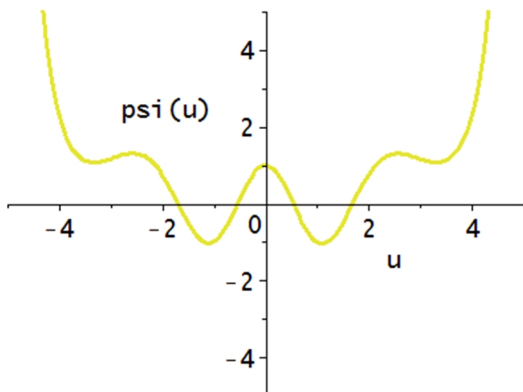


Рис. 53.

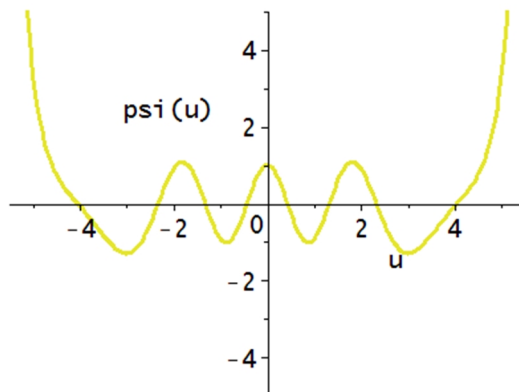


Рис. 54.

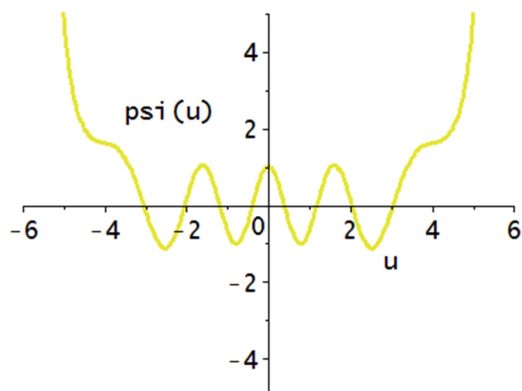


Рис. 55.

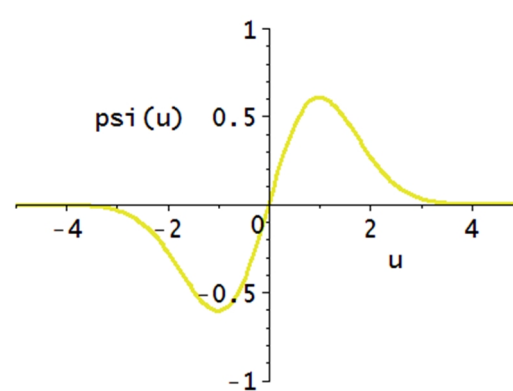


Рис. 56.

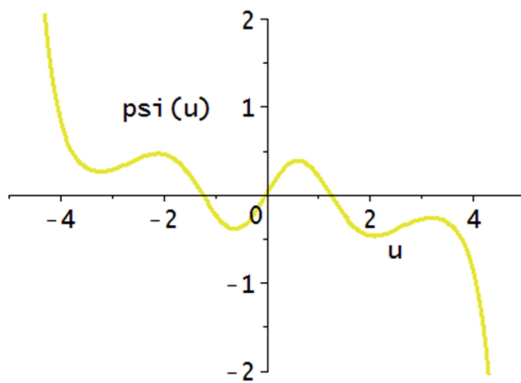


Рис. 57.

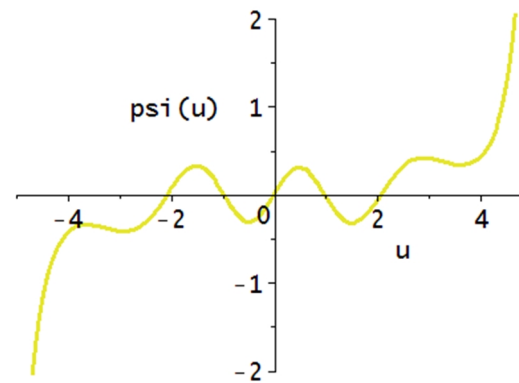


Рис. 58.

(див. рис. 52).

Розглянемо, як змінюються хвильові функції при збільшенні N

```
> DEplot(subs( N=3.8 ,Eq(A6)),psi(u),u=-
5..5,[Eq(C1)],psi=-5..5,stepsize=.05);
```

(рис. 53).

```
> DEplot(subs( N=6.1 ,Eq(A6)),psi(u),u=-
5.5..5.5,[Eq(C1)],psi=-5..5,stepsize=.05);
```

(рис. 54).

```
> DEplot(subs( N=7.6 ,Eq(A6)),psi(u),u=-
6..6,[Eq(C1)],psi=-5..5,stepsize=.05);
```

(рис. 55).

Тепер розглянемо непарні розв'язки. Знову перепишемо граничні умови у рівнянні (B2) у позначеннях Maple

```
> Eq(C2):=[psi(0)=0,D(psi)(0)=1];
```

$$Eq(C2) := [\psi(0) = 0, D(\psi)(0) = 1]$$

Правильним припущенням щодо власного значення непарного розв'язку є $N = 1$. Знайдемо для цього випадку розв'язок

```
> DEplot(subs( N=1 ,Eq(A6)),psi(u),u=-
5..5,[Eq(C2)],psi=-1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 56).

Використаємо три випадки, щоб визначити, якою повинна бути нормальна форма непарних хвильових функцій

```
> DEplot(subs( N=2.9 ,Eq(A6)),psi(u),u=-
5..5,[Eq(C2)],psi=-
2..2,stepsize=.05);
```

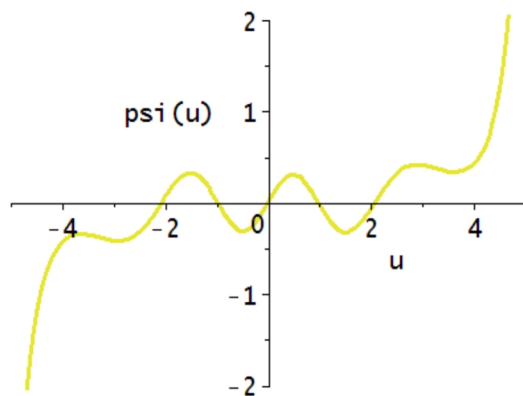


Рис. 59

(рис. 57).

```
> DEplot(subs( N=4.8
,Eq(A6)),psi(u),u=-
5..5,[Eq(C2)],psi=-
2..2,stepsize=.05);
```

(рис. 58).

```
> DEplot(subs( N=7.3
,Eq(A6)),psi(u),u=-
5..5,[Eq(C2)],psi=-2..2,stepsize=.05);
```

(рис. 59).

Отже у такий спосіб було з'ясовано, якими є власні значення енергії E (або її змасштабований аналог N), для якої інтегрування диференціального рівняння дає розв'язок, що не розбігається на нескінченності. Ці висновки справедливі для всіх потенціалів, що мають зв'язані стани.

2.11. Теорія збурень першого порядку для ангармонічного осцилятора

2.11.1. А. Розв'язок рівняння Шредінгера медом теорії збурень

Аналітичний розв'язок рівняння Шредінгера можна відшукати лише для невеликої кількості квантово-механічних систем. Наведемо майже вичерпаний перелік аналітично розв'язуваних задач: прямокутні потенціальні ями, гармонічні потенціали та кулонівські потенціали. Для більшості систем, що зустрічаються на практиці, рівняння Шредінгера не можна розв'язати аналітично. Звичайно, можна спробувати розв'язати їх чисельно, але це вимагатиме багато зусиль. Нерідко існує простіший спосіб, зокрема, для задач, які мало відрізняються від точно розв'язуваної. Розглянемо, наприклад, осцилятор, який не повністю, але майже гармонічний. Червона лінія на рисунку – гармонічний потенціал $V(x) = x^2/2$, синя лінія – це той самий потенціал, але з невеликим ангармонічним збуренням $0,1x^4$, який додається до нього. Відомо, що рівні енергії в гармонічному потенціалі – $\hbar \omega(N+1/2)$. Чи можна вважати, що енергетичні рівні в дещо ангармонічному потенціалі не набагато відрізняються від цих значень?

```
> p1:=plot(x^2/2,x=-1..1): p2:=plot(x^2/2+0.1*x^4,x=-1..1,colour=blue):
display(p1,p2);
```

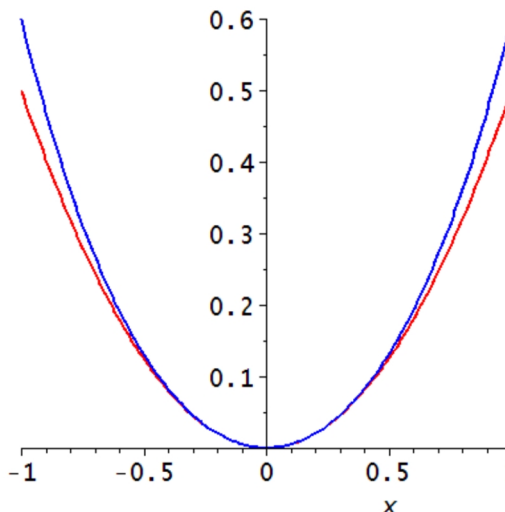


Рис. 60

(рис. 60).

Сформулюємо задачу математично. Розв'яжемо стаціонарне рівняння Шредінгера та знайдемо дозволені енергії E

```
> Eq(A1) := -\hbar^2/2/m*
diff(psi(x),x$2)+ V(x)*psi(x)=
E*psi(x);
```

$$Eq(A1) := -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Інший спосіб сформулювати проблему полягає в тому, що необхідно знайти власні значення E оператора Гамільтона H

```
> Eq(A2) := H*psi(x)=E*psi(x);
```

$$Eq(A2) := H\psi(x) = E\psi(x).$$

Для рівняння (A1) ми можемо записати оператор Гамільтона

> Eq(A3) := H = subs(psi(x) = ` ` , lhs(Eq(A1)));

$$Eq(A3) := H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x).$$

Приклад, який розглянемо, – це потенціал, який майже гармонічний, але має невелике ангармонічне збурення λx^4 , яке додається до нього. Параметр λ є дійсним (потенціал повинен бути дійсним), і він повинен бути малим – пізніше буде визначено, наскільки малим

> Eq(A4) := V(x) = m/2*omega^2*x^2 + lambda*x^4;

$$Eq(A4) := V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \lambda x^4.$$

Отже, гамільтоніан, власні значення якого шукаємо, це

> Eq(A5) := subs(Eq(A4), Eq(A3));

$$Eq(A5) := H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \lambda x^4 \right).$$

Розіб'ємо цей гамільтоніан на так званий "незбурений" гамільтоніан $H^{(0)}$ власні значення якого відомі, і невелике збурення ΔH

> Eq(A6) := H = H^(0) + Delta*H;

$$Eq(A6) := H = H^{(0)} + \Delta H.$$

У нашому випадку незбурений гамільтоніан відповідає гармонічному осцилятору

> Eq(A7) := H^(0) = subs(lambda=0, rhs(Eq(A5)));

$$Eq(A7) := H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

Всі власні значення $E^{(0)}$ – відомі, як і відповідні власні функції $\Psi_{(0)}(x)$ гармонічного осцилятора

> Eq(A8) := H^(0)*psi[(0)](x) = E^(0)*psi[(0)](x);

$$Eq(A8) := H^{(0)} \psi_{(0)}(x) = E^{(0)} \psi_{(0)}(x).$$

Відомо, наприклад, що хвильова функція основного стану є гаусівською. Перший індекс (0) хвильової функції означає, що маємо незбурену, тобто строго гармонічну систему, а другий індекс "0" вказує, що мова йде про основний стан

> Eq(A9) := psi[(0),0](x) = A*exp(-m*omega/ħ*x^2/2);

$$Eq(A9) := \psi_{(0),0}(x) = A e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}.$$

Якщо застосувати гамільтоніан $H^{(0)}$ рівняння (A7) до цієї хвильової функції, то можна перевірити, чи вона справді є власною функцією

```
> H^(0)*rhs(Eq(A9))=simplify(expand(subs(
`=rhs(Eq(A9)),rhs(Eq(A7)))));
```

$$H^{(0)} A e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega x^2}{\hbar}} = \frac{1}{2} A \hbar \omega e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega x^2}{\hbar}}.$$

Отже, відповідне власне значення, або енергія основного стану, є

```
> E[0]^(0) = \hbar; /2*omega;
```

$$E_0^{(0)} = \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

Першим збудженим станом гармонічного осцилятора, тобто незбуреної системи, є

```
> Eq(A10):=psi[^(0)^,1](x)=B*x*exp(-
m*omega/\hbar;*x^2/2);
```

$$Eq(A10) := \psi_{(0),1}(x) = B x e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega x^2}{\hbar}}.$$

Знову застосуємо незбурений гамільтоніан до цієї хвильової функції, щоб перевірити, що вона є одним із його власних станів

```
> H^(0)*rhs(Eq(A10))=simplify(expand(subs(
`=rhs(Eq(A10)),rhs(Eq(A7)))));
```

$$H^{(0)} B x e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega x^2}{\hbar}} = \frac{3}{2} \hbar \omega B x e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega x^2}{\hbar}}.$$

У правій частині власне значення є енергію першого збудженого стану незбуреної системи

```
> E[1]^(0) = 3*\hbar; /2*omega;
```

$$E_1^{(0)} = \frac{3}{2} \hbar \omega.$$

Тепер перевіримо, що відбувається, коли накласти невелике збурення. Порівняємо рівняння (A5) та (A6), щоб побачити, що саме є збуренням

```
> Eq(A11):=Delta*N=lambda*x^4;
```

$$Eq(A11) := \Delta H = \lambda x^4.$$

Будемо розв'язувати таку задачу на власні значення

```
> Eq(A12):=rhs(Eq(A6))*psi(x)=E*psi(x);
```

$$Eq(A12) := (H^{(0)} + \Delta H) \psi(x) = E \psi(x).$$

Як вже було зазначено, у цьому випадку інтуїтивно очікується, що як власні функції, так і власні значення збуреної системи будуть близькими до характеристик незбуреної системи. Розкладемо у ряд Тейлора власні

функцій збуреної системи поблизу незбуреної. Оскільки λ мале, то його зручно вибрати параметром розкладу. При $\lambda=0$ ми просто одержуємо власні функції незбуреної системи

```
> Eq(A13):=psi(x)=psi[^(0)](x)+lambda*psi[^(1)](x)+
lambda^2*psi[^(2)](x)+`...`;
```

$$Eq(A13):= \psi(x) = \psi_{(0)}(x) + \lambda\psi_{(1)}(x) + \lambda^2\psi_{(2)}(x) + \dots$$

Такий самий розклад запишемо для власних значень

```
>Eq(A14):=E=E^(0)+lambda*E^(1)+
lambda^2*E^(2)+`...`;
```

$$Eq(A14):= E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

Подібно до того, як було розбито гамільтоніан у рівнянні (A6), можна розподілити власне значення енергії на власне значення незбуреної системи $E^{(0)}$, що нам відоме, і додатак ΔE , який пов'язаний із збуренням і який потрібно обчислити

```
> E=E^(0)+Delta*E;
Delta*E=lambda*E^(1)+lambda^2*E^(2)+`...`;
```

$$E = E^{(0)} + \Delta E,$$

$$\Delta E = \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

Розпочнемо розрахунок, підставивши збурення (A11) у рівняння (A12)

```
> Eq(A15):=(H^(0)+lambda*x^4)*psi(x)=E*psi(x);
```

$$Eq(A15):= (H^{(0)} + \lambda x^4)\psi(x) = E\psi(x).$$

Можна переписати це рівняння, перенісши всі доданки у ліву частину

```
> Eq(A16):=collect(lhs(Eq(A15))-rhs(Eq(A15)),psi(x))=0;
```

$$Eq(A16):= (H^{(0)} + \lambda x^4 - E)\psi(x) = 0.$$

Далі підставимо розклад (A13) для власної функції та (A14) для власного значення у рівняння (A16)

```
> Eq(A17):=subs(Eq(A13),Eq(A14),Eq(A16));
```

$$Eq(A17) := (H^{(0)} + \lambda x^4 - E^{(0)} - \lambda E^{(1)} - \lambda^2 E^{(2)} - \dots)(\psi_{(0)}(x) + \lambda\psi_{(1)}(x) + \lambda^2\psi_{(2)}(x) + \dots) = 0.$$

Врахуємо внески з малим λ і відкинемо все, що має порядок λ^2 або вищий

```
>Eq(A18):=series(subs(`...`=0,lhs(Eq(A17))),
lambda=0,2)=0;
```

$$Eq(A18) := (H^{(0)} - E^{(0)})\psi_{(0)}(x) + \left((H^{(0)} - E^{(0)})\psi_{(1)}(x) + (x^4 - E^{(1)})\psi_{(0)}(x) \right) \lambda + \mathbf{0}(\lambda^2) = \mathbf{0}.$$

Для $\lambda=0$ одержуємо незбурену задачу, тобто рівняння (A8), з якого почали розв'язувати задачу

> **Eq(A19) := subs(lambda=0, `...`=0, Eq(A17));**

$$Eq(A19) := (H^{(0)} - E^{(0)})\psi_{(0)}(x) = \mathbf{0}.$$

Шукаємо власні значення (A15) за умови, що λ – мале. Щоби задовольнити (A18) для малих λ , всі коефіцієнти перед λ повинні бути рівними нулю. Нас цікавить лише найнижчий порядок в розкладі за λ , і тому слід покласти нулем лише коефіцієнт перед λ у рівнянні (A18). У результаті отримуємо

> **Eq(A20) := coeff(lhs(Eq(A18)), lambda)=0;**

$$Eq(A20) := (H^{(0)} - E^{(0)})\psi_{(1)}(x) + (x^4 - E^{(1)})\psi_{(0)}(x) = \mathbf{0}.$$

Рівняння (A20) – це лише одне рівняння для двох невідомих, а саме енергетичний зсув першого порядку E^I і поправка першого порядку до незбуреної хвильової функції $\psi_{(1)}x$. Для того, щоб знайти енергетичний зсув, потрібно перетворити рівняння (A20). Домножимо його на спряжену незбурену хвильову функцію, $\psi_0^*(x)$, зліва, а потім проінтегруємо по усіх x

> **Eq(A21) := Int(conjugate(psi[^(0)](x))*lhs(Eq(A20)), x=-infinity..infinity)=0;**

$$Eq(A21) := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_0(x)} \left((H^{(0)} - E^{(0)})\psi_{(1)}(x) + (x^4 - E^{(1)})\psi_{(0)}(x) \right) dx = \mathbf{0}.$$

Замість застосування $H^{(0)}$ до $\psi_{(1)}x$, а потім помножити $\psi_0^*(x)$ і інтегрування по x , можна також застосувати $H^{(0)}$ до $\psi_0^*(x)$, а потім помножити $\psi_{(1)}(x)$ й інтегрувати по x

> **Eq(A22) := Int(conjugate(psi[^(0)](x))*H^(0)*psi[^(1)](x), x=-infinity..infinity) = Int(psi[^(1)](x)*H[^(0)]*conjugate(psi[^(0)](x)), x=-infinity..infinity);**

$$Eq(A22) := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_0(x)} H^{(0)} \psi_{(1)}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{(1)}(x) H_{(0)} \overline{\psi_0(x)} dx.$$

Для чого це робити? Відомим є результат, коли застосувати $H^{(0)}$ до $\psi_0^*(x, t)$, це буде $E^{(0)}$, оскільки $\psi_{(0)}(x)$ є власною функцією а, отже, і її комплексно спряжений вираз також є власною функцією. Тому, отримаємо

> **Eq(A23) := Int(conjugate(psi[^(0)](x))*H^(0)*psi[^(1)](x), x=-infinity..infinity)**

$$= E^{(0)} \int_{-\infty}^{\infty} \text{conjugate}(\psi^{(0)}(x)) \psi^{(1)}(x) dx;$$

$$Eq(A23) := \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) H^{(0)} \psi_{(1)}(x) dx = E^{(0)} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \psi_{(1)}(x) dx \right).$$

Переставляючи $H^{(0)}$ з одного боку в інший, еквівалентність (A22) може здаватися дивною, але причиною того, чому це можна зробити, є досить простою. По-перше, якщо $H^{(0)}$ був би не оператором, а просто числом, рівняння (A22) було б тривіальним. Потенціальна частина $H^{(0)}$ це справді просто число, тому це зрозуміло. Але кінетична енергія $H^{(0)}$ – це друга похідна, і тому слід проаналізувати, як можна отримати у цьому випадку (A22). Для цього слід просто двічі інтегрувати по частинах. Граничні умови пропадають, тому що хвильові функції зникають на нескінченності

$$\begin{aligned} &> \text{Diff}(\psi^{(1)}(x), x^2), x=- \\ &\text{infinity}..infinity) = \int_{-\infty}^{\infty} \text{Diff}(\text{conjugate}(\psi^{(0)}(x)), x) * \text{Diff}(\psi^{(1)}(x), x), x=- \\ &\text{infinity}..infinity); \\ &\text{Diff}(\psi^{(0)}(x), x^2) * \psi^{(1)}(x), x=- \\ &\text{infinity}..infinity); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi_{(1)}(x) \right) dx \right)}{m} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d}{dx} \psi_0^*(x) \right) \left(\frac{d}{dx} \psi_{(1)}(x) \right) dx \right)}{m} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi_0^*(x) \right) \psi_{(1)}(x) dx \right)}{m}. \end{aligned}$$

Переконавшись у тому, що рівняння (A22) справджується, можна використовувати рівняння (A23), щоб спростити (A21). Видно, що внески з $H^{(0)}$ і $E^{(0)}$ знищуються, а отже залишилося лише два внески

$$> Eq(A24) := \text{subs}(H^{(0)} = E^{(0)}, Eq(A21));$$

$$Eq(A24) := \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) (x^4 - E^{(1)}) \psi_{(0)}(x) dx = 0.$$

Отже, отримуємо

$$> E^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \text{conjugate}(\psi^{(0)}(x)) * x^4 * \psi^{(0)}(x), x=-infinity..infinity);$$

$$E_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_{(0)}}(x) x^4 \psi_{(0)}(x) dx.$$

Як видно з рівняння (A14), для отримання енергетичного зсуву першого порядку, слід просто помножити його на λ

$$\text{>Eq(A25):} := \Delta E = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_{(0)}}(x) x^4 \psi_{(0)}(x) dx;$$

$$Eq(A25) := \Delta E = \lambda \left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) x^4 \psi_{(0)}(x) dx \right).$$

Загальним виразом для енергетичного зсуву першого порядку для збурення $\Delta H \epsilon$

$$\text{>Eq(A26):} := \Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_0}(x) \Delta H \psi_{(0)}(x) dx;$$

$$Eq(A26) := \Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi_0}(x) \Delta H \psi_{(0)}(x) dx.$$

Застосовуючи рівняння (A25) до основного стану осцилятора, знаходимо перший порядок теорії збурення енергії, обумовлений ангармонічністю

$$\text{> Eq(A27):} := \Delta E[0] = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \text{rhs}(Eq(A9))^2 dx - \int_{-\infty}^{\infty} \text{rhs}(Eq(A9))^2 dx;$$

$$Eq(A27) := \Delta E_0 = \frac{3}{4} \frac{\lambda \hbar^2}{m^2 \omega^2}.$$

Аналогічно, для хвильової функції першого збудженого стану (A25) отримуємо поправку першого порядку для першого збудженого стану

$$\text{> Eq(A28):} := \Delta E[1] = \lambda \int_{-\infty}^{\infty} x^4 \text{rhs}(Eq(A10))^2 dx - \int_{-\infty}^{\infty} \text{rhs}(Eq(A10))^2 dx;$$

$$Eq(A28) := \Delta E_1 = \frac{15}{4} \frac{\lambda \hbar^2}{m^2 \omega^2}.$$

2.11.2. В. Перевірка точності збуреного розв'язку

Рівняння (A27) та (A28) дають приблизний зсув енергії основного та збудженого станів, відповідно, за рахунок ангармонічного збурення (A11). Наближення має давати добре узгоджене значення поправки, а також вказувати наскільки малим повинна бути λ щоб апроксимації (A27) та (A28) були близькими до точних змін енергії. Встановимо спочатку грубий критерій того, наскільки малим повинна бути λ для ефективної роботи теорії збурень. Відправною точкою для розрахунку приблизного енергетичного зсуву було точне власне значення величини E за

параметром збурення λ в рівнянні (A14). Критерієм правильності підходу є той факт, що розклад у (A14), має бути досить швидко збіжним, що вимагає, щоб внески в цих розкладах поступово зменшувалися. Ми розглянули лише перші два внески цього розкладу. Щодо них слід вимагати, щоб вклад першого порядку завжди був набагато меншим від власного значення незбуреної енергії. Для основного стану із рівняння (A27) отримуємо

$$\begin{aligned} > \text{lhs}(\text{Eq}(\text{A27})) < \langle \langle *E[0]^{(0)} \rangle \rangle; \\ & \hbar; \hbar / 2 * \omega > \text{rhs}(\text{Eq}(\text{A27})); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &<< E_0^{(0)}, \\ \frac{3}{4} \frac{\lambda \hbar^2}{m^2 \omega^2} &< \frac{1}{2} \hbar \omega. \end{aligned}$$

Перетворення цієї нерівності дає нам обмеження для λ

$$> \text{Ineq}(\text{B1}) := \lambda < \hbar; \hbar / 2 * \omega / \text{rhs}(\text{Eq}(\text{A27})) * \lambda;$$

$$\text{Ineq}(\text{B1}) := \lambda < \frac{2}{3} \frac{\omega^3 m^2}{\hbar}.$$

Так само, поправка першого порядку для першого збудженого стану (A28) повинна бути значно меншою від енергії незбуреного першого збудженого стану

$$\begin{aligned} > \text{lhs}(\text{Eq}(\text{A28})) < \langle \langle *E[1]^{(0)} \rangle \rangle; \\ 3 * \hbar; \hbar / 2 * \omega > \text{rhs}(\text{Eq}(\text{A28})); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &<< E_1^{(0)}, \\ \frac{15}{4} \frac{\lambda \hbar^2}{m^2 \omega^2} &< \frac{3}{2} \hbar \omega. \end{aligned}$$

Це накладає дещо сильніші обмеження на λ ніж (B1), що пов'язано з тим, що перший збуджений стан має вище середнє квадратичне зміщення і для великих відхилень збуреного від незбуреного потенціалу має більше значення. Отже, для тієї ж точності у приблизному енергетичному зсуві λ для першого збудженого стану поправка повинна бути меншою, ніж для основного стану.

$$> \text{Ineq}(\text{B2}) := \lambda < 3 * \hbar; \hbar / 2 * \omega / \text{rhs}(\text{Eq}(\text{A28})) * \lambda;$$

$$\text{Ineq}(\text{B2}) := \lambda < \frac{2}{5} \frac{\omega^3 m^2}{\hbar}.$$

Тепер перевіримо, наскільки точними є приблизні зсуви у рівняннях (A27) та (A28) для власних значень енергії основного та першого збуджених станів при різних значеннях параметра збурення λ . Все, що треба зробити – це чисельно розв'язати рівняння Шредінгера

$$> \text{Eq}(\text{B3}) := \text{subs}(\text{Eq}(\text{A4}), \text{Eq}(\text{A1}));$$

$$Eq(B3) := -\frac{1}{2} \frac{\hbar^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right)}{m} + \left(\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \lambda x^4 \right) \psi(x) = E \psi(x).$$

Перш ніж почати числовий розрахунок, спростимо рівняння змасштабувавши і перейменувавши параметри та змінні. Почнемо з масштабування x та заміни його на ξ в диференціальному рівнянні

```
> Eq(B4) := x = sqrt(hbar/m/omega)*xi;
```

```
Eq(B5) := expand(dchange(Eq(B4), Eq(B3), [xi], params=[hbar; ,m,omega])/hbar/omega^2);
```

$$Eq(B4) := x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi,$$

$$Eq(B5) := -\left(\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) \right) + \psi(\xi) \xi^2 + \frac{2\hbar\psi(\xi)\lambda\xi^4}{\omega^3 m^2} = \frac{2E\psi(\xi)}{\hbar\omega}.$$

Якщо змасштабувати E , замінивши його на ε , а також λ , замінивши його на α , отримаємо диференціальне рівняння, яке підходить для числових розрахунків. Параметр α визначає величину збурення і власне значення ε , яке потрібно визначити

```
> Eq(B6) := E = hbar*omega/2*epsilon;
```

```
Eq(B7) := lambda = alpha/2/hbar*m^2*omega^3;
```

```
Eq(B8) := subs(%,%, Eq(B5));
```

$$Eq(B6) := E = \frac{1}{2} \hbar \omega \varepsilon,$$

$$Eq(B7) := \lambda = \frac{1}{2} \frac{\alpha m^2 \omega^3}{\hbar},$$

$$Eq(B8) := -\left(\frac{d^2}{d\xi^2} \psi(\xi) \right) + \psi(\xi) \xi^2 + \psi(\xi) \alpha \xi^4 = \varepsilon \psi(\xi).$$

Чисельна процедура розрахунку власних значень реалізує так. Вибираємо у рівнянні (B8) певне значення для α , накладаємо граничні умови для хвильової функції, а потім змінюємо власне значення ε , аж поки розв'язок диференціального рівняння для великих аргументів не спадатиме на нескінченності. Слід звернути увагу, що чисельно можна отримати добре спадання лише для певного діапазону x або ξ через обмежену точність чисельних розрахунків.

2.11.3. С. Числовий розрахунок енергії основного збуреного стану

```
> DEplot(subs(alpha=0.01, epsilon=1.007373, Eq(B8)), psi(xi)
, xi=-5..5, [[psi(0)=1, D(psi)(0)=0]], psi=-
0.5..1, stepsize=.05);
```


(рис. 61).

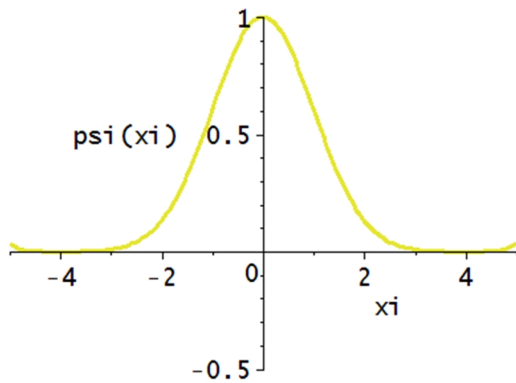


Рис. 61.

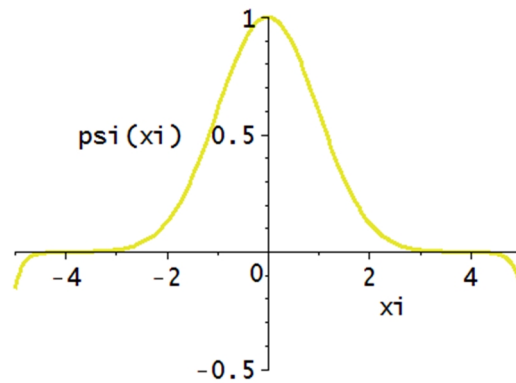


Рис. 62.

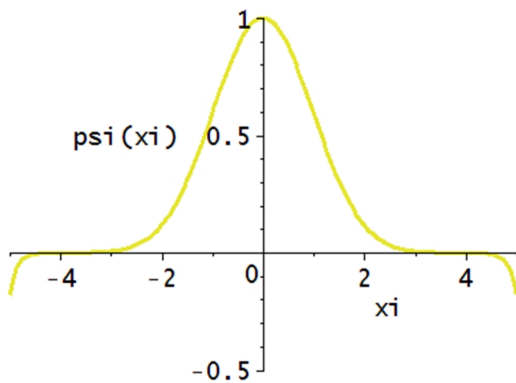


Рис. 63.

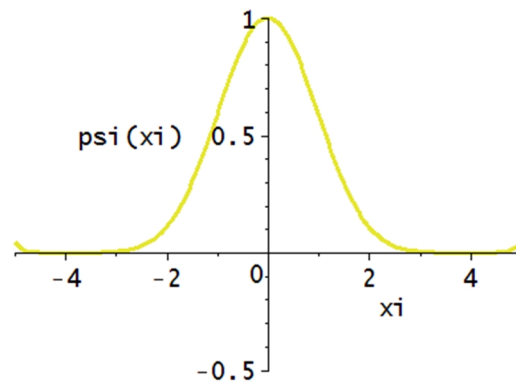


Рис. 64.

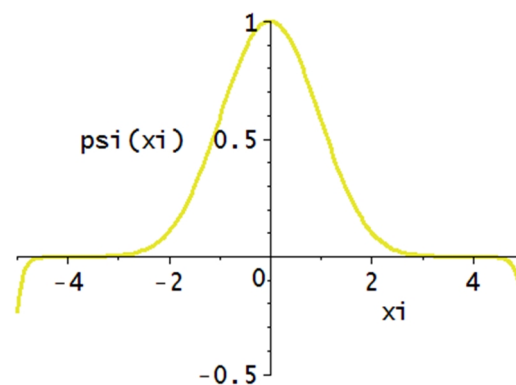


Рис. 65.

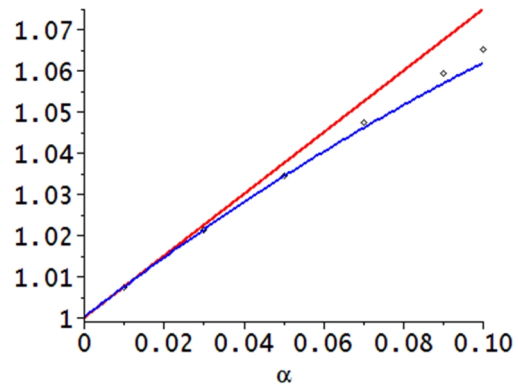


Рис. 66.

```
>DEplot(subs(alpha=0.03,epsilon=1.02144,Eq(B8)),psi(xi),
xi=-5..5,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-
0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 62).

```
>DEplot(subs(alpha=0.05,epsilon=1.03473,Eq(B8)),psi(xi),
xi=-5..5,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-
0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 63).

```
>DEplot(subs(alpha=0.07,epsilon=1.047366,Eq(B8)),psi(xi),xi=-5..5,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 64).

```
>DEplot(subs(alpha=0.09,epsilon=1.0594384,Eq(B8)),psi(xi),xi=-5..5,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 65).

Проілюструємо розраховані власні значення. Власне значення змасштабованої енергії ϵ зображено над змасштабованим збуренням α . Ромбики – розраховані значення, червона лінія є результатом теорії збурень першого порядку, відповідно до рівняння (A27), і для порівняння наведена синя лінія, як результат теорії збурення другого порядку

```
>r1:=pointplot({[0.01,1.007373],[0.03,1.02144],[0.05,1.03473],[0.07,1.047366],[0.09,1.0594384],[0.1,1.065285]},colour=black):
r2:=plot(1+3/4*alpha,alpha=0..0.1,colour=red):
r3:=plot(1+0.75*alpha-21/16*alpha^2,alpha=0..0.1,colour=blue):
display(r1,r2,r3);
```

(рис. 66).

Далі робимо такий самий числовий розрахунок для першого збудженого стану.

2.11.4. D. Числовий розрахунок збуреного першого збудженого стану

```
>DEplot(subs(alpha=0.01,epsilon=3.0365,Eq(B8)),psi(xi),xi=-5..5,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 67).

```
>DEplot(subs(alpha=0.03,epsilon=3.10455,Eq(B8)),psi(xi),xi=-5..5,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 68).

```
>DEplot(subs(alpha=0.05,epsilon=3.16723,Eq(B8)),psi(xi),xi=-5..5,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 69).

```
>DEplot(subs(alpha=0.07,epsilon=3.22564,Eq(B8)),psi(xi),
xi=-5..5,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-
1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 70).

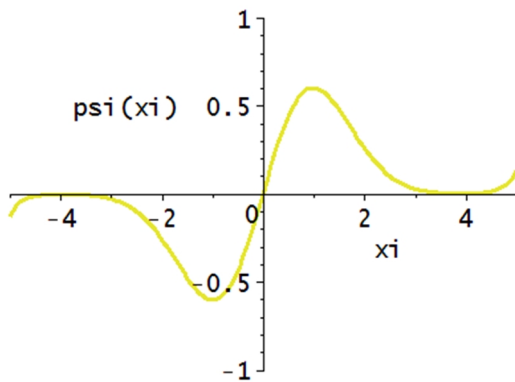


Рис. 67.

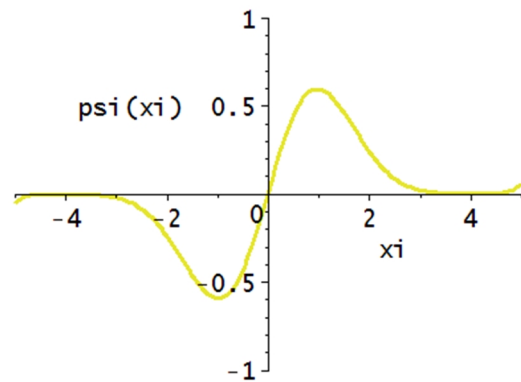


Рис. 68.

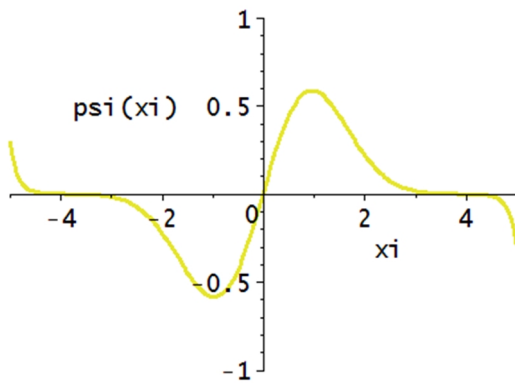


Рис. 69.

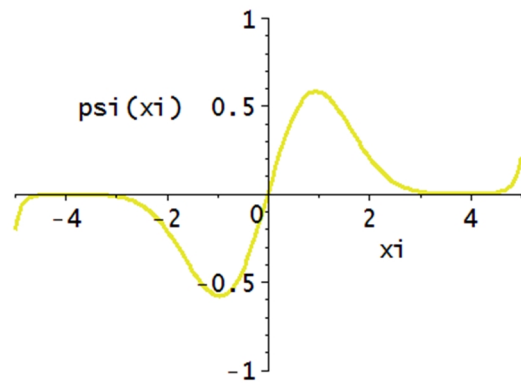


Рис. 70.

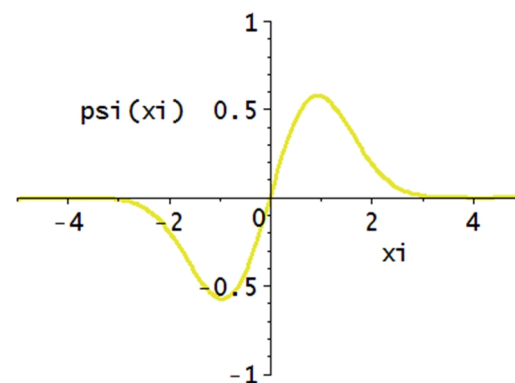


Рис. 71.

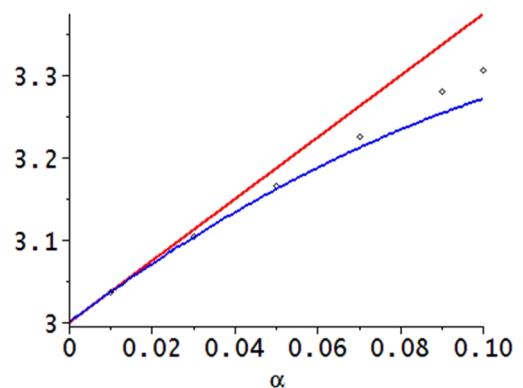


Рис. 72.

```
>DEplot(subs(alpha=0.09,epsilon=3.280553,Eq(B8)),psi(xi)
,xi=-5..5,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-
1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 71).

Дані числового розрахунку (чорні ромбики), результат теорії збурень першого порядку з рівняння (E28), (червона лінія) та результат теорії збурень другого порядку показують, що знову отримано розумне узгодження з наближеннями до справжніх значень

```
>r4:=pointplot({[0.01,3.0365],[0.03,3.10455],[0.05,3.16723],[0.07,3.22564],[0.09,3.280553],[0.1,3.3069]},colour=black): r5:=plot(3+15/4*alpha,alpha=0..0.1,colour=red): r6:=plot(3+15/4*alpha-165/16*alpha^2,alpha=0..0.1,colour=blue): display(r4,r5,r6);
```

(рис. 72).

Перейдемо до більших значень параметра збурення α .

2.11.5. Е. Числовий розрахунок збурених власних значень для більшого збурення

```
>DEplot(subs(alpha=0.1,epsilon=1.065285,Eq(B8)),psi(xi),xi=-4..4,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 73).

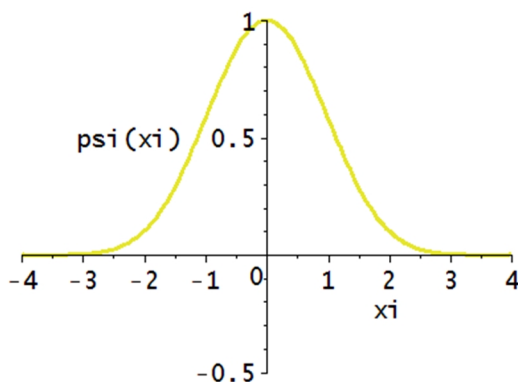


Рис. 73.

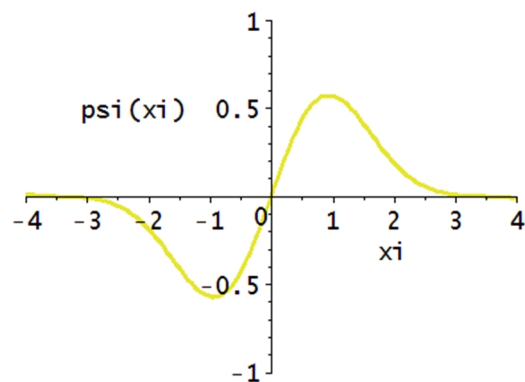


Рис. 74.

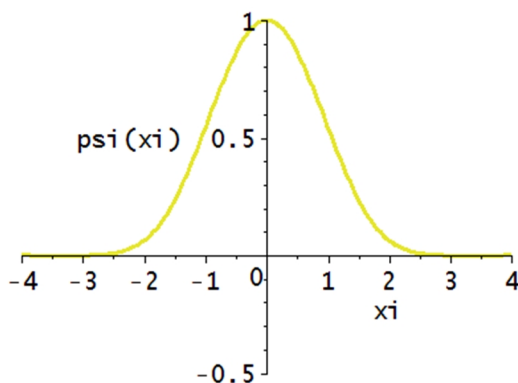


Рис. 75.

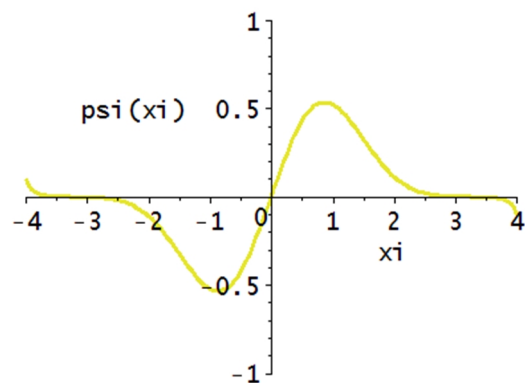


Рис. 76.

```
>DEplot(subs(alpha=0.1,epsilon=3.3069,Eq(B8)),psi(xi),xi
=-4..4,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 74).

```
>DEplot(subs(alpha=0.3,epsilon=1.1640471,Eq(B8)),psi(xi)
,xi=-4..4,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-
0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 75)

```
>DEplot(subs(alpha=0.3,epsilon=3.73249,Eq(B8)),psi(xi),x
i=-4..4,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-
1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 76)

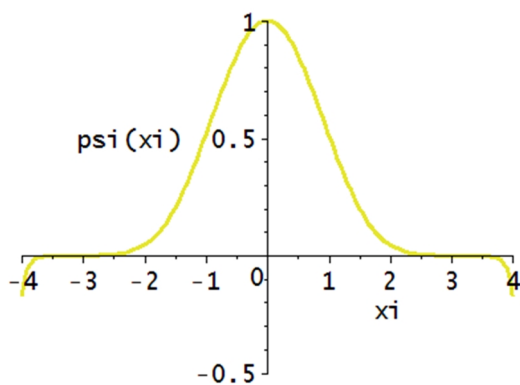


Рис. 77.

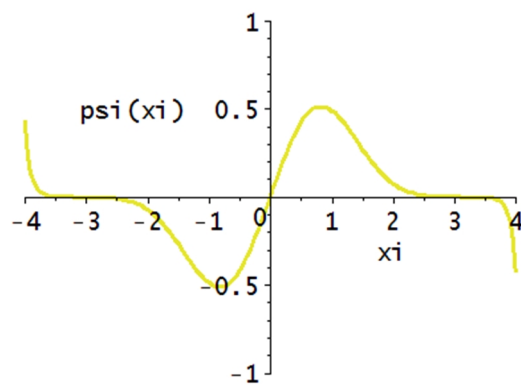


Рис. 78.

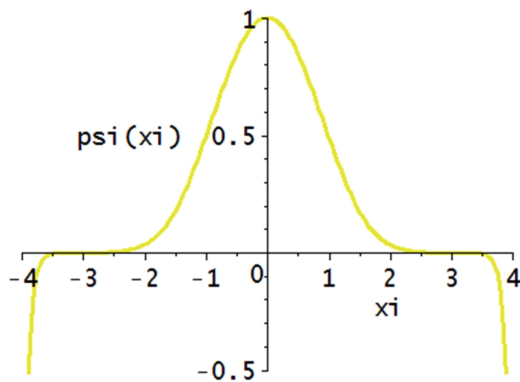


Рис. 79.

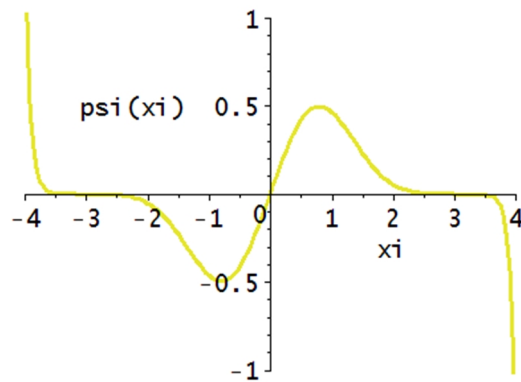


Рис. 80.

```
>DEplot(subs(alpha=0.5,epsilon=1.2418541,Eq(B8)),psi(xi)
,xi=-4..4,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-
0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 77).

```
>DEplot(subs(alpha=0.5,epsilon=4.051934,Eq(B8)),psi(xi)
,xi=-4..4,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-
1..1,stepsize=.05)
```

(рис. 78).

```
>DEplot(subs(alpha=0.7,epsilon=1.3077487,Eq(B8)),psi(xi),xi=-4..4,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 79).

```
>DEplot(subs(alpha=0.7,epsilon=4.31594,Eq(B8)),psi(xi),xi=-4..4,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 80).

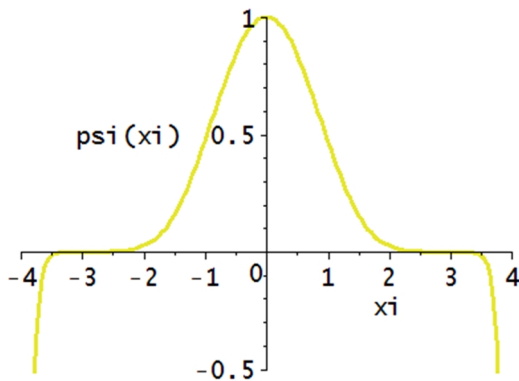


Рис. 81.

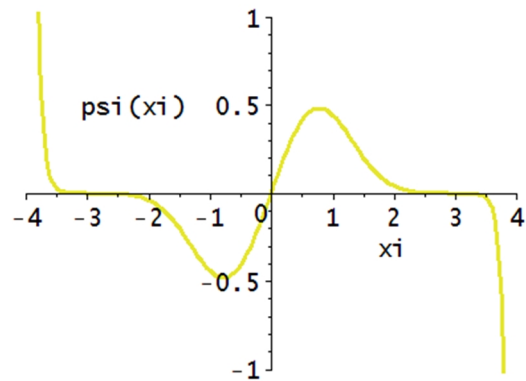


Рис. 82.

```
>DEplot(subs(alpha=0.9,epsilon=1.36566985,Eq(B8)),psi(xi),xi=-4..4,[[psi(0)=1,D(psi)(0)=0]],psi=-0.5..1,stepsize=.05);
```

(рис. 81).

```
>DEplot(subs(alpha=0.9,epsilon=4.54445,Eq(B8)),psi(xi),xi=-4..4,[[psi(0)=0,D(psi)(0)=1]],psi=-1..1,stepsize=.05);
```

(рис. 82).

Наступний графік узагальнює всі результати для основного та першого збудженого станів: чорні ромбики – це чисельно розраховані дані, зелені лінії є власними значеннями незбудженого гармонічного осцилятора, червоні лінії є результатами теорії збуджень першого порядку, а сині лінії є результатами теорії збуджень другого порядку.

```
>p5:=plot({1+3/4*alpha,3+15/4*alpha},alpha=0..1,0..6,colour=red): p6:=plot({1,3},alpha=0..1,colour=green):
p7:=pointplot({[0.1,1.065285],[0.3,1.1640471],[0.5,1.2418541],[0.7,1.3077487],[0.9,1.36566985],[0.1,3.3069],[0.3,3.73249],[0.5,4.051934],[0.7,4.31594],[0.9,4.54445]},colour=black):
```

```
p8:=plot({1+3/4*alpha-21/16*alpha^2,3+15/4*alpha-165/16*alpha^2},alpha=0..1,colour=blue):
display(p5,p6,p7,p8);
```

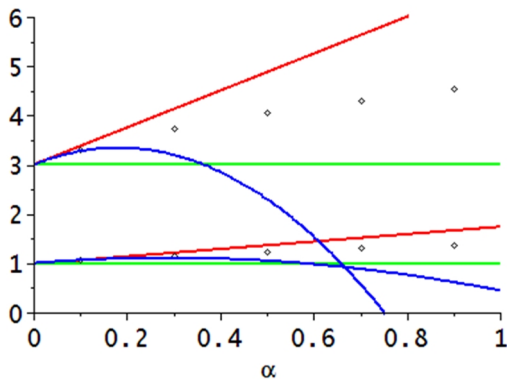


Рис. 83.

З графіків (рис. 83) видно, що теорія збурень взагалі не працює за умови, що збурення є занадто великим. Якщо розглянути нерівності (B1) та (B2) і звести їх до змасштабованого параметра α з рівняння (B7), то видно, що α повинно бути набагато меншим від $4/3$, а з (B2) – ніж $4/5$. Наведений вище графік показує, що "набагато менше" насправді означає хоча б порядок.

Тут варто зазначити, що наведені графіки також показують, що якщо результати теорії збурень починають значно відхилятися від точних власних значень, то теорія збурень другого порядку також не дає значного покращення, порівняно з теорією збурень першого порядку. Отже, якщо теорія збурень взагалі корисна, то перший порядок зазвичай дає досить гарне наближення, а розрахунок другого порядку не буде суттєво змінювати результат. Винятком із цього правила є системи, для яких обмеження симетрії призводять до втрати результату теорії збурень першого порядку; тоді неможливо обійтися без розрахунку поправки другого порядку. Прикладом такої системи буде гармонічний осцилятор з ангармонічним збуренням $\Delta H = \lambda x^3$.

2.12. Діамагнітні стани атома водню

У цій задачі теорія збурень застосована до задач взаємодії атомних об'єктів із зовнішніми постійними полями. Зокрема, розглянуто побудову хвильових функцій діамагнітних станів водневоподібного атома, визначення діамагнітної сприйнятливості та магнітоіндукованих поправок до інтенсивності ліній за допомогою теорії збурень вищих порядків.

2.12.1. Розкладання хвильових функцій за сферичним кулонівським базисом

Розглянемо задачу про знаходження магнітоіндукованих поправок до ймовірностей переходів із сильно збуджених (вироджених) станів водневоподібних атомів в основний стан [13].

Діамагнітна взаємодія, яка описується потенціалом

$$Eq(12.1) := V_D = \frac{B^2}{12} r^2 \left(1 - C_{20} \left(\frac{r}{\tau} \right) \right)$$

не є сферично симетричною. Під дією магнітного поля відбувається перемішування станів з різними моментами однакової парності (внаслідок парності діамагнітного оператора), і атом переходить в стан з парністю $P=(-1)^m$, який є суперпозицією станів з $l=m, m+2, \dots, n-1$ або в стан з парністю $P=(-1)^{m+1}$ який є суперпозицією станів з $l=m+1, m+3, \dots, n-1$.

Сильно збуджені рівні, зокрема, $|nP\rangle$, є компонентами земанівського стану, $|nml\rangle$ з $m=0,1$ з від'ємною парністю, до складу якого входять також стани з моментами $l=3, 5, \dots$. Ці рівні мають різні квадратичні зсуви, тобто діамагнітна взаємодія повністю знімає виродження у спектрі водню. Таким чином, перерозподіл інтенсивності дипольного випромінювання по діамагнітних станах $|nml\rangle$ в серії Лаймана (який відповідає переходам $|nP\rangle \rightarrow |lS\rangle$) визначається внеском $|nP\rangle$ -хвильової функції сферичного кулонівського базису. У нульовому наближенні цей внесок не залежить від сили поля B , оскільки енергії вироджених станів співпадають і перехід до діамагнітних станів пов'язаний лише зі зміною симетрії хвильової функції.

Зі зростанням B відбувається як зміна матричного елемента $|nP\rangle$ - переходу, так і зміна вкладу $|nP\rangle$ -стану в діамагнітну хвильову функцію.

Крім того, діамагнітна взаємодія індукує переходи зі станів з моментами $l=3, 5, \dots$, які також входять у хвильову функцію нульового наближення. Для розрахунку цих поправок слід використовувати теорію збурень вищих порядків для вироджених станів.

За аналогією із розкладом діамагнітної енергії

$$Eq(12.2) := \Delta E_\lambda = E_\lambda - E_n = - \sum_{s=1}^{\infty} \frac{\chi_\lambda^{(s)}}{2s!} B^{2s},$$

Де $\chi_\lambda^{(s)}$ – діамагнітна сприйнятливість s -го порядку, запишемо ряд для оператора діамагнітної взаємодії $W_{II'}$ у вигляді

$$Eq(12.3) := W_{ll'} = - \sum_{s=1}^{\infty} \frac{v_{ll'}^{(s)}}{2s!} B^{2s}.$$

Матричний елемент радіаційного переходу подамо у вигляді

$$Eq(12.4) := d_{if}(B) = d_{10} \left(\mathbf{1} + \sum_{s=1}^{\infty} q_{10}^{(s)} B^{2s} \right).$$

Коефіцієнти a_i теж слід розкласти в степеневі ряди, які на відміну від величин (2), (3), що перетворюються в нуль при $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{0}$, починаються з нульового степеня:

$$Eq(12.5) := a_i = \sum_{s=1}^{\infty} a_i^{(s)} B^{2s}$$

і при $\mathbf{B}=\mathbf{0}$ ці величини залишаються скінченими, $a_i|_{B \rightarrow 0} = a_i^{(0)}$. У нижчому порядку маємо:

$$Eq(12.6) := \sum_{I=m+p}^{I_{max}} a_I^{(0)} \left(v_{ll'}^{(1)} - \chi^{(1)} \delta_{ll'} \right) = \mathbf{0}.$$

Таким чином, набір коефіцієнтів $a_I^{(0)}$ є власним вектором, а $\chi^{(1)}$ – власним значенням матриці діаманітної взаємодії $v_{ll'}^{(1)}$.

Власні значення цієї матриці представляють собою діаманітну сприйнятливність першого порядку $v_{\lambda}^{(1)}$, де $I=1,2,\dots,K$, а K визначає кратність виродження.

Розглянемо Maple-програму, що реалізовує описаний алгоритм. Для здійснення матричних операцій необхідно завантажити пакет **linalg**. Визначимо початкові умови (головне і магнітне квантові числа верхнього рівня) та кілька допоміжних функцій. Кратність виродження k , яка вказує розмірність матриць, визначається значенням головного квантового числа верхнього рівня:

```
>restart;
>n:=50;
m:=0;
>with(linalg):
>kron:=(i,j) -> if i=j then 1 else 0 fi;
>p4:=proc(a) options operator, arrow;
a*(a+1)*(a+2)*(a+3) end proc;
>k:=trunc(n/2);
```

Перш за все, слід знайти хвильові функції нульового наближення, а точніше, коефіцієнти їх розкладу по базису функцій з певним значенням

орбітального моменту відповідної парності за відсутності магнітного поля. Функція V_1 визначає діамагнітну матрицю першого порядку

$$EV_1[(I + 1)/2, (I' + 1)/2] = v_{ll'}^{(x)}.$$

```

>#The first-order on energies and zero-order on
coiefficients
>V_1:=(n,l,le,m)→
>if le<l then V_1(n,le,l,m)
>else if le=1 then ((1^2+1-1+m^2)/(2*1-
1)/(2*1+3))*n^2*(5*n*n+1-3*1*(1+1));
>else if le=1+2 then -5*n^2/2/(2*1+3)*(((1+1)^2-
m^2)*((1+2)^2-m^2)/(2*1+1)/(2*1+5)*(n^2-(1+1)^2)*(n^2-
(1+2)^2))^(1/2);
>else 0 fi fi fi;
>EV_1:= Matrix(k,k):
>#for i from 1 to k do for j from 1 to k do EV_1[i,
j]:=V_1(n,2*i-1,2*j-1,m) od od ;
> for i from 1 to k do for j from 1 to k do EV_1[i, j]
:=evalf(V_1(n,2*i-1,2*j-1,m),12) od od ;
>print(EV_1);
>det(EV_1);
>eigenvals(EV_1,'radical');
>y:=[eigenvects(EV_1)];

```

Власні значення цієї матриці визначають діамагнітну сприйнятливість першого порядку, а власні вектори матриці EV_1 задають коефіцієнти нульового наближення, зібрані в матриці A_0

```

>A_0:=matrix(k,k,[]);
E_cor1:=vector(k,[]);
for la from 1 to k do
> E_cor1[la]:=y[la][1]:
>for lb from 1 to k do
>A_0[la,lb]:=y[la][3][][lb];
>od;
print(A_0[la,1])
>od;
print(A_0);

```

Таким чином, кожен елемент $A_0 \left[I a, \frac{I+1}{2} \right] = a_I^{(0)}(\lambda)$, який відповідає деякому своєму власному значенню $E_{cor1}[Ia] = \chi_\lambda^{(1)}$ (діамагнітна сприйнятливості першого порядку), визначає коефіцієнт розкладу хвильової функції діамагнітного стану з номером λ при незбуреній функції з орбітальним моментом I , або внесок чистого стану з моментом I в діамагнітний стан з номером λ . Перевірити умову повноти можна, знайшовши суму квадратів коефіцієнтів при певному значенні орбітального моменту, наприклад, $I = 1$ для всіх λ

>sum((A_0[p1, 1])^2, p1=1..k);

Очевидно, така сума повинна бути рівною 1.

2.12.2. Магнітоіндуковані поправки до інтенсивності ліній серії Лаймана

Отримані значення $\chi_\lambda^{(1)}$ і $a_I^{(0)}(\lambda)$ використовуються для розв'язування системи рівнянь в наступному за B^2 порядку, яку можна представити у вигляді:

$$Eq(12.7) := \sum_{I'}^{I_{max}} a_{I'}^{(0)}(\lambda) (v_{II'}^{(1)} - \chi_\lambda^{(1)} \delta_{II'}) + \sum_{I'}^{I_{max}} a_{I'}^{(0)}(\lambda) (v_{II'}^{(2)} - \chi_\lambda^{(2)} \delta_{II'}).$$

Домножимо обидві частини цього рівняння на $a_{r'}^{(0)*}(\lambda)$ і підсумуємо по I . З урахуванням (6) та умови повноти $\sum |a_I^{(0)}(\lambda)|^2 = 1$, отримаємо вираз для сприйнятливості другого порядку:

$$Eq(12.8) := \chi_\lambda^{(2)} = \sum_{I=m+p}^{I_{max}} \sum_{I'=m+p}^{I_{max}} a_I^{(0)*}(\lambda) a_{I'}^{(0)}(\lambda) v_{II'}^{(2)}.$$

Таким чином, квадратична діамагнітна сприйнятливості визначається власним вектором $a_{I'}^{(0)}(\lambda)$ матриці першого порядку EV_1 і матричними елементами другого порядку EV_2 , які обчислюються за допомогою функції V_2 .

>#The Second order on energies and first-order on coefficients

>V_2:=(n,l,le,m) →

>if l>le then V_2(n,le,l,m)

> else if le=1 then B0:=n^6/240*(5*n^2*(97*n^2-33*1*(1+1)+365)-12*(21*1^4+42*1^3+179*1^2+158*1+60));

B2:=n^6/(336*(2*1+3))*(n^2*(802*n^2-1005*1*(1+1)+2000)+3*(175*1^4+350*1^3+523*1^2+348*1-480));

B4:=n^6/(1120*(2*1+3)*(2*1+5))*(15*n^2*(41*n^2+22*1*(1+1

```

)-185)-1001*1^3*(1+2)+3421*1^2+4422*1-2160);
B0+(3*m^2-1*(1+1))/((2*1-1))*B2+(3*(1^2+2*1-5*m^2)*(1^2-
5*m^2-1)-10*m^2*(4*m^2-1))/((2*1-1)*2*(2*1-3))*B4
>else if le=1+2 then
G0:=n^2*(429*1*(1+3)-802)+237*1^3*(1+6)+3145*1^2+3036*1-
2484;
G2:=5*(41*n^2+37*1^2+111*1-75);
-sqrt(((1+1)^2-m^2)*((1+2)^2-m^2)*(n^2-(1+1)^2)*(n^2-
(1+2)^2))/((2*1-
1)^2*(2*1+1)*(2*1+3)^2*(2*1+5)*(2*1+7)^2))*n^6/32*(G0+m^
2*G2);
else if le=1+4 then sqrt((p4(1+1-
m)*p4(1+1+m)*p4(n+1+1)*p4(n-1-
4))/((2*1+1)*(2*1+3)^2*(2*1+5)^2*(2*1+7)^2*(2*1+9)))*205
*n^
6/128
>else 0 fi fi fi fi ;
>EV_2:=matrix(k,k);
for i from 1 to k do for j from 1 to k do EV_2[i, j]
:=evalf(V_2(n,2*i-1,2*j-1,m),12) od od;
print(EV_2);

```

Розрахуємо діамагнітну сприйнятливість другого порядку $\chi_\lambda^{(2)}$

```

E_cor2:=vector(k, []);
>forl from 1 to k do
>s:=0;
>for i from 1 to k do
>for j from 1 to k do
>s:=s+A_0[la, i]*A_0[la, j]*EV_2[i, j];
>od;
>od;
>E_cor2[la]:=s;
>od;

```

Тепер, маючи значення сприйнятливості $\chi_\lambda^{(2)}$, можна розв'язати систему рівнянь (12.7) для знаходження поправки $a_l^{(1)}(\lambda)$ до коефіцієнтів (12.5). Однак, визначник системи (12.7) точно співпадає із визначником системи однорідних рівнянь (12.6), а отже, перетворюється в нуль. Тому на

додаток до (12.7) слід використовувати умову збереження нормування хвильової функції в першому порядку по V_D :

$$eq(12.9) := \sum_{I=m+p}^{I_{max}} a_I^{(0)}(\lambda) a_I^{(1)}(\lambda) = 0.$$

Значення сприйнятливості $\chi_\lambda^{(2)}$ разом з коефіцієнтами $a_I^{(1)}(\lambda)$ розраховуються для кожного власного вектора діамагнітної матриці EV_1 , який відповідає конкретному власному значенню $\chi_\lambda^{(1)}$. Величини $a_I^{(1)}(\lambda)$ визначають поправки першого порядку по B^2 до хвильової функції виродженого стану, пов'язані зі зміною в сильному полі внеску базисних векторів $\varphi_{m/n}$

```

Mv_1:=matrix(k,k-1,[]);
Mv_3:=matrix(k-1,k-1,[]);
Mv_4:=matrix(k-1,k-1,[]);
Dv_3:=vector(k-1,[]);
Kv_3:=vector(k-1,[]);
A_1:=vector(k,[]);
Cv_1:=matrix(k,k,[]);
Cv_2:=matrix(k,k,[]);
>for la from 1 to k do
>Cv_1:=evalm(-
E_cor1[la]*Matrix(k,k,shape=identity)+EV_1):
Cv_2:=evalm(-
E_cor2[la]*Matrix(k,k,shape=identity)+EV_2):
for i from 1 to k do for j from 1 to k-1 do
Mv_1[i,j]:=Cv_1[i,j]-A_0[la,j]/A_0[la,k]*Cv_1[i,k]
od od;
>Mv_3:=delrows(Mv_1,k..k);
for u from 1 to k-1 do
Dv_3[u]:=sum(A_0[la,v]*Cv_2[u,v],v=1..k);
od;
Mv_4:=concat(Dv_3,evalm(delcols(Mv_3,1..1)));
A_1[la]:=det(Mv_4)/det(Mv_3)/A_0[la,1]/3;
>od;
>print(E_cor2,A_1);

```

Таким чином, $E_cor2[la] = \chi_\lambda^{(2)}$, $a_{I=1}^{(1)}(\lambda) = A_1[la]$.

Загальна поправка до матричних елементів першого порядку містить п'ять доданків. Крім обчислених вище поправок до коефіцієнтів розкладу хвильових функцій по сферичному кулонівському базису (**q5**) слід

враховувати зміни в магнітному полі матричного елемента дипольного переходу ($q1$ і $q2$), а також появу магнітоіндукованих переходів з nf -станів ($q3$ і $q4$). Тому, загальний фактор $q_{10}^{(1)}(\lambda)$ відповідає сумі цих поправок, формули для обчислення яких наведені у [13]. Фрагмент програми для розрахунку цих компонент для $m=0$ має такий вигляд

```
>#Magnetic field induced corrections
>q1:=(119*n^6-277*n^4-171*n^2-55)/120/(n^2-1)^3;
>q2:=n^4*(15*n^8-80*n^6+152*n^4-84*n^2+189)/60/(n^2-1)^3;
>q3:=(1a) →
>sqrt(3)/20/sqrt(7)*A_0[1a,2]/A_0[1a,1]*2*n^2*(49*n^2-1)*sqrt((n^2-4)*(n^2-9))/3/(n^2-1)^3;
>q4:=(1a) →
>sqrt(3)/20/sqrt(7)*A_0[1a,2]/A_0[1a,1]*n^4*sqrt((n^2-4)*(n^2-9))/24/(n^2-1)^3*(55*n^6+115*n^4-411*n^2-527);
```

Складемо з фактора $q_{10}^{(1)}$ і його компонент спеціальну матрицю QuB , що містить k рядків, причому кожен рядок цієї матриці містить інформацію про поправки для деякого діамагнітного стану. Для ідентифікації діамагнітних станів доцільно ввести в матрицю Qu . Визначення діамагнітних сприйнятливостей $\chi_{\lambda}^{(1)}$ і $\chi_{\lambda}^{(2)}$ запишемо

```
>QuB:=array(1..k,1..8,[]);
>for lu from 1 to k do
>QuB[lu,7]:=E_cor1[lu]/8;
>QuB[lu,8]:=E_cor2[lu]/24;
>QuB[lu,1]:=q1;
>QuB[lu,2]:=q2;
>QuB[lu,3]:=q3(lu);
>QuB[lu,4]:=q4(lu);
>QuB[lu,5]:=A_1[lu];
>QuB[lu,6]:=sum(QuB[lu,c],c=1..5);
>od;
```

Обчислення на цьому можна вважати завершеними. Однак, нумерація діамагнітних станів проводиться програмою довільно, оскільки власні значення матриці збурення, обчислені процедурою **eigenvects**, неупорядковані. Для виправлення цієї незручності можна здійснити

впорядкування рядків матриці QuB за значенням діамагнітної сприйнятливості першого порядку $\chi_{\lambda}^{(1)}$

```
>#Сортування матриці результатів
>for u1 from 1 to k-1 do
>for u2 from u1+1 to k do
>IfQuB [u1,7]>QuB [u2,7] then
>for u3 from 1 to 8 do
>Lo:=QuB[u1, u3];
>QuB[u1, u3]:=QuB u2, u3];
>QuB[u2, u3]:=Lo;
>od; fi; od; od;
```

Отримані результати можна вивести у вигляді таблиці

```
>for lur from 1 to k do
>print(lur, ` `,QuB[lur,7],`
`,QuB[lur,8],` `,evalf(QuB[lur,6]));
>printf(`%14g      %+14g      %+14g      %+14g      %+14g
`,evalf(QuB[lur,1]),
evalf(QuB[lur,2]),
evalf(QuB[lur,3]),
evalf(QuB[lur,4]),
evalf(QuB[lur,5]));
>od;
```

або у вигляді графіка

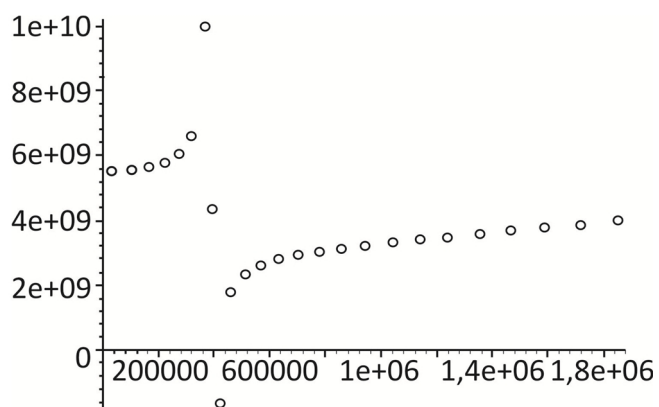


Рис. 84

```
>plot([QuB[kisa, 7],
QuB[kisa, 6],
kisa=1..k]);
```

На рис. 84 наведено графік, який відповідає випадку $n=50$

```
>#The end!
```

Аналогічним чином проводять розрахунки і для інших типів переходів з виродженого стану у

невироджений, зокрема, для всіх переходів серій Лаймана і Бальмера.

2.13. Чисельна реалізація задачі на власні значення для оболонкових моделей

2.13.1. А. Оболонкові моделі

Найвідомішим прикладом одноелектронних оболонкових моделей є модель атомних оболонок, яку іноді вважають точним описом будови атома. Відповідно до цієї моделі заповнені оболонки виникають при таких кількостях електронів – 2, 8, 18, 32 Разом з тим, у ядерній фізиці відомий ряд інших "магічних" чисел 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 154. Виникає підозра, що існування цього ряду чисел також пов'язане із оболонковою моделлю.

Оболонкова модель сферичного атомного ядра аналогічна моделі електронних оболонок атома. У нульовому наближенні цих моделей передбачається незалежний рух частинок (електронів в атомі, протонів і нейтронів в ядрі) у центрально-симетричному полі $U(\mathbf{r})$. У оболонковій моделі ядра припускають, що всі нуклони незалежні і перебувають у самоузгодженому полі решти нуклонів, що зводить задачу багатьох тіл до задачі про рух однієї частинки в такому полі. Розв'язок рівняння Шредингера для самоузгодженого центрально-симетричного поля дозволяє знайти рівні енергії для станів нейтронів і протонів. Їх заселення за принципом Паулі, аналогічне заселенню електронами атомних станів, призводить до поняття нуклонних оболонок. Повністю заповненим зовнішнім нуклонним оболонкам відповідають особливо стійкі атомні ядра, які називають магічними, вони аналогічні атомам інертних газів.

Для більшості ядер розподіл у них протонів і нейтронів можна вважати таким, що швидко спадає до нуля при $r > R_{\text{я}}$, тому самоузгоджену потенціальну енергію нейтрона і протона в ядрі можна приблизно записати у вигляді

$$\begin{aligned} V_n(r) &= -B\rho(r), \\ V_p(r) &= -B\rho(r) + V_c(r), \end{aligned}$$

де $V_c(r)$ – кулонівська взаємодія протона з однорідно зарядженою сферою радіуса R_c із сумарним зарядом $+(Z-1)e$.

$$(EqA1) := V_c(r) = \begin{cases} \frac{(Z-1)e^2}{2R_c} \left[3 - \left(\frac{r}{R_c} \right)^2 \right] & \text{для } r \leq R_c, \\ \frac{(Z-1)e^2}{r} & \text{для } r > R_c. \end{cases}$$

Дослідним шляхом Хофштадтером було показано, що узгодження з експериментом забезпечує розподіл електричного заряду в ядрі

$$\rho = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R_c}{a}\right)}$$

подібний до розподілу Фермі. Параметр R_c має зміст радіуса зарядженої області, а параметр a визначає товщину її поверхневого шару. З

урахуванням цих виразів початкове наближення для потенціальної енергії нейтрона зазвичай задають у вигляді потенціалу Вудса-Саксона

$$Eq(A2) := V_n(r) = -\frac{V_{0n}}{1 + \exp\left(\frac{r-R_n}{a_n}\right)}.$$

Потенціальна енергія протона містить ще й енергію V_c

> $V(r) := -V_0 / (1 + \exp((r - R_0 * A^{1/3}) / a_0));$

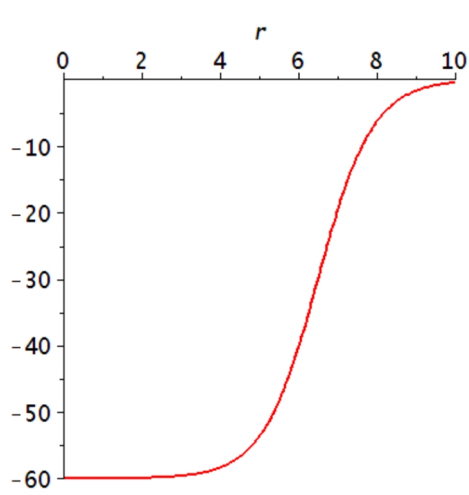


Рис. 85

$$Eq(A3) := V_p(r) = -\frac{V_{0p}}{1 + \exp\left(\frac{r-R_p}{a_p}\right)}.$$

> $\text{plot}(V(r), r=0..10);$

Радіуси R_n , R_p і R_c приблизно рівні між собою і близькі до радіуса ядра R_γ . Глибини потенціальних ям V_{0n} та V_{0p} можна знайти шляхом порівняння результатів розрахунків з експериментальними даними. Таке порівняння можливе як для розрахунків перерізів розсіяння нуклонів на ядрах, так і для властивостей основного і збуджених

станів ядер в оболонковій моделі ядра. Виявилося, що глибини потенціальних ям V_{0n} , V_{0p} знаходяться в діапазоні 40-50 МеВ. Часто використовуються емпіричні формули для параметрів потенціалів:

$$Eq(A4) := V_p = V_{0p} \left(1 + 0.63 \frac{N-Z}{A}\right),$$

$$V_0 = 53 \text{ МеВ}, \quad R_n = R_p = R_c = r_0 A^{1/3} = 1.28 \text{ фм}.$$

$$Eq(A5) := V_n = V_{0n} \left(1 - 0.63 \frac{N-Z}{A}\right), \quad R_p = R_c = R_\gamma, \quad a_p = a_n = a = 0.65 \text{ фм}.$$

$$R_p = R_c = R_\gamma, \quad a_p = a_n = a = 0.65 \text{ фм}.$$

Енергія взаємодії протона з нейтроном дещо більша, ніж у пар протон-протон та нейтрон-нейтрон. Тому відмінність V_{0n} , і V_{0p} пропорційна надлишку нейтронів відносно протонів у ядрі $N-Z$.

Складний характер ядерних сил призводить до необхідності додавання до виразів (A4) і (A5) додаткової енергії нуклонів, обумовленої ядерною спіно-орбітальною взаємодією, що має формальну схожість з електромагнітною спіно-орбітальною взаємодією.

Стан частинок у центрально-симетричному полі характеризується орбітальним квантовим числом l ($l=0,1,\dots$) і головним квантовим числом n – номером стану з даним значенням l ($l=1,2,\dots$). Відповідно енергія $E=E(n,l)$. Стани з $l=0,1,2,3,4,5,\dots$, як це прийнято у атомній фізиці, позначаються латинськими буквами s, p, d, f, g, h,\dots і далі по алфавіту. У

атомах стани прийнято позначати числом l і головним квантовим числом n ($n=1, 2, \dots$), так що при даному n орбітальне квантове число l приймає значення від 0 до $n-1$. Приклади наборів станів в атомі: із заданим значенням $n = 3$: $3s, 3p, 3d$; із значенням $l = 0$: $1s, 2s, 3s, \dots$; з $l = 2$: $3d, 4d, 5d, \dots$. У ядрах прийнято позначати стани числом l і головним квантовим числом $n = 1, 2, \dots$ так, що при даному n орбітальне квантове число приймає будь-які цілі додатні значення. Приклади набору станів із значенням $l = 0$: $1s, 2s, 3s, \dots$; з $l = 2$: $3d, 4d, 5d, \dots$.

Стани нуклонів у сферичному ядрі характеризуються також квантовим числом j , яке приймає два значення $j_1 = l + 1/2$ і $j_2 = l - 1/2$.

Внесок у потенціальну енергію від спин-орбітальної взаємодії описується виразом

$$U_{sl}(r)(\vec{l}\vec{s}),$$

де

$$U_{sl} = b \frac{1}{r} \frac{dV}{dr}, \quad b = x_0^2 K \frac{\hbar^2}{2m x_0^2 c^2} = 0.22 x_0^2,$$

K – постійна спин-орбітальної взаємодії.

Оскільки

$$j^2 = l^2 + s^2 + 2(\vec{l}\vec{s}),$$

то

$$(\vec{l}\vec{s}) = \frac{1}{2}(j^2 - l^2 - s^2).$$

Підставивши вирази для j^2 , l^2 і s^2 , одержуємо

$$(\vec{l}\vec{s}) = \frac{\hbar^2}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\}.$$

$$\text{Для } j = l + \frac{1}{2}$$

$$(\vec{l}\vec{s}) = \frac{\hbar^2}{2} l,$$

$$\text{а для } j = l - \frac{1}{2}$$

$$(\vec{l}\vec{s}) = \frac{\hbar^2}{2} (l+1).$$

Тому внески в потенціальну енергію від спин-орбітальної взаємодії складають

$$Eq(A6) := \begin{cases} U_{sl} \frac{(l+1)}{2} & \text{при } j = l - \frac{1}{2}, \\ -U_{sl} \frac{l}{2} & \text{при } j = l + \frac{1}{2}. \end{cases}$$

2.13.2. В. Приведення радіального рівняння Шредінгера до одновимірного

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

Записавши лапласіан у сферичних координатах, одержуємо

$$\frac{1}{r} \frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi(r) = 0,$$

або

$$\frac{d^2 (r\psi(r))}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \psi(r) = 0.$$

Ввівши функцію

$$R(r) = r\psi(r)$$

можемо перейти до одновимірного рівняння Шредінгера

$$Eq(B1) := \frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_{eff}(r)) R(r) = 0.$$

із ефективним потенціалом, що включає й відцентровий потенціал

$$Eq(B2) := V_{eff}(r) = V(r) + V_j(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

Розв'язуючи чисельно рівняння (B.1), можна знайти рівні енергії $E(n, l, j)$ нуклонів, що залежать від трьох квантових чисел n, l, j , а також радіальну частину хвильових функцій $R(r) = \psi(r)/r$ ($\psi(0) = 0$). Рівні енергії $E(l, n, j)$ для протонів і нейтронів дещо відрізняються, причому відмінності збільшуються при зростанні енергії. Енергія станів з великими значеннями квантового числа l і $j = l + 1/2$ через спіно-орбітальну взаємодію істотно зменшується.

Нуклонні стани (протонні і нейтронні) заповнюються за принципом Паулі знизу до верху, так само як електронні стани в атомах. Густина кількості нуклонів $\rho(r)$ повністю заповнених оболонок сферично симетрична. У цьому випадку сферична оболонкова модель добре пояснює спостережувані властивості ядер, зокрема, так звані магічні числа нуклонів, що відповідають повністю заповненим оболонкам 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 (останнє тільки для нейтронів). Ядра, що мають кількість протонів і (або) кількість нейтронів, які рівні магічним, вирізняються особливою стійкістю і є сферичними. Ядра із кількістю нуклонів, близьким до магічних, також мають сферичну форму і описуються сферичною оболонковою моделлю. Магічним ядрам відповідає істотно сильніший зв'язок нуклонів з ядром. Ядра із кількістю нуклонів, далеким від магічних, мають незаповнені зовнішні оболонки. Для них прогнози сферичної оболонкової моделі можуть не узгоджуватися з експериментальними даними.

2.13.3. С. Метод скінчених різниць

Одновимірне стаціонарне рівняння Шредінгера

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

є лінійним звичайним диференціальним рівнянням другого порядку. Його необхідно розв'язати при заданих крайових умовах, які у загальному випадку часто записують у вигляді

$$\alpha_1 \psi(a) + \beta_1 \frac{d\psi(a)}{dx} = \gamma_1,$$

$$\alpha_2 \psi(b) + \beta_2 \frac{d\psi(b)}{dx} = \gamma_2.$$

Виходячи із фізичного змісту, хвильова функція повинна бути однозначною, неперервною та гладкою.

На жаль, лише небагато задач квантової механіки вдається розв'язати точно. Для розв'язку інших задач існує ряд чисельних методів, в основі яких переважно лежать різні різницеві схеми. Для побудови різницевої схеми на розрахунковий інтервал слід нанести сітку ліній, яка у одновимірному випадку також буде одновимірною. У методі скінчених різниць диференціальне рівняння замінюють різницевим на вибраній сітці з вузлами у точках x_n , замінивши похідні за формулами

$$\frac{dy(x)}{dx} = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h},$$

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = \frac{\frac{y_{n+1} - y_n}{h} - \frac{y_n - y_{n-1}}{h}}{h} = \frac{y_{n+1} - 2y_n - y_{n-1}}{h^2}.$$

де h – крок дискретизації, n – номер вузла сітки. Тоді рівняння Шредінгера набуває вигляду

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n - y_{n-1}}{h^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_n) y_n,$$

де U_n – значення потенціальної енергії у вузлах сітки, y_n – значення хвильової функції у вузлах сітки.

Перехід до безрозмірного (збезрозмірювання) рівняння Шредінгера

Для спрощення одержання чисельного розв'язку рівняння Шредінгера розглянемо засіб, дуже популярний у фізичному моделюванні, що має назву збезрозмірювання. При розв'язуванні конкретних задач використовують деяку систему одиниць (наприклад СІ), у якій не всі величини набувають числових значень, зручних для числової реалізації. Ідея збезрозмірювання полягає у переході від абсолютних значень фізичних величин (відстаней, проміжків часу, швидкостей, енергій і т.д.) до відносних, причому, відношення вибудовують до величин, типових для даної задачі.

Збезрозміримо рівняння Шредінгера, вибравши за одиниці вимірювання характерні для задачі відстані та енергії. Виберемо за характерний масштаб певну величину a , яка може бути рівною 10^{-10} м для атомних систем, чи 10^{-15} м для атомних ядер. Домноживши різницеве рівняння на a^2 прийдемо до збезрозміреного рівняння

$$-y_{n-1} + \left(2 + h^2 \frac{2ma^2 U_n}{\hbar^2} \right) y_n - y_{n+1} = h^2 \frac{2ma^2 E}{\hbar^2} y_n,$$

у якому введемо безрозмірні величини потенціальної енергії та власні значення

$$u_n = \frac{2ma^2 U_n}{\hbar^2}, \quad \varepsilon = \frac{2ma^2 E}{\hbar^2}.$$

Різницеве рівняння набуває вигляду

$$-y_{n-1} + (2 + h^2 u_n - \varepsilon)y_n - y_{n+1} = 0.$$

Останнє є системою рівнянь по усіх можливих значеннях індексу n .

$$n = 0: \quad -(2 + h^2 u_0 - \varepsilon)y_0 + y_1 = 0,$$

$$n = 1: \quad y_0 - (2 + h^2 u_1 - \varepsilon)y_1 + y_2 = 0,$$

$$n = 2: \quad y_1 - (2 + h^2 u_2 - \varepsilon)y_2 + y_3 = 0,$$

$$\dots \dots \dots$$

$$n = i: \quad y_{i-1} - (2 + h^2 u_i - \varepsilon)y_i + y_{i+1} = 0,$$

$$\dots \dots \dots$$

$$n = N: \quad y_{N-1} - (2 + h^2 u_N - \varepsilon)y_N = 0.$$

Або у векторному вигляді

$$\hat{H}\vec{y} = \varepsilon\vec{y},$$

де

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -(2 + h^2 u_0) & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \dots \\ 1 & -(2 + h^2 u_1) & 1 & 0 & 0 & 0 \dots \\ 0 & 1 & -(2 + h^2 u_2) & 1 & 0 & 0 \dots \\ \dots \dots \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -(2 + h^2 u_i) & 1 & 0 \dots \\ \dots \dots \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -(2 + h^2 u_N) \dots \end{pmatrix},$$

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ y_i \\ \cdot \\ y_N \end{pmatrix}, \quad \varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \varepsilon & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \varepsilon \end{pmatrix}.$$

Граничні умови для сферично-симетричної задачі

Для прямокутної потенціальної ями граничні умови задають на межі ями, наприклад

$$\psi(x)|_{x=0} = \psi(x)|_{x=a} = 0.$$

Для сферично-симетричної ями граничні умови для функції $R(r) = r\psi(r)$ вибирають такими

$$R(r)|_{r \rightarrow 0} = 0,$$

$$R(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0.$$

З метою чисельної реалізації вибрано граничні умови, у яких верхня межа замінена із нескінченної на скінчену, але велику $[0, \infty] \rightarrow [0, 10] \rightarrow [0, 20]$

і шляхом порівняння зроблено висновок про можливість використання цього наближення.

2.13.4. D. Реалізація чисельного розрахунку ядерних оболонок

Для чисельної реалізації застосовано десятикрокову процедуру для атома ${}^{16}_8\text{O}$ із точністю розрахунків зі збереженням десяти знаків після коми. Інші необхідні для розрахунків дані записані у Maple-програмі.

> N:=10;

$N := 10$

> #1:=0; Z:=8;

$Z := 8$

> A:=16;

$A := 16$

> r0:=1.3;

$r0 := 1.3$

> a:=0.7;

$a := 0.7$

> V0:=60;

$V0 := 60$

> K:=30;

$K := 30$

> x0:=10⁽⁻¹⁵⁾;

$x0 := \frac{1}{1000000000000000}$

> R:=r0*A^(1/3);

$R := 1.3 \cdot 16^{(1/3)}$

> ra:=0; rb:=10;

$ra := 0$

$rb := 10$

> s:=((rb-ra)/N);

$s := 1$

> $V := (r) \rightarrow -V0 / (1 + \exp((r-R)/a));$

$$V := r \rightarrow -\frac{V0}{1 + e^{\left(\frac{r-R}{a}\right)}}$$

> $dV(r) := \text{diff}(V(r), r);$

$$dV(r) := \frac{85.71428574 e^{1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right)}}{\left(1 + e^{(1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right))}\right)^2}$$

> $Vj1(r) := (1/r) * dV(r) * 0.022 * x0 * K * (l+1) / 2;$

$$Vj1(r) := \frac{0.2828571429 \cdot 10^{-13} e^{1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right)} (l+1)}{r \left(1 + e^{(1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right))}\right)^2}$$

> $Vj2(r) := (1/r) * dV(r) * 0.022 * x0 * K * l / 2;$

$$Vj2(r) := \frac{0.2828571429 \cdot 10^{-13} e^{1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right)} l}{r \left(1 + e^{(1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right))}\right)^2}$$

> $Vef(r) := V(r) + Vj2(r) + h * l * (l+1) / (2 * m * r^2);$

$$Vef(r) := -\frac{60}{1 + e^{(1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right))}} + \frac{0.2828571429 \cdot 10^{-13} e^{1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right)} l}{r \left(1 + e^{(1.428571429 - 1.85714228586 \left(\frac{1}{3}\right))}\right)^2} + \frac{hl(l+1)}{2mr^2}$$

> $m := 1.67 * 10^{(-27)};$

$$m := 0.1670000000 \cdot 10^{-26}$$

> $h := 1.055 * 10^{(-34)};$

$$h := 0.105500000010^{-33}$$

> $d := 1.6 * 10^{(-13)};$

$$m := 0.1600000000 \cdot 10^{-12}$$

```
> g:=2*m*d*x0^2/h^2;
```

$$g := 0.04801329710$$

```
> C:=Matrix(1..N,1..N);
```

$$C := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

```
> for i to N do   for j to N do
```

```
  C[i,j]:=0 od od;
```

```
> for i to N-1 do   for j to N-1 do
```

```
  C[i,i+1]:=-1 od od;
```

```
> for i to N-1 do   for j to N-2 do
```

```
  C[i+1,i]:=-1 od od;
```

```
> for i to N do   for j to N do
```

```
  C[i,i]:=evalf(2+g*V(s*i)*s*s)
```

```
od od;
```

```
> print(C);
```

$$\begin{bmatrix} -0.773384076 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -0.480002480 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0.279462411 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1.244662469 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1.773908678 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1.942378482 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1.985977686 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1.996627055 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1.999190950 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1.999806069 \end{bmatrix}$$

```
> with(Student[LinearAlgebra]):
```

```
> SS:=evalf(Eigenvalues(C));
```


$$SS := \begin{bmatrix} -1.906831097 \\ -0.6182843839 \\ 0.09404890488 \\ 0.4015263770 \\ 0.8467877471 \\ 1.376239613 \\ 1.996610708 \\ 3.800443846 \\ 2.669671282 \\ 3.308414215 \end{bmatrix}$$

> **SZ:=Eigenvectors(C);**

$$SZ := \begin{bmatrix} -1.906831097 \\ -0.6182843839 \\ 0.09404890488 \\ 0.4015263770 \\ 0.8467877471 \\ 1.376239613 \\ 1.996610708 \\ 3.800443846 \\ 2.669671282 \\ 3.308414215 \end{bmatrix}$$

Визначення енергії рівнів у MeV

Оскільки безрозмірна енергія визначається за співвідношенням

$$\varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2} a_0,$$

то

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma_0} \varepsilon.$$

Підставивши числові значення, одержуємо

$$E \approx 20 \cdot e \quad (\text{MeV}).$$

Коефіцієнт при ε набуває значення (20,6 ÷ 20,9) MeV, залежно від кількості знаків, врахованих у сталих.

Література

- [1]. Дьяконов В.П. MAPLE 7 Учебный курс. – СПб: Питер, 2002. – 672 с.
- [2]. Дьяконов В.П. MAPLE 8 в математике, физике и образовании. – М.: СОЛОН_Пресс, 2003. – 656 с.
- [3]. Аладьев В.З. Эффективная работа в MAPLE 6/7. – М.: ЛБЗ, 2002. – 334 с.
- [4]. Аладьев В.З., Лиопо В.А., Никитин А.В. Математический пакет MAPLE в физическом моделировании. – Гродно: ГрГУ, 2002. – 418 с.
- [5]. Голоскоков Д.П. Уравнения математической физики. Решение задач в системе MAPLE. – СПб.: Питер, 2004. – 539 с.
- [6]. Матросов А.В. MAPLE 6. Решение задач высшей математики и механики. – СПб.: BHV, 2001. – 528.
- [7]. Flügge S. Practical quantum mechanics. Reprint of the 1994 Edition. Springer-Verlag Berlin. 2015.
- [8]. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. – Л.: Наука, 1975. – 440 с.
- [9]. Запрягаев С.А., Копытин И.В. Введение в алгебру угловых моментов. – Воронеж: Издательство Воронежского университета, 1980. – 124 с.
- [10]. Копытин И.В., Корнев А.С. Введение в алгебру угловых моментов. Учебное пособие. – Воронеж: Воронежский университет, 2005. – 111 с.
- [11]. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. – М.: Наука, 1973. Т.1. Гл. 5; 1974. Т.2. Гл. 10.
- [12]. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Т.3. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989. – 767 с.
- [13]. Овсянников В.Д., Чернушкин В.В. Радиационные свойства диамагнитных уровней в атомах: зависимость вероятности переходов от напряженности магнитного поля // ЖЭТФ. – 1999. – Т. 116, вып. 3(9). – С. 1161–183.
- [14]. Ovsiannikov V.D., Goossev S.V. Diamagnetic shift and splitting of Rydberg levels in atoms // Physica Scripta. – 1998. – V. 57, № 4. – P. 506.
- [15]. Monagan M. B., Geddes K. O., Heal K. M., Labahn G., Vorkoetter S. M., McCarron J., DeMarco P. Maple Advanced Programming Guide Maplesoft (15 version), a division of Waterloo Maple Inc. – 2009. – 452 p.
- [16]. L. Bernardin, P. Chin, P. DeMarco, K. O. Geddes, D. E. G. Hare, K. M. Heal, G. Labahn, J. P. May, J. McCarron, M. B. Monagan, D. Ohashi, S. M. Vorkoetter. Maple Programming Guide (Version 18), Maplesoft, a division of Waterloo Maple Inc. – 2014. – 664 p.
- [17]. Ogilvie J.F. Mathematics for Chemistry with Symbolic Computation (fifteen Maple worksheets). 2016 June 30. 51 p.

Електронні ресурси

- [18]. Чернушкин В.В.
http://tchernouchkine.narod.ru/maple/docums/maple_tchern_web.pdf

- [19]. Griffiths David. Introduction to Quantum Mechanics.
<http://physicspages.com/Griffiths%20QM.html>
- [20]. Griffiths D.
<http://www.sussex.ac.uk/Units/physics/teaching/cce/QMI.htm>
- [21]. www.tchernouchkine.narod.ru/maple/programs/anglemoment.m.
- [22]. Maple Physics: Research and Development. Maple 18. Official web sources.
<http://www.maplesoft.com/products/maple/features/physicsresearch.aspx>

Навчальне видання

**Орест Михайлович Возняк,
Володимир Васильович Прокопів,
Любомир Іванович Никируй**

**ВИКОРИСТАННЯ СЕРЕДОВИЩА MAPLE
ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ**

Навчальний посібник

Комп'ютерний набір
Дизайнер

Дейчаківський М.В.,
Туровська Л.В.

Підписано до друку 27.04.2018 р.
Формат 60x84/16. Гарнітура «Times New Roman».
Умов. друк. арк. 10,75. Наклад 100.

Видавець
ДВНЗ «Прикарпатський національний університет
імені Василя Стефаника»,
вул. С. Бандери, 1, м. Івано-Франківськ, 76000.
Тел. (0342) 71-56-22.
E-mail: vdvcit@pu.if.ua

*Свідоцтво суб'єкта видавничої справи
ДК №2718 від 12.12.2006.*

Друк: підприємець Голіней О.М.
76008 м. Івано-Франківськ, вул. Галицька, 128
Тел. +38 (0342) 58-04-32, +38 050 540 30 64
E-mail: gsm1502@ukr.net