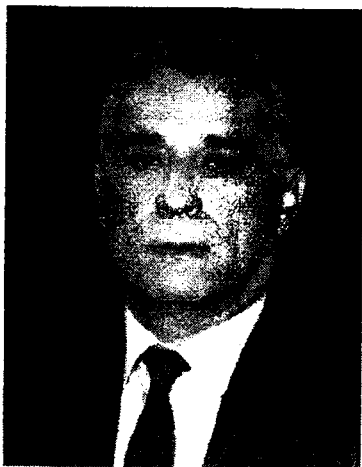


Faik Sultanmuradoğlu Sadıxov (1935)



Bakı Dövlət Universitetini fərqlənmə diplomu ilə və Moskva Universitetinin aspiranturasını (1961) bitirmişdir. 1965-1971-ci illərdə Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnstitutunda (Dubna) və Roma Universitetində elmi işlər aparmışdır. 1973-cü ildə "Yüksək enerjili lepton və hadronların elektromaqnit qarşılıqlı təsirlərinin tədqiqi" adlı doktorluq dissertasiyası müdafiə edib, fizika-riyaziyyat elmləri doktoru dərəcəsi almış və 1974-cü ildən Bakı Universitetinin professorudur. 1973-80-cı illərdə Universitetin Fizika fakültəsinin dekanı və elmi şurasının sədri olmuşdur. 1992-98-ci illərdə Türkiyədə Qaradəniz Texniki (Trabzon) və Erciyes Universitetlərində (Kayseri) aparıcı professor vəzifəsində fəaliyyət göstərmişdir. Onun rəhbərliyi ilə 6 nəfər elmlər namizədi adı almışdır. Sadıxov 100-dən çox elmi məqalənin müəllifidir. Aldığı elmi nəticələr yüksək enerjilərə aid dünya laboratoriyalarında öz təcrübi təsdiqini tapmışdır. Onun elmi nəticələri Amerikada nəşr olunan "Methods of experimental Physics vol. V. Nuclear Physics", New-York, 1960 və "Voprosı estetisznaniya" Moskva, 1961 kitablarına daxil edilmişdi. O, "Kvant mexanikası (məsələrdə)" Bakı, 1992, "Problemlerle kvant mexanigi" Trabzon, 1996 və "Leptonlar və Hadronlar", Bakı, 2001 kitablarının müəllifidir.

*Nəvələrım Qənirə və
Zehraya həsr etdim.*

Faik Sultanmuradoğlu
(Sadıxov)

Kvant mexanikası kursu

(İki cildlik)

Bakı Dövlət Universitetinin
Fizika fakultəsinin
təqdimatı ilə çap olunur.

Bakı 2002

+ 530
C 92

Kitaba rəy verənlər:
Akademik F.M.Həşimzadə
AzMİ Universitetinin Fizika kafedrası

İxtisas redaktoru:
Fizika-riyaziyyat elmləri doktoru Ş.M.Nağıyev

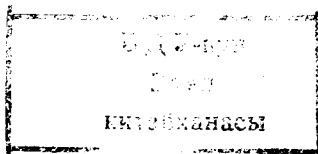
Faik Sultanmuradoğlu «Kvant mexanikası kursu». Bakı,
"İsmayıl" Nəşriyyat Poliqrafiya Müəssisəsi. 2002-ci il. 296 səh.

Ölçüsü: 60x84 1/16

Tiraj: 1000 nüsxə (I buraxılış – 300 nüsxə)

«Patronat-S» şirkətində tərtib edilmiş
və çap olunmuşdur.

C 1704020000 2002
125



Lisenziya AB 022062

© Faik Sultanmuradoğlu

Ön söz

Çağdaş fizikanın əsasında kvant mexanikası durur. Uzun illər Bakı Dövlət, Roma, Türkiyənin Qaradəniz Texniki və Erciyes Universitetlərində verdiyim “Kvant mexanikası” və “Yüksək enerjilər” fizikasına aid dərslərin, həmçinin tələbələrlə bu sahədə məsələlər həll edərkən meydana çıxan çətinliklərin aradan qaldırılmasının nəticələri bu kitabın yazılmasına səbəb oldu. Kitab iki cild olaraq tərtib olunmuşdu. Birinci cild qeyrielyativistik kvant mexanikası və onun bir çox problemlərinin izahında istifadə olunmasına, ikinci cild isə relyativistik kvant mexanikası problemlərinə həsr olunmuşdur.

Birinci cild I-V fəsildən ibarətdir. I fəsil kvant mexanikasının yaranmasına səbəb olan təcrübi faktlar, dalğa funksiyasının xassələri, dinamik dəyişənlərin operatorlarla təmsil olunması, fəza kordinatorlarının, impuls, hərəkət miqdarı momenti, enerji operatorlarının aşkar şəklinin alınması, bu operatorların məxsusi funksiyaları və məxsusi qiymətləri, bəzi fiziki kəmiyyətlər üçün qeyrimüəyyənlik münasibətlərinin alınması, onların nəticələri, kvant mexanikasının hərəkət tənlikləri, onlardan klassik mexanikaya keçid, kəsilməz və diskret spektrə sahib olan halların alınması ətraflı şərh olunmuşdur.

II fəsildə zərrəciyin potensial qutuda hərəkəti, Şrödinger tənliyinin harmonik osilyatora tətbiqi, mərkəzi sahədə hərəkət, maqnit sahəsində hərəkət, hidrogen atomunun enerji səviyyələrinin alınması, bivalentli atomların davranışı, onların maqnit momentlərinin alınması ətraflı incələnməmişdir.

Fəsil III. Dalğa funksiyası və operatorların təmsil nəzəriyyəsinə görə müxtəlif təmsillərdə yazılışı, unitar çevirmələr və zamana görə dəyişməni əks etdirən unitar çevirmələr, sistemin halının sıxlıq

matrisi ilə xarakterizə olunması, matris kvant mexanikasına giriş kimi mövzular araşdırılmışdır.

IV fəsildə kvant mexanikasında istifadə olunan təqribi metodlardan , varyasiya metodu, kvaziklassik yaxınlaşma üsulu və həyacanlaşma nəzəriyyəsinin əsasları, onların stasionar və stasionar olmayan hallarda tətbiq olunması təfəsilatı ilə müzakirə olunmuşdur.

V fəsil isə həyacanlaşma nəzəriyyəsinin tətbiqlərinə həsr olunmuşdur. Burada anharmonik osilyatorun enerjisi və məxsusi funksiyası, xarici elektrik sahəsində atomların enerji səviyyələrinin parçalanması, xətti və qeyri xətti Stark effekti, rotatorun xarici elektrik sahəsində enerjisinin dəyişilməsi, elektronun spin momentinin meydana gəlməsi və spin funksiyalarının xassələri, simmetik, antisimmetriklilik şərtləri, helium atomunun nəzəriyyəsi, para və ortohelium halları, onların enerji dəyərlərinin müəyyən edilməsinə həsr olunmuşdur. Buradaca elementlərin periodik sisteminin əsəlandırılması göstərilmişdi. Bu fəsildə təfəsilatı ilə dipol və muldipol şüalanmanın kvant nəzəriyyəsi incələnməmişdir. Dipol, maqnit dipol və kvadrupel momentlərin hesabına olan keçid ehtimalları tapılmışdır.

Kvant mexanikasına əsasən homopolyar və heteropolyar molekulların yaranma səbəbləri aydınlaşdırılmışdır. İki atomun molekul yaratmasında sinqlet və triplet halların olmasının rolu müəyyən edilmişdir.

Həyacanlaşma nəzəriyyəsinin bariz tətbiqi olaraq işığın koherent səpilməsi, yəni işığın dispersiyası hadisəsi araşdırılmışdı. Kvant mexanikasında iki növ müsbət normal və anomal dispersiya, həm də mənfi normal və anomal dispersiyanın varlığı göstərilmiş və onun təcrübədə təsdiq olunması qeyd edilmişdir. Burada həmçinin koherent olmayan Raman effekti adlanan kombinasiyon səpilmə hadisəsi də öyrənilmişdir. İşığın səpilməsi nəticəsində, səpilmədən sonra müxtəlif tezliklərin kombinasiyası yaranır. Bu səpilmədən istifadə edərək molekulların quruluşunu öyrənmək olur.

Xarici maqnit sahəsində atomların enerji səviyyələrinin dəyişilməsində bu fəsildə öyrənilmişdir. Xarici maqnit sahəsinin qiy-

mətindən asılı olaraq enerji səviyyələrinin mürəkkəb şəkildə parçalanması, Zeeyman effekti müfəssəl izah olunmuşdu. Onun normal, anomal qisimlərinin varlığı əsaslandırılmışdır.

İkinci cild VI-VIII fəsildən ibarətdir. VI fəsildə qrup nəzəriyyəsinin anlayışları, onların kvant mexanikasında istifadə olunması, matris mexanikasına görə bəzi kvant kəmiyyətlərinin qiyməti müəyyən edilmişdir. Burada yüksək enerjilər fizikasında geniş tətbiq olunan bəzi saxlanan kəmiyyətlərin xassələri araşdırılmışdır. Həmçinin Lorentz və Puankare qruplarına giriş verilmişdir.

VII fəsilin mövzuları Kleyn-Gerdon, Dirak tənliklərinin əsasları, burada istifadə olunan matrislər, onların xassələri, tam hərəkət miqdarı momenti, onun məxsusi funksiyası incilənmişdi. Burada Dirak tənliyinin sərbəst zərrəcik üçün həlli, bu həllin dörd hala uyğun gəlməsi göstərmiş, spinin və enerjinin iki qiymətinin-mənfi və müsbət halda olması göstərilmişdi. Eyni zamanda hidrogenəbənzər atomlarda relyativistik effektlər arasdırılmışdır.

Güclü maqnit sahəsinin atomun eneryisinin dəyişilməsinə etki göstərməsi VIII fəsildə öyrənilmişdi. Spin orbital təsirin maqnit momentləri ilə bağlılığı əldə edilmişdir. S-səviyyəsinin parçalanmasının təcrübədəki qiymətə uyğun gəlməsi müəyyən olunmuşdur. Burada həmçinin Dirak matrislərinin cəbri, fermionların sıxlıq matrisləri öz şərhini tapmışdır.

Bu fəsildə neytrino adlı, sükunət kütləsi sıfıra yaxın olan, polyarizə olunmuş zərrəciyin sıxlıq matrisi araşdırılmışdı. Burada həmçinin səpilmə matrisi və səpilmə amplitudu, Born yaxınlaşmasında amplitudun araşdırılması, həyəcanlaşma nəzəriyyəsində Feynman diaqramlarından istifadə edərək Compton effektinin kəsiyi incələnməmişdir.

Elektronların xarici sahədə səpilməsi və onların hadronlardan elastiki, həmçinin, dərin qeyrielastic səpilmə prosesinin effektiv kəsiyi müəyyən edilmişdi, Proton-neutronların xassələri tapılmış və onların maqnit momentləri əldə edilmişdir.

Həmçinin elementar zərrəciklər fizikasının müasir anlayışları, kvarkların hadron fizikasında rolu müəyyənləşdirilmişdir.

VIII fəsilin sonunda isə ikinci kvantlanma nəzəriyyəsinin əsas müddəaları verilmişdir. Kitabın sonunda isə fəsillərə aid çalışmalar və onların həlləri verilmişdir.

Zənn edirəm ki, bu kitab çağdaş fizikanın bir çox problemlərinin araşdırılmasında və onların yaxşı anlaşılmasında öz səmərəli faydasını göstərəcəkdir.

Kitabın yazılmasında yaxından iştirak edən və faydalı məsləhətlər verən həmkarlarıma səmimi təşəkkürümü öncədən bildirməyi özümə borc sanıram.

Prof.Faik Sultanmuradoğlu Sadıxov
Bakı 2002 il.

Ədəbiyyat

1. L.İ.Shiff, Kvant mexanikası, McGraw-Hill Book Company inc. New York. 1955
2. D.I.Blochinzev, Osnovi kvantovoy mexaniki , Vissaya Şkola, Moskva, 1961
3. A.A.Sokolov, İ.M.Ternov, Y.M.Loskutov, Kvantovaya Mexanika, İzd.Mir.P.Mos. 1962
4. Albert Messian, Quantum Mechanics, North-Holland, Amsterdam, 1962, I,II tom
5. A.S.Davidov, Quantim Mechanics, Fizmatriz, Moskva, 1963
6. İ.D.Bjorken, S.D.Drell, Relativistik Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Comany, New York, 1964
7. L.D.Landan, E.M.Lifschiz, Kvantovaya Mexanika, Nauka, Moskva, 1965
8. P.A.Dirak, Quantum Mechanics, 4th ed Oxford University Press, London, 1967
9. L.D.Landau, E.M.Lifchiz, Teoreticeskaya Fizika, t.İV, Nauka, Moskva, 1968
10. S.Flügge, Practical Quantum Mechanics, İ.İİ, Spriger-Verlag, New York. 1971
11. F.S.Sadıxov, Kvant mexanikası (məsələlər), Bakı Universiteti, Bakı, 1992
12. F.S.Sultanmuradoğlu, Problemlərlə Kuantum Mekanigi, (türkcə) Trabzon 1996
13. E.P.Wigner, Teoriya qrup və onun kvant mexanikasında tətbiqi, Moskva, 1961
14. Harry Hochadt, The Functions of matematical Physics, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968
15. Georye Arfken, Mathematical methods for Physiciits, Wiley, New York. 1973

I fəsil

Kvant mexanikası və onun riyazi əsasları

§1. Kvant mexanikasının yaranmasına səbəb olan hadisələr

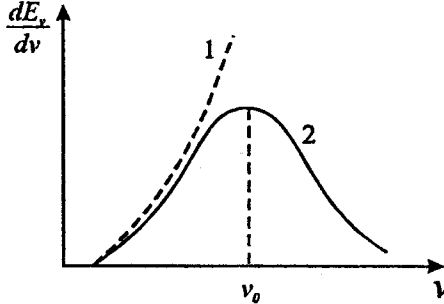
Nüyuton mexanikası, elastiklik nəzəriyyəsi, aerodinamika, termodinamika və elektrodinamika klassik fizika adlanan fizikanın tərkib hissələridir. Klassik fizika makroskopik cisimlərin təməli çoxlu sayda atomlar sistemlərində baş verən hadisəli araşdıran sahədir. Klassik fizikanın bütün bölmələrində olan kəsslər XX yüzilin başlanğıcında öz izahını tapmaq üzrə idi. Demək olar ki, bir neçə fiziki hadsə var idi ki, onların da fiziki əsasını vermək lazım idi. Belə hadisələr olaraq, istilik şüalanması, bərk cisimlərin xüsusi istilik tutumu, atomların xətti spektrə malik olması, elektronların difraksiyası, fotoeffekt, Frank-Herst təcrübəsi, Stern-Herlah hadisələri kimi fiziki hadisələri göstərmək olar. 1925-ci ildən sonralar bir çox başqa fiziki hadisələrdə müşahidə olunmuşdur ki, onlar da klassik fizikanın qanunlarına görə izah olunmalı idi. Lakin bu hadisələrin heç biri klassik fizika qanunlarına görə tamamilə doğru-dürüst izahını tapa bilməmişdir. Bu hadisələri sadalandırmağa keçəyin.

a) İstilik şüalanması. Qızdırılmış cisimlər elektromaqnit şüaları buraxırlar və kifayət qədər yüksək temperaturalarda şüalanmanın bir qismi gözlə görünən işıq şəklində müşahidə olunur. Şüalanmanın intensiliyi və enerjinin müxtəlif tezlikli dalğalara görə paylanması (spektral paylanma) şüalanan cisimin temperaturunun və cisimin materialından asılıdır. Qara cisimin şüalanması isə maddələrin materialının xassələrindən demək olar ki, asılı olmur. Üzərinə düşən işıq tamamilə udan cisimə mütləq qara cisim deyilir. Belə qara cisimlərin şüalanması yalnız cisimin temperaturundan asılı olub,

onun materialından asılı deyil. Şüalanmanın tezliyə görə enerji paylanması qanunu

$$dE_{\nu}(T) = \frac{8\pi V}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \nu^2 d\nu \quad (1.1)$$

əldə edilmişdi. Bu qanunauyğunluq yalnız enerji mübadiləsinin kvantlarla (porsiyalarla) olması ilə izah olunur. Spektral paylanmanı şəkil -də olan kimi göstərmək olar.



Şəkil 1.1. Bəlli temperaturda spektral paylanma.

Şəkil 1.1-də qırıq-qırıq əyri Reley-Cins qanununu, bütöv xətt isə təcrübənin nətcəsidir. Xüsusi halda

$$dE_{\nu}(T) = \frac{8\pi V}{c^3} K \nu^2 T d\nu \quad (1.2)$$

olur.

burada $V=abc$ kubun həcmidi, K -Bolsman sabii, T -mütləq temperaturdur, c -ışığı sürətidi. Şüalanmanın tam enerjisi

$$E(T) = aT^4 \nu \quad (a\text{-sabitdir}) \quad (1.3)$$

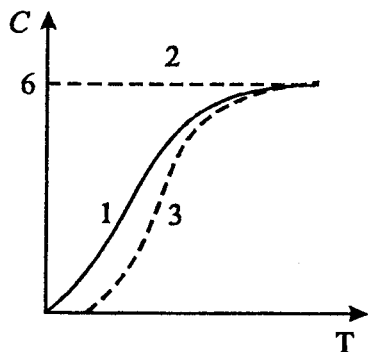
Buna da Stefan-Bolsman qanunu deyilir.

b) Bərk cismin xüsusi istilik tutumu. Molekulyar fizikadan bəllidir ki, bərk cismin xüsusi istilik tutumu

$$C = \frac{dE}{dT} = 3R = 5,958 \text{ kal.dr}^{-1} \quad (1.4)$$

qiymətini alır. Buna Düyling-Piti qanunu deyilir. Burada R ($R = 1,99 \text{ kal.dr}^{-1}$) universal qaz sabitidi. Təcrübə göstərir ki, xüsusi is-

tilik tutumunun temperaturdan asılılığı şəkil 1.2 də göstərilən kimidir.



Səkil 1.2. Bərk cisimin xüsusi istilik tutumunun temperaturdan asılılığı.

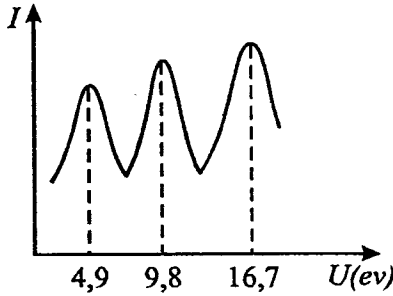
Şəkil 1.2-də birinci əyri təcrüdən alınan, 2-ci əyri Düylonq-Piti qanunundan, 3-cü əyri isə Eynşteyin düsturuna görə olan nəticələrdi. İstilik tutumu Eynşteyinə görə

$$C = 3R \left(\frac{T_0}{T} \right)^2 e^{\frac{T_0}{T}} \quad (1.5)$$

şəklində təyin olunur. Burada $T_0 = \frac{h\nu}{K}$ dır.

c) **Atomun xətti spektri.** Təcrüb faktlara görə maddəni qızdırdıqda və ya hər hansı bir yolla həyəcanlaşdırdıqda maddənin qaz halındakı atomları xətti spektre malik olur. Özüdə buraxılan işıqda yalnız müəyyən tezlikli elektromaqnit dalğalar mövcud olur. Əgər hər bir atomun spektrində ν_1 və ν_2 tezlikli xətlər varsa, spektrdə $\nu_1 + \nu_2$ və $|\nu_1 - \nu_2|$ tezlikli xətlərdə mövcuddur. Bu qanunauyğunluq Ritsin kombinasiya prinsipi adlanır. Bu prinsipdən alınır ki, iki tezliyin cəmi (və ya fərqi) varsa, bu spektrdə onların cəmi və ya fərqinə uyğun olan xətlərdə müşahidə olunur. Bunu sübut etmək üçün Fank-Herts təcrübəsində közərdilmiş katod ilə anod arasındakı potensial fərqi civə buxarı üçün müəyyən qiymətlər alır və bu qiymətlər 4,9V, 9,8V; 16,7V və s. olur. Təcrübə göstərir ki, katod

ilə anod arasındakı voltamper xarakteristikası aşağıdakı kimidir (Şəkil 1.3).



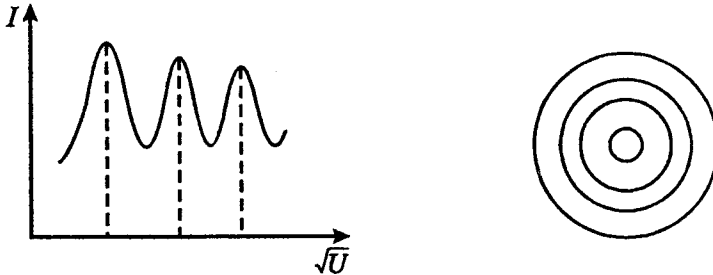
Şəkil 1.3. Frank-Herts təcrübəsinin nəticəsi.

e) Elektronların difraksiyası. Kristal, atom və ya ion qrupunun müəyyən qanunauyğunluqla fəza qəfəsinin düyüm nöqtələrində yerləşməsi deməkdir. Bura düşən elektron dalğası bu cürə düyümlərini yeni dalğa mənbəyinə çevirir və ekranda bu dalğalar üçün mə'lum

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad n=1,2,3,\dots$$

düsturu ilə təyin olunan difraksiya mənzərəsi alınır.

Burada n - difraksiya maksimumlarının dərəcəsi, λ -şüanın dalğa uzunluğu, d - difraksiya qəfəsinin sabiti, θ - qəfəsin normalı ilə səpilən şüa arasındakı bucaqdır. Difraksiya hadisəsinin aşağıdakı şəkillərdə göstərilən kimi müşahidə olunmuşdur.



Şəkil 1.4. Elektronların difraksiyası. Gümüş incə lövhədə elektron şüasının difraksiyası.

Buradan da $E = \hbar \nu$ enerjiyə, $\vec{P} = \hbar \vec{k}$ impulsa malik olan elektronun de Broyl dalğası olmasını sübut edilmişdi.

d) Fotoeffekt. Metal səthinə düşən işıq metaldan elektron çıxarır və bunun nəticəsində dövredə cərəyan alınır. Bəlli tezlikli işıq eyni enerjiyə malik olan elektronları metaldan çıxarır. Əgər işığın intensivliyini artırmış olarıqsa, çıxan elektronların kinetik enerjiləri dəyişməz qalır, lakin onların sayı artır. Elektronların enerjisi isə düşən işığın tezliyi böyüdükcə artmış olur. Düşən işığın enerjisi

$$h\nu = \frac{mv^2}{2} + A$$

tənliyi ilə ifadə olunur. Burada h – Plank sabiti, A - elektronun metaldan çıxış işidir. Fotoeffekt hadisəsinin fiziki əsaslarını tapmaq lazımdır.

h) Stern-Herlax təcrübəsi. Gümüş atomunun spektrinin maqnit sahəsində iki dəstəyə ayrılması müşahidə olunmuşdu. Bu hadisə fəza kvantlanması olduğunu göstərir. Yəni, fəza kvantlanması da gümüş atomların dəstəsi iki dəstəyə parçalanır. Deməli, xarici maqnit sahəsində atom dəstəsinin parçalanması fəza kvantlanması na sübutdur.

Bütün söylənilən hadisələr fiziki kəmiyyətlərin həmişə kəsilməz qiymətlər deyil, bir çox halda kəsitli, diskret qiymətlər də almasına sübutdur. Fiziki kəmiyyətlərin diskret qiymət alması bu kəmiyyətlərin kvantlanması deməkdir. Yəni, təbiətdə elə qanunlar var ki, onlar kvant xarakterlidir. Bu qanunauyğunluğu açıqlamaq kvant fizikasının əsas problemlərindəndir ki, onun da təməlində kvant mexanikası durur.

§2. Kvant halının dalğa funksiyası ilə xarakterizə olunması prinsipi

Kvant mexanikasında hər hansı bir hal, fiziki hal olaraq, bir dalğa funksiya ilə xarakterizə olunur. Sistemin halını xarakterizə etmək üçün dalğa funksiyası

- arqumentə görə kəsilməz,
- arqumentin bir qiymətinə bir funksiyanın uyğun gəlməsi, yəni bir qiymətli funksiyanın uyğun gəlməsi,
- arqumentin bütün qiymətlərində sonlu,
- kvadratik inteqrallanan, yəni

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dV < \infty \quad \text{olmalıdır.} \quad (2.1)$$

Bu şərtləri ödəyən ixtiyari funksiya, dalğa funksiyası və ya hal vektoru adlanır. Bu funksiya ψ ilə və ya $|a\rangle$ ilə işarə olunur. ψ funksiya ilə sonsuz sayda olub, kompleks də ola bilərlər. (2.1) şərtlərini ödəyən sonsuz sayda həqiqi və kompleks funksiyalar çoxluğuna Hilbert fəzası, ψ -lər isə Hilbert fəzasının vektorları adlanır. Dolayısı ilə, dalğa funksiyaları hal vektoru olub, Hilbert fəzasını ulaşıdırırlar. Dalğa funksiyası hər hansı bir dinamik dəyişənin və ya radius vektorunun funksiyası ola bilər.

Götürülmüş həcm elemanında zərrəciklərin sayının, ayrı-ayrı zərrəciklərin həmin həcmdə olma ehtimalının hasilinə bərabər olması bəllidir. Ona görə $\psi(\vec{r})$ funksiyasının kvadratı $\psi^2(\vec{r})$ ehtimal sıxlığına mütənاسبdir. ψ -funksiya ümumi şəkildə kompleksdə olduğu üçün, ehtimal sıxlığı həqiqi kəmiyyət (real) olduğuna görə

$$|\psi|^2 dV = \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) dx dy dz \quad (2.2)$$

ifadəsi zərrəciyin dV - həcmində olma ehtimalına müvafiq olur. Beləliklə, (2.2) ifadəsi zərrəciyin \vec{r} - nöqtəsində olma ehtimalının sıxlığıdır. Bu cürə göstərilən dalğa funksiyası fiziki məna kəsb etməz və ψ -yə fəzada olan bir dalğa kimi baxmaq olmaz. Bu funksiya ilə fəzanın hər hansı bir nöqtəsində olma ehtimalını, yaxud bu və ya hər hansı başqa bir fiziki dəyişənin bu və ya başqa qiymət alma ehtimalını araşdırmaq olar.

Kvant mexanikasının əsas müddəası olaraq, zərrəciyin hərəkətinin ehtimallı xarakterdə olması təməl şərtlərdən biri kimi qəbul olunur. Bu xüsusiyyət zərrəciklərin sayının çox olmasına bağlı olmayıb, yalnız tək bir zərrəciyin halının ehtimallı olaraq müəyyən olunmasını təyin edir. Zərrəciyin dV -həcmində olma ehtimalı $\psi^*\psi dV$ olduqda və bu vahidə normallaşmış olursa, onda 100% ehtimalla zərrəcik V -həcmində olar. Ümumiyyətlə, inteqrallama bütün fəza üzrə olduğu üçün inteqrallama sərhəddini $-\infty$ dan $+\infty$ -a qədər götürmək lazımdır, yəni

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi dV = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx dy dz = 1 \quad (2.4)$$

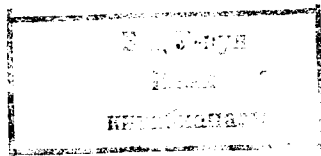
olub, bütün fəza üzrə inteqralamayı göstərir. (2.4) ifadəsi dalğa funksiyasının normallama şərtidir. Bu şərtə görə potensial enerji müəyyən sıçrayışa uğrasa belə və ya potensial enerji sonsuz olarsa, dalğa funksiyası və onun törəməsi kəsilməz olur və ya sifıra yaxınlaşır.

Qeyd etmişdik ki, kvant mexanikası zərrəciyin davranışını yalnız ehtimal anlamında öyrənilir. Bu ehtimallıq zərrəciyin miqdarının çox olmasına bağlı deyil. Klassik fizikadakı da statistik anlamda çoxlu zərrəciklər sistemi ehtimallı davranış da olur. Lakin kvant mexanikasındakı statistik qanunauyğunluq klassik fizikadakı statistik anlayışdan fərqlidir. Statistik qanunauyğunluq çoxlu sayda zərrəciklərin qarşılıqlı təsiri nəticəsində yaranır və zərrəciyin hər birinin davranışı klassik mexanikanın dinamik qanunları ilə təsvir olunur. Zərrəciklərin sayı azaldıqca klassik statistik qanunauyğunluğun rolu azalır, zərrəcik sayı kifayət qədər az olduqda isə, klassik statistik qanunauyğunluq öz mənasını itirir. Məsələn, temperatura az sayda zərrəciklər üçün (və ya zərrəcik üçün) öz anlamını itirir. Kvant mexanikasında statistik qanunauyğunluq, zərrəciyin daxili xassələrinin meydana çıxması olur və onların sayı bir dənə olanda belə biruzə çıxır. Zərrəciyin həm korpusklyar və həm də dalğa xassəsinə malik olması, onun üçün klassik fizika metodlarından və anlayışlarından istifadə etmək imkanı vermir. Bundan ötəri zərrəciyin xassələrini öyrənmək üçün yeni üsullardan, yeni təmsillərdən istifadə etmək lazım gəlir.

Mikrozərrəciklərin hərəkət qanunauyğunluqlarını tapmaqdan ötrü, onların meydana gəlmə səbəblərini və idarə olunma qanunauyğunluqlarını təyin etmək üçün yeni mexanikadan istifadə olunmalıdır. Bu məsələlərlə kvant mexanikası məşğul olur.

Kvant mexanikasında sistemin iki müxtəlif haldan, yeni bir halın alınması tamamilə başqa qanunauyğunluğa tabe olur. Buna görə kvant mexanikasının əsası olaraq, superpozisiya prinsipi qəbul olunur. Bu prinsipə görə əgər kvant sistemi ψ_1 -dalğa funksiyası ilə xarakterizə olunan haldadırsa və ψ_2 -dalğa funksiyası ilə xarakterizə olunan haldadırsa və s., onda bu sistem dalğa funksiyası ψ_1, ψ_2, \dots funksiyaların cəmi

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots + a_n\psi_n + \dots = \sum_{\alpha=1}^{\infty} a_{\alpha}\psi_{\alpha} \quad (2.5)$$



olan halda da olar. Burada a_1, a_2, \dots, a_n ixtiyari sabitlrdir. Yeni sistem ψ_1, ψ_2, ψ_3 və s. halındadırsa, onda həmin sistem ψ - halında da olar və bu hal

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots + a_n\psi_n + \dots = \sum_{\alpha=1}^{\infty} a_{\alpha}\psi_{\alpha} \quad (2.5)$$

şəklində də təsvir olunur. Klassik fizikada da bu prinsip var. Orada hər hansı bir fiziki kəmiyyət superpozisiya nəticəsində alınmışsa, bu kəmiyyət superpozisiya olunan kəmiyyətlərin kombinasiyası olur. Məsələn, dinamik dəyişən olaraq elektrik sahəsinin gərginliyini tapmış olursaq, bu kəmiyyət hər bir nöqtədə olan gərginliklərin cəmi olar:

$$\vec{E} = \sum_i \vec{E}_i = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3 + \dots$$

Kvant mexanikasında toplam (superpozisiya) (2.5) kimi isə, ψ_1 -halında fiziki kəmiyyət q_1 , ψ_2 halında bu kəmiyyət q_2 dəyrini və sairə alırsa ψ halında da bu fiziki kəmiyyət yalnız q_1 və ya da q_2 qiymətini alır. Klassik fizikada $(q_1 + q_2)$ -inin ortaq bir qiyməti olar. Kvant mexanikasında q_1 və q_2 -dən yalnız birini almış olar. Alınan q_1 və ya q_2 qiyməti hər hansı birinin nə qədər çəki ilə, yəni (2.5) -dəki a əmsallarının qiyməti ilə müəyyən olunur. Məsələn, klassik fizikada amplitudu a olan iki eyni rəqsi toplasaq

$$X_1 = a \sin \omega t$$

$$X_2 = a \sin \omega t$$

yekun rəqs

$$X = X_1 + X_2 = 2a \sin \omega t$$

kimi olar, yəni, amplitudu $2a$ olan rəqs alınır. Yeni, toplamdan öncə rəqsin amplitudu a -dışa, superpozisiya nəticəsində toplam rəqsin amplitudu $2a$ olar. Kvant nəzəriyyəsində iki eyni halı topladıqda, yeni dalğa funksiyası bir sabitə vurulur. Beləliklə, hal funksiyası eyni halı xarakterizə edir. Superpozisiya qaydasına görə fiziki kəmiyyət qiymətini dəyişməz və sistemin halı dəyişməz qalar.

(2.5) ifadəsinə görə alınan differensial tənliklər xətti differensial tənliklərdir. Ona görə də kvant mexanikasının tənlikləri xətti differensial tənliklərdir və bu tənliklərin ψ_1, ψ_2, ψ_3 və sairə həlləri mövcuddursa

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + a_3\psi_3 + \dots$$

həllidə differensial tənliyin həllidir.

Kvant mexanikası klassik mexanikanı xüsusi hal olaraq özündə əks etdirməlidir. Kvant mexanikasında dalğa funksiyası xətti differensial tənliyin həlli olur. Klassik fizikada isə elektron zərrəcik olub, $\vec{r}(t)$ trayektoriya ilə hərəkət edir. Bu trayektoriya hərəkət tənliyinə gətirib, çıxarır. Kvant və klassik mexanikanın bir birinə keçidi həndəsi optika ilə fiziki optikanın arasında olan keçid kimi müşahidə olunmalıdır.

Dalğa (fiziki) optikasında, $\psi = ae^{i\varphi}$ dalğasının həqiqi a amplitutu və φ fazasına (buna həndəsi optikada eynonol deyilir) malik olur. Əgər dalğa uzunluğunun kiçik qiymətlərində və ya kiçik məsafələrdə fazanın böyük qiymətlərində həndəsi optikanın müddəalarını tətbiq etmək keçərlidir. Yəni, böyük dalğa uzunluğunda və kiçik tezliklərdə fiziki optika qanunauyğunluqları tətbiq oluna bilər.

Söylənənlərə uyğun olaraq, kvant mexanikasında $\psi = ae^{i\varphi}$ dalğa funksiyasında fazanı φ -ni

$$\varphi = \text{const}I$$

ilə əvəz olunmalıdır. Burada I -tə'sir inteqralı və ya əyləm adlanır. I -tə'sir inteqralının ölçüsü enerji ilə zaman vahidlərinin hasilini kimi olmalıdır. Onda $\varphi = \text{const}I$ -dəki sabit \hbar^{-1} -olmalıdır (\hbar -in vahidi enerji zamanıdır). Yəni

$$\varphi = \frac{1}{\hbar}I$$

olarsa, dalğa funksiyası

$$\psi = ae^{\frac{i}{\hbar}I(\vec{r},t)} \quad (2.6)$$

şəklində yazılmalıdır. (2.6) şəklində olan dalğa funksiyasına kvantiklassik və ya klassikəbənzər dalğa funksiyası deyilir. Kvant mexa-

nikasından klassik mexanikaya keçid, böyük fazaya uyğun olduğu üçün $\hbar \rightarrow 0$ yaxınlaşması (dalğa optikasından həndəsi optikaya keçid dalğa uzunluğunun $\lambda \rightarrow 0$ kimi) vacibdir.

§3. Operatorlar və onların xassələri

Kvant mexanikasının riyazi əsaslarını operator hesabı təşkil edir. Verilmiş çoxluqda bir funksiyanı başqa bir funksiya çevirən əməliyyata operator və ya işləmçi deyilir:

$$\varphi = \hat{Q}\psi \quad (3.1)$$

\hat{Q} - işləmçisi və ya operatoru ψ -funksiyanı başqa bir φ -funksiyasına çevirdi. Şübhəsiz, həm ψ və həm də φ funksiyaları (2.1) şərtini ödəyən funksiyalar olmalıdır ki, sistemin fiziki həllini xarakterizə etsin. Xüsusi halda, operatorun təsiri ilə yeni φ funksiyası deyil, ψ funksiyanın bir q - sabitinə vurulmuş ifadəsi alınmış olsun, yə'ni

$$\varphi = q\psi \quad (3.2)$$

olsun. Onda (3.1) ifadəsini

$$\hat{Q}\psi = q\psi \quad (3.3)$$

kimi yaza bilərik. Bu tənliyin hər iki tərəfindən kompleks qoşma əməliyyatı almış olursaq

$$\hat{Q}^*\psi^* = q^*\psi^* \quad (3.4)$$

olur. (ulduz kompleks qoşmalığı məsələn, $Z = x + iy$ olanda $Z^* = x - iy$ olar, göstərir). (3.3) və ya (3.4) tənliyinə məxsusi funksiyanı tənliyin edən tənlik deyilir

$$\hat{Q}\psi = q\psi \quad (3.3)$$

tənliyində funksiya məxsusi funksiya, q - isə məxsusi qiymət deyilir. Bir ψ - funksiya üçün bir dənə q - tapılırsa, belə hala cırlaşmamış hal deyilir. Şəyət tapılan q -nin bir qiymətinə bir neçə ψ funksiya uyğun gələrsə, bu hala cırlaşmış (qətmərləşmiş) hal deyilir. (3.3) tənliyinin həlli zamanı q -lər kəsilməz qiymətlər alarsa, (3.3)

tənliyi kəsilməz spektrə malik olur. Əgər alınan qiymətlər diskret qiymətlər olarsa, onda \hat{Q} operatoru diskret spektrə malik olar.

Diskret və kəsilməz spektrə malik olan operatorun məxsusi funksiyaları başqa-başqa xassələrə sahib olurlar. Beləliklə, diskret spektr üçün

$$Q\psi_\alpha = q_\alpha\psi_\alpha \quad (3.3)$$

və kəsilməz spektr üçün isə

$$\hat{Q}\psi = q\psi \quad (3.3)$$

tənliyini yazırıq.

Riyaziyyatda çoxlu sayda operator (işləməçi) var : vurma, kökə alma, qüvvətə yüksəltmək, inteqrallama, törəməalma və sairə ilə xirə.

Kvant mexanikasında özəl operatorlardan istifadə olunur. Burada operatorlar iki özəl şərti ödəyən operatorlar olmalıdır və bu özəllik bilavasitə fiziki tələbatdan irəli gəlir.

Bu özəlliklər bunlardır:

a) Operatlar xətti operatorlar olmalı:

$$\hat{Q}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots + a_n\psi_n) = \hat{Q}\sum_{\alpha=1}^{\infty} a_\alpha\psi_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{\infty} a_\alpha(\hat{Q}\psi_\alpha) \quad (3.5)$$

b) Operatrlar ermit (öz-özünə qoşma) qoşma operatorlardı:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(\hat{Q}\psi)dv = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\hat{Q}^*\varphi^*dv) \quad (3.6)$$

Burada φ və ψ ixtiyari halın dalğa funksiyasıdır.

Bu şərtlərdən xəttlilik şərti superpozisiya prinsipinin istifadə olunmasını və ermitlik şərti isə operatorun məxsusi qiymətinin həqiqi (real) ədəd olmasını təyin edir.

Əgər (3.3) sol tərəfdən ψ^* -ə, (3.4) isə ψ -yə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallamış olursaq

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\hat{Q}\psi)dV = q \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi dV$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\hat{Q}^*\psi^*)dV = q^* \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi dV$$

Tərəf-tərəfə çıxmış olursaq, ermitlik şərtinə görə

$$0 = (q - q^*) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dV \quad \text{olar.}$$

Normallama şərtinə görə $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dV = 1$ olduğu üçün

$$0 = q - q^* \quad \text{olar.}$$

Beləliklə

$$q = q^* \quad (3.7)$$

bərabərliyini alırıq. Yəni, ermit operatorun məxsusi dəyərinin (qiymətinin) həqiqi ədəd olduğunu tapmış olarıq.

Əgər iki ixtiyari xətti və ermit operatorların yerlərini dəyişirdikdə:

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{B}\hat{A}\psi \quad (3.8)$$

olursa, \hat{A}, \hat{B} operatorlarına komutativ operatorlar deyilir. Yox, əgər \hat{A} və \hat{B} operatorları sıradəğişən operatorlar deyilsə, yəni

$$\hat{A}\hat{B}\psi \neq \hat{B}\hat{A}\psi \quad (3.9)$$

olarsa, \hat{A} və \hat{B} operatorlarına komutativ olmayan operatorlar deyilir. Əgər,

$$\hat{A}\hat{B}\psi = -\hat{B}\hat{A}\psi \quad (3.10)$$

olursa, \hat{A} və \hat{B} operatorlarına antikomutativ operatorlar deyilir. (3.8) - (3.10) ifadələini ödəyən şərtlər fizikada çox önəmli şərtlərdi və kvant mexanikasında faydalı fiziki nəticələrə gətirib çıxaran şərtlərdir.

§4. Kvant mexanikasının postulatları

Kvant mexanikasında dinamik dəyişənin bu və yada ki, başka qiymət alma ehtimalından və dinamik dəyişənin orta qiymətindən söhbət açılır. Buna görə də kvant mexanikasında dinamik dəyişənlər ədədlərlə deyil, daha başka özəlliyi olan operatorla xarakterizə olunur. Məhz, ona görə də kvant mexanikasında postulat olaraq üç postulat qəbul olunur:

1. Hər bir dinamik dəyişən xətti və ermit operatorla təmsil olunur. Bu kvant mexanikasının birinci postulatıdır. Yəni, \hat{Q} operatoru

$$\hat{Q} \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\alpha} = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \hat{Q} \psi_{\alpha} \quad (4.1)$$

$$\int \varphi^* \hat{Q} \psi dV = \int \psi \hat{Q}^* \varphi^* dV$$

şərtlərini ödəyən operatorlardır/ Bu; şərtlər daxilində bu cürə operator vurma operatoru (\vec{r} -radius vektoru) və ya diferensial operator ($-i\vec{\nabla}$) ola bilər.

2. Hər bir operatorun məxsusi qiymətini tapmaq üçün

$$\hat{Q} \psi_q = q \psi_q \quad (4.2)$$

tənzimindən istifadə olunur. \hat{Q} - operatoru ilə xarakterizə olunan dinamik dəyişən dəqiq olaraq, bu operatorun məxsusi qiymətlərindən hər hansı biri olan q müşahidə olunur. Buradan görünür ki, fiziki kəmiyyətləri xarakterizə edən operatorun məxsusi qiyməti gerçək həqiqi ədəddir. Bu kvant mexanikasının ikinci postulatıdır.

3. Əgər hər hansı bir ψ funksiyası ixtiyari halı xarakterizə edərsə, bu funksiyayı məxsusi funksiyaların cəmi şəklində yazmaq mümkündür.

$$\psi = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\alpha} \quad (4.3)$$

Dalğa funksiyasının statistik anlamına görə fəzada çoxlu sayda birləşmələri ilə kəsişməyən oblastlar var ki, onların hər birində olma ehtimalı ψ ilə təyin olunur. Burada üçüncü postulat olaraq belə bir postulat qəbul olunur. Şəyət hər hansı bir dinamik dəyişəni ölçərkən q dəyərini alma ehtimalı superpozisiya prinsipində olan a_{α} -ların $|a_{\alpha}|^2$ mütləq qiymətinin kvadratı ilə təyin olunur. Yəni

$$W = |a_{\alpha}|^2 \quad (4.4)$$

ehtimal sıxlığı bu şəkildə verilməmiş olur. Bu postulata görə istənilən dinamik dəyişənin bu və ya başqa qiymət alma ehtimalını göstərir. Beləliklə, q məxsusi qiyməti ölçülməkdə olan q -lərin hər hansı birinin alma ehtimalı, ψ -funksiyasının, ψ_q -məxsusi funksiyaların biri ilə üst-üstə düşmə ehtimalını inamla söyləmək olar.

Beləcə, üç postulat qəbul olunur:

1. Dinamik dəyişənlər xətti və ermit (öz-özünə qoşma) operatorlarla göstərilir.
2. Ölçü zamanı operatorların məxsusi qiymətlərindən q biri alınır.
3. Ölçü zamanı məxsusi qiymətlərdən birinin alma ehtimalı sıxlığı

$$W = |a_\alpha|^2 \quad \text{-diskret halda}$$

$$dW = |a_q|^2 dq \quad \text{-kəsilməz halda} \quad (4.5)$$

təyin olunur.

§ 5. Kəsilməz spektrə sahib olan operatorun məxsusi funksiyası

Operatorun kəsilməz məxsusi qiymətini və məxsusi funksiyasını təyin edən tənlik (3.3)-ə görə

$$\hat{Q}\psi = q\psi \quad (3.3)$$

kimi yazılır. Kəsilməzliyi təfəssilatı ilə araşdırmaq üçün bu tənliyə kəsilməz dəyişən q daxil edək. Onda (3.3) tənliyini

$$\hat{Q}\psi_q = q\psi_q \quad (3.3)$$

şəklində də yazı bilərik. Bu halda $\int |\psi_q|^2 dq$ dağılan ifadə olur və $|\psi_q|^2$ ifadəsi daha tez sonsuzluqda sifira yaxınlaşır. Beləliklə, zərərçik bu durumda da məhdud olmayan, infinitiv hərəkət edir. Belə hallarda ixtiyari halın dalğa funksiyasını superpozisiya prinsipinə görə

$$\psi(\vec{r}) = \int a_q \psi_q(\vec{r}) dq \quad (5.1)$$

kimi göstərə bilərik. Kəsilməz spektrin məxsusi funksiyasını elə şəkildə seçək ki,

$$|a_q|^2 dq$$

ifadəsi ψ halında fiziki kəmiyyətə q ilə $q+dq$ intervalında qiymət alma ehtimalını təyin edər. q - qiymətinin bütün dəyərlərinin alma ehtimallarının cəmi:

$$\int |a_q|^2 dq = 1 \quad (5.2)$$

bwrabwr olar/ ψ –funksiyayn'n normallama ;wrtinw g,rw (2/4)

$$\int \psi^* \psi dV = 1$$

olduđu üçün

$$\int \psi^* \psi dV = \int |a_q|^2 dq = 1 \quad (5.3)$$

$$\int a_q^* \left\{ \int \psi \psi_q^* dV - a_q \right\} dq = 0 \quad (5.4)$$

yazmaq mümkündür. (5.4) ifadəsini alarkən, kəsilməz spektr halında olan

$$\psi^* = \int a_q^* \psi_q^* dq \quad (5.5)$$

superpozisiya prinsipindən istifadə olunmuşdur/ (5/4) ifadəsində

$$a_q = \int \psi^* \psi dV \quad (5.6)$$

alırıq.

Buradan

$$a_q = \int a_{q'} \left(\int \psi_q \psi_q^* dV \right) dq' \quad (5.7)$$

yaza bilərik. Bu ifadəni ixtiyari a_q üçün hər zaman ödənilir. Bunun

üçün $q' \neq q$ olmayanda $\int \psi_q \psi_q^* dV = 0$ olar, $q' = q$ olanda isə

$\int \psi_q \psi_q^* dV \rightarrow \infty$ sonsuza yaxınlaşır, çünki əks təqdirdə dV görə inteqral sıfır olar. Deməli inteqral

$$\int \psi_q \psi_q^* dV$$

$(q' - q)$ -nin funksiyası olmalıdır. Bu funksiya özəl funksiya olan δ -funksiya olar.

Yəni

$$\int \psi_q \psi_q^* dV = \delta(q' - q) = \begin{cases} 0, & q' \neq q \\ \infty, & q' = q \end{cases} \quad (5.8)$$

olması lazımdır.

Bu ifadə kəsilməz spektrin məxsusi funksiyasının δ -funksiya-normallanması şərtidir. Bu şərtə görə fiziki kəmiyyət F ilə $F+dF$ arasında qiymət alma ehtimalını təyin edir. F fiziki kəmiyyəti hər hansı bir F -ə bərabər olmayanda

$$\int \psi_q \psi_q^* dV = 0, q \neq q' \quad (5.9)$$

olduğu üçün kəsilməz spektrin məxsusi funksiyaları ortoqonal $(\psi_{q'}, \psi_q) = 0$ olur. Əgər fiziki kəmiyyətlər eynidirsə, onda (5.8)-ə görə inteqral dağılan olar. (5.8) ifadəsindəki $\delta(q' - q)$ funksiya xüsusi funksiya olub, Dirakin δ -funksiyası adlanır. Bu funksiya sinkulyar funksiya olaraq hər yerdə sıfır olub, yalnız $x=0$ nöqtəsində sonsuz böyükdür və onun inteqralı (Əlavə A)

$$\int \delta(x) dx = 1 \quad \text{olur.}$$

δ - funksiyanın tərifinə görə

$$\delta(x) = \lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\sin(gx)}{\pi x} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad (5.10)$$

yaza bilərik.

δ -funksiyanın aşağıdakı xassləri mə'lumdur:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \delta(-x), \\ \delta'(x) &= -\delta'(-x) \\ x\delta(x) &= 0, \quad x\delta'(x) = -\delta(x) \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \int \delta(x-a)f(x) dx = f(a)$$

$$\delta[\varphi(f') - \varphi(f)] = \frac{1}{\left| \frac{\partial \varphi(f)}{\partial f} \right|_{f=f'}} \delta(f' - f)$$

Məsələnn? koordinat operatoru kəsilməz spektrə malik olduğu üçün

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \int a_{r'} \psi_{r'}(\vec{r}) dv \\ a_{r'} &= \int \psi(\vec{r}) \delta(\vec{r}' - \vec{r}) dv = \psi(\vec{r}') \end{aligned} \quad (5.12)$$

yazmaq olar.

Beləliklə, bütün kəsilməz spektrə malik olan operatorların məxsusi funksiyaları, δ - funksiyaya normallanan funksiyalardır və normalama şərtləri δ - funksiyasının xassələri ilə müəyyənləşdirilir.

§6. Diskret spektrə malik olan operatorun məxsusi funksiyaları

Fərz edək ki, operator \hat{Q} cırılşmamış diskret spektrə malik olur. Onda belə operatorun məxsusi funksiyası

$$\hat{Q}\psi_\alpha = q_\alpha\psi_\alpha \quad (3.3)$$

tənliyini ödəyən funksiya olur. Bu tənliyə kompleks qoşma tənlik

$$\hat{Q}^*\psi_\beta^* = q_\beta\psi_\beta^* \quad (6.1)$$

olar. (3.3) ifadəsini soldan ψ_β^* -ə və (6.1)-i isə ψ_α -yə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallamış olursaq

$$\int \psi_\beta^* \hat{Q} \psi_\alpha dV = q_\alpha \int \psi_\beta^* \psi_\alpha dV$$

$$\int \psi_\alpha \hat{Q}^* \psi_\beta^* dV = q_\beta \int \psi_\alpha \psi_\beta^* dV$$

alarıq.

Bu ifadələri tərəf-tərəfə çıxsaq, \hat{Q} operatorunun ermitlik şərtinə görə

$$\int \psi_\beta^* \hat{Q} \psi_\alpha dV = \int \psi_\alpha \hat{Q}^* \psi_\beta^* dV$$

olar və buradan

$$(q_\alpha - q_\beta) \int \psi_\beta^* \psi_\alpha dV \quad (6.2)$$

əldə edilir. Əgər $q_\alpha \neq q_\beta$ -dirsə, yəni $\alpha \neq \beta$ fərqlidirsə, onda (6.2) ifadəsində

$$\int \psi_\beta^* \psi_\alpha dV = 0 \quad (6.3)$$

şerti alınar. Bu məxsusi funksiyaların ortoqonallıq şərtidir. Yəni müxtəlif məxsusi qiyməti olan hallar bir-birinə ortoqonaldır. Başqa sözlə, fiziki kəmiyyəti və ya dinamik dəyişəni ölçən zamanı α -halında fiziki kəmiyyət üçün bir qiymət, β -halında isə başqa bir qiy-

mət almış oluruq. Əgər $q_\alpha = q_\beta$ olarsa, yəni $\alpha = \beta$ olursa, onda (6.2)-dən

$$\int \psi_\alpha^* \psi_\alpha dV = \int |\psi_\alpha|^2 dV = 1 \quad (6.4)$$

olar. Yəni bu halda 100% ehtimalla sistem α halında olur ki, belə α halında olma ehtimalların cəmi vahiddir.

(6.4) normasını gözönünə alırıqsa, diskret spektrin məxsusi funksiyalar çoxluğu (6.3) ilə birlikdə ortonormal funksiyalar sistemi təşkil edir və ortonormalıq şərti

$$\int \psi_\beta^* \psi_\alpha dV = \delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \alpha = \beta \\ 0 & \alpha \neq \beta \end{cases} \quad (6.5)$$

olur. Deməli diskret spektrə sahib olan operatorun məxsusi funksiyaları ortonormal funksiyalardır. Digər tərəfdən bu məxsusi funksiyalar tam (və ya qapalı) sistem təşkil edirlər. Yə'ni istənilən ixtiyari funksiya ψ , dəyişənlərdən asılı olarsa, ψ_α məxsusi funksiyaların sırası kimi təmsil olunar:

$$\psi(q) = \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha(q) \quad (6.6)$$

burada cəmləmə bütün kvant ədədləri α üzrə olur.

(6.5) ortonormallamanı nəzərə alırıqsa, (6.6)-nı ψ_β^* -yə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallamış olursaq

$$\int \psi_\beta^* \psi(q) dq = \sum_\alpha \psi_\beta^* \psi_\alpha a_\alpha dq = \sum_\alpha a_\alpha \delta_{\alpha\beta} \quad (6.7)$$

$$a_\beta = \int \psi_\beta^* \psi(q) dq$$

əldə edirik.

İstənilən funksiyanı diskret spektrin məxsusi funksiyaların toplamı kimi göstərə bilərik:

$$\delta(q' - q) = \sum_\alpha a_\alpha(q') \psi_\alpha(q) \quad (6.8)$$

Bu (6.8) ifadəsi (6.6)-nın xüsusi bir halıdır, ona görə (6.7)-yə əsasən

$$a_\alpha(q') = \int \psi_\alpha^*(q) \delta(q' - q) dq = \psi_\alpha^*(q') \quad (6.9)$$

olur. Buradan (6.8) yerinə yazırıqsa

$$\delta(q' - q) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(q') \psi_{\alpha}(q) \quad (6.10)$$

almış oluruq. Həm diskret və həm də kəsilməz spektrə malik olan operatorların məxsusi funksiyaları aşağıdakı şəkildə ortonormalama şərtini ödəyən funksiyalar olur

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(q') \psi_{\alpha}(q) + \int \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} dv = \delta(q' - q) \quad (6.11)$$

Operatorların məxsusi funksiyaları eyni zamanda Hilbert fəzasının ort vektorları olduqları üçün ortonormalıq şərtini bu şəkildə də yazmaq olar

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \int \psi_{\beta}^* \psi_{\alpha} d = \delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \alpha = \beta \\ 0 & \alpha \neq \beta \end{cases} \quad (6.12)$$

§7. Fiziki kəmiyyətin orta qiyməti

Hər hansı bir dinamik dəyişənin orta qiyməti bu dəyişənə qarşı qoyulan ermit və xətti operatorun və ixtiyari halın hal vektorunun verilməsi ilə təyin olunur. Bunu göstərmək üçün orta qiymət anlayışından istifadə edək. Mə'lumdur ki, orta qiymət

$$\bar{F} \equiv \langle F \rangle = \frac{N_1 F_1 + N_2 F_2 + \dots + N_{\alpha} F_{\alpha}}{N} = \sum_{\alpha} \frac{F_{\alpha} N_{\alpha}}{N} \quad (7.1)$$

kimi hesablanır. Yə'ni, F kəmiyyətini ölçərkən, N₁ dəfə F₁ qiyməti, N₂ dəfə F₂ qiyməti, N₃ dəfə F₃ qiyməti və sairə qiymətlər alır. Ehtimal nəzəriyyəsinə görə

$$\bar{F} \equiv \langle F \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\alpha} F_{\alpha} \frac{N_{\alpha}}{N} = \sum_{\alpha} F_{\alpha} W(F_{\alpha}) \quad (7.2)$$

şeklində yazıla bilər.

Üçüncü postulata görə ((4.4))

$$W(F_{\alpha}) = |a_{\alpha}(F_{\alpha})|^2 = a_{\alpha}^*(F_{\alpha}) a_{\alpha}(F_{\alpha})$$

olduğu üçün

$$\bar{F} = \sum_{\alpha} F_{\alpha} a_{\alpha}^* a_{\alpha} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} F_{\alpha} a_{\beta}^* a_{\alpha} \delta_{\alpha\beta}$$

yazmaq olur.

Ortonormallıq şərtinə görə

$$\delta_{\alpha\beta} = \int \psi_\alpha \psi_\beta^* dV = \langle \beta | \alpha \rangle \quad (7.3)$$

Onda F-in orta qiyməti üçün

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \sum_\alpha \sum_\beta F_\alpha a_\beta^* a_\alpha \int \psi_\alpha \psi_\beta^* dV = \sum_\alpha \sum_\beta a_\beta^* \psi_\beta^* F_\alpha a_\alpha \psi_\alpha dV = \\ &= \int \sum_\beta a_\beta^* \psi_\beta^* \sum_\alpha F_\alpha a_\alpha \psi_\alpha dV = \int \sum_\beta a_\beta^* \psi_\beta^* \hat{F} \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha dV = \\ &= \int \sum_\beta a_\beta^* \psi_\beta^* \hat{F} \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha dV \end{aligned} \quad (7.4)$$

əldə edərik. Bəllidir ki, ixtiyari ψ və ψ^* funksiyalarını

$$\psi = \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha$$

$$\psi^* = \sum_\beta a_\beta^* \psi_\beta^*$$

məxsusi funksiyaların sırası kimi yazı bilərik və

$$\langle F \rangle \equiv \bar{F} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dV \quad (7.5)$$

kimi orta qiyməti tapmış oluruq. Deməli, kvant mexanikasında fiziki kəmiyyətin orta qiyməti ixtiyari halın dalğa funksiyası ilə təyin olunur. Orta qiymət, sistem məxsusi halda olduğu zaman məxsusi funksiyaların toplamı ilə ifadə olunan, ixtiyari halın dalğa funksiyası ilə

$$\bar{F} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dV \quad (7.6)$$

müəyyən olunan qiymətdir.

§8. Məxsusi qiymət və məxsusi funksiya tənliyi

Dinamik dəyişənin orta qiyməti (7.6) ifadəsi ilə təyin olunur:

$$\bar{F} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dV \quad (7.6)$$

Bu ifadə ilə nəinki orta qiyməti, həmçinin kvadratik orta fərqlənməni hesablamaq olur. Həqiqətən F-in xətası

$$\Delta F = F - \langle F \rangle \quad (8.1)$$

olur və buna uyğun ermit operator da

$$\hat{\Delta F} = \hat{F} - \langle F \rangle \quad (8.2)$$

olar. Buradan və (7.6)-ya görə kvadratik orta fərqlənmə

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle = \int \psi^* \left(\hat{\Delta F} \right) \left(\hat{\Delta F} \right) \psi dV \quad (8.3)$$

şəklində yazıla bilər. $\hat{\Delta F}$ operatorun ermitlik şərtinə görə

$$\int \psi^* \hat{\Delta F} \psi dV = \int \psi \left(\hat{\Delta F} \right)^* \psi^* dV \quad (8.4)$$

olduğu üçün

$$\begin{aligned} \langle (\Delta F)^2 \rangle &= \int \psi^* \hat{\Delta F} \psi dV = \int \psi \left(\hat{\Delta F} \right)^* \psi^* dV = \\ &= \int \hat{\Delta F} \psi \cdot \left(\hat{\Delta F} \right)^* \psi^* dV = \int \left| \left(\hat{\Delta F} \right) \psi \right|^2 dV \end{aligned}$$

kimi yazılar. Yəni,

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle = \int \left| \left(\hat{\Delta F} \right) \psi \right|^2 dV \quad (8.5)$$

əldə edirik.

(8.5) ifadəsi istənilən dinamik dəyişənin ixtiyari halda orta qiymətindən kvadratik orta fərqlənməni hesablamaq mümkündür. (8.5)-dən mə'lum olmayan hal, kvadratik orta fərqlənmə sıfır olanda mövcud olar, yəni, F kəmiyyəti müəyyən qiymətə sahib olur. Belə hallar üçün (8.5) ifadəsi sıfır olar

$$\int \left| \left(\hat{\Delta F} \right) \psi \right|^2 dV = 0 \quad (8.6)$$

İnteqral altı ifadə mütləq müsbət ifadədir. Ona görə inteqralın sıfır olması üçün

$$\left(\hat{\Delta F} \right) \psi = 0 \quad (8.7)$$

şərti daxilində labüddür. (8.2) ifadəsindən

$$\left(\hat{F} - \langle F \rangle \right) \psi = 0 \quad (8.8)$$

yazılar. Əgər F müəyyən olursa, $\langle F \rangle = F$ olar və (8.8) tənliyi

$$\hat{F}\psi = F\psi \quad (8.9)$$

kimi yazılar. Bu tənlik xətti bircins differensial tənlikdir. Məhz bu cürə tənliyi həll etdikdə diskret və kəsilməz spektr, həmçinin cırılma olub və ya olmamasını tapa bilərik.

Operatorun məxsusi qiymətlərin toplamı F kəmiyyətinin ixtiyari halda mümkün olan qiymətlər almasına imkan verir.

§9. Fiziki kəmiyyətin müəyyən qiymət alma şərti

Əgər hər hansı bir halın dalğa funksiyası eyni zamanda bir neçə operatorun məxsusi funksiyadırsa, onda bu halda operatorlara uyğun gələn fiziki kəmiyyətlər müəyyən qiymət alır. Sistemin halından asılı olaraq bu və ya başqa kəmiyyət müəyyən qiymətə sahib olar. Təcrübə göstərir ki, fəqət elə kəmiyyətlər də olur ki, onlar heç bir halda müəyyən qiymət ala bilmir. Yəni, onlar qeyrimüəyyən qalır. Bu xüsusiyyət mikroaləmin özəlliyidir ki, burada kvant mexanikasında əks etdirməliyik.

Göstərmək olar ki, əgər iki fiziki kəmiyyət eyni zamanda müəyyən qiymət alırsa, onların operatorları komutativ olurlar. Fiziki kəmiyyətlərin müəyyən olması, iki \hat{Q}_1 və \hat{Q}_2 operatorlarının eyni bir ψ_α məxsusi funksiyaya malik olması deməkdir. Riyazi dildə bu

\hat{Q}_1 və \hat{Q}_2 operaorları üçün

$$\begin{aligned} \hat{Q}_1\psi_\alpha &= q_1\psi_\alpha \\ \hat{Q}_2\psi_\alpha &= q_2\psi_\alpha \end{aligned} \quad (9.1)$$

yazmaq deməkdir. Buradan

$$\begin{aligned} \hat{Q}_2\hat{Q}_1\psi_\alpha &= q_1\hat{Q}_2\psi_\alpha = q_1q_2\psi_\alpha \\ \hat{Q}_1\hat{Q}_2\psi_\alpha &= q_2\hat{Q}_1\psi_\alpha = q_2q_1\psi_\alpha \end{aligned} \quad (9.2)$$

əldə edirik. (9.2) ifadəsindəki tənlikləri tərəf-tərəfə çıxarıqsa, onda

$$(\hat{Q}_2\hat{Q}_1 - \hat{Q}_1\hat{Q}_2)\psi_\alpha = q_1q_2\psi_\alpha - q_2q_1\psi_\alpha = 0$$

olar. Buradan

$$\begin{aligned}(\hat{Q}_2\hat{Q}_1 - \hat{Q}_1\hat{Q}_2)\psi_\alpha &= 0 \\ \hat{Q}_1\hat{Q}_2 &= \hat{Q}_2\hat{Q}_1\end{aligned}\tag{9.3}$$

tapmış olarıq. İxtiyari halın dalğa funksiyasını

$$\psi = \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha$$

yazmış olursaq

$$\begin{aligned}(\hat{Q}_2\hat{Q}_1 - \hat{Q}_1\hat{Q}_2)\sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha &= (\hat{Q}_2\hat{Q}_1 - \hat{Q}_1\hat{Q}_2)\psi = \\ &= \sum_\alpha a_\alpha (\hat{Q}_2\hat{Q}_1 - \hat{Q}_1\hat{Q}_2)\psi_\alpha = 0\end{aligned}$$

taparıq. Yə'ni,

$$(\hat{Q}_2\hat{Q}_1 - \hat{Q}_1\hat{Q}_2)\psi = 0\tag{9.4}$$

olar. Deməli, ixtiyari halda da eyni bir dalğa funksiyasına sahib olan iki operator sıradəyişən, komutativ operatorlar olurlar. Bu teoremin tərsini də göstərmək olur. Bunu cırışmamış hal olanda göstərək. Tənliyi $\hat{Q}_1\hat{Q}_2 = \hat{Q}_2\hat{Q}_1$ şərt daxilində

$$\hat{Q}_1\psi_\alpha = q_1\psi_\alpha\tag{9.5}$$

şəklində yazaq. (9.5)-in hər tərəfini \hat{Q}_2 -yə vuraq.

$$\hat{Q}_2(\hat{Q}_1\psi_\alpha) = q_1(\hat{Q}_2\psi_\alpha)$$

Yə'ni

$$\begin{aligned}\hat{Q}_1(\hat{Q}_2\psi_\alpha) &= q_1(\hat{Q}_2\psi_\alpha) \\ \hat{Q}_1(\hat{Q}_2\psi_\alpha) &= \hat{Q}_1\varphi_\alpha = q_1\varphi_\alpha\end{aligned}\tag{9.6}$$

Burada

$$\varphi_\alpha = \hat{Q}_2\psi_\alpha\tag{9.6}$$

Cırışmamış hal olduğu üçün φ_α ψ_α -dən fərqli ola bilməz və əgər fərqli olursa, bu fərq yalnız bir sabitlə fərqlənə bilər:

$$\varphi_\alpha = q_2\psi_\alpha\tag{9.7}$$

(9.6)-nı yerinə yazarsaq

$$\hat{Q}_2\psi_\alpha = q_2\psi_\alpha\tag{9.8}$$

olar. Buradan həm \hat{Q}_1 və \hat{Q}_2 , həm də operatorunun eyni bir məxsusi funksiyası olur. Əgər ψ - halında bir neçə kəmiyyətin ψ_α müəyyən qiyməti varsa, onda bu kəmiyyətlərin müştərək dəyərləri olar. Başka deyimlə, operatorları komutasiya edən fiziki kəmiyyətləri bir-birinə əngəl olmurlar.

§10. Dinamik dəyişənlər üçün qeyrimüəyyənlik münasibəti

Operatorları komutasiya edən fiziki dəyişənlər bir-birilərinə əngəl olmayan kəmiyyətlər olurlar və onlar eyni zamanda müəyyən qiymət alan kəmiyyətlərdir. Lakin komutasiya etməyən operatorların dinamik dəyişənləri isə bir-birinə əngəl olan kəmiyyətlər olur, onlar eyni zamanda heç bir halda müəyyən dəyər almaq imkanına sahib deyillər, onlar arasında qeyrimüəyyənlik mövcuddur. Əgər operatorları komutasiya etməyən ermit operatorlar üçün komutasiya şərti

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad (10.1)$$

varsa, ixtiyari halda A və B kəmiyyətlərinin orta qiyməti

$$\bar{A} = \int \psi^* \hat{A} \psi dV \equiv (\psi, A\psi); \bar{B} = \int \psi^* \hat{B} \psi dV \equiv (\psi, B\psi)$$

olmaqla, A və B-nin xətası

$$\Delta A = A - \bar{A}, \Delta B = B - \bar{B},$$

kimi olur və bunların operatorları üçündə (10.1) ifadəsi alınar

$$[\Delta A, \Delta B] = i\hat{C} \quad (10.2)$$

burada $\Delta A = A - \bar{A}, \Delta B = B - \bar{B}$, -dir.

Onda

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta A)^2} &= \int \psi (\hat{A} - \bar{A})^2 \psi dV \\ \overline{(\Delta A)^2} &= (\psi, A^2 \psi) = (A\psi, A\psi) \end{aligned} \quad (10.3)$$

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta B)^2} &= \int \psi^* (\hat{B} - \bar{B})^2 \psi dV \\ \overline{(\Delta B)^2} &= (\psi, B^2 \psi) = (B\psi, B\psi) \end{aligned} \quad (10.4)$$

yaza bilərik. Əgər

$$A\psi = \psi_A, B\psi = \psi_B$$

kimi işarə edəriksə, (10.3) və (10.4) ifadəsini

$$\overline{(\Delta A)^2 (\Delta B)^2} = (\psi_A, \psi_A)(\psi_B, \psi_B)$$

şəklində yazmış olursaq, ($|ab|^2 \leq |a|^2 |b|^2$ olduğu üçün)

$$\overline{(\Delta A)^2 (\Delta B)^2} \geq |(\psi_A, \psi_B)|^2 \quad (10.5)$$

yazmaq olar. $(\psi_A, \psi_B) = (A\psi, B\psi) = (\psi, AB)$ olduğu üçün və

$$\hat{A}\hat{B} = i \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2i} + \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} = \hat{b} + i\hat{c}/2 \quad (10.6)$$

qəbul etsək $\left(\hat{b} = \frac{AB + BA}{2}, \hat{c} = \frac{AB - BA}{i} \right)$

$$\overline{(\Delta A)^2 (\Delta B)^2} \geq \left| \left(\psi, \frac{i\hat{c}}{2} \psi \right) \right|^2 + \left| (\psi, \hat{b} \psi) \right|^2 \quad (10.7)$$

və ya

$$\overline{(\Delta A)^2 (\Delta B)^2} \geq \frac{\bar{c}^2}{4} \quad (10.8)$$

olur.

Buradan

$$\overline{(\Delta A)(\Delta B)} \geq \frac{\bar{c}}{2} \quad (10.9)$$

alıraq.

Deməli, (10.1) şərti olduqda, bu A və B kəmiyyətlər üçün (10.9) qeyrimüəyyənlik münasibəti alınır.

Bu (10.9) münasibəti başqa yolla da əldə edə bilərik. Bunun üçün həqiqi parametr olan α görə mütləq müsbət ifadəyə baxaq:

$$I(\alpha) = \int \left(\alpha \hat{\Delta A} - i \hat{\Delta B} \right) \psi \Big| dv \geq 0 \quad (10.10)$$

Bu ifadənin şəklini dəyişsək

$$\begin{aligned}
I(\alpha) &= \int \left(\alpha \hat{\Delta A} - i \hat{\Delta B} \right) \psi \left(\alpha \hat{\Delta A}^* + i \hat{\Delta B}^* \right) \psi^* dV = \\
&= \alpha^2 \int \left(\hat{\Delta A} \right) \psi \left(\hat{\Delta A}^* \right) \psi^* dV + \int \left(\hat{\Delta B} \right) \psi \left(\hat{\Delta B}^* \right) \psi^* dV - \\
&- i\alpha \int \left(\hat{\Delta B} \right) \psi \left(\hat{\Delta A}^* \right) dV + i\alpha \int \left(\hat{\Delta A} \right) \psi \left(\hat{\Delta B}^* \right) \psi^* dV = \\
&= \alpha^2 \int \psi^* \left(\hat{\Delta A} \right)^2 \psi dV + \int \psi^* \left(\hat{\Delta B} \right)^2 \psi dV - i\alpha \int \psi^* \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \psi dV
\end{aligned}$$

alarıq. Yə'ni

$$I(\alpha) = \alpha^2 \overline{(\Delta A)^2} + \alpha \bar{C} + \overline{(\Delta B)^2} \geq 0 \quad (10.11)$$

olur.

Buradan α parametrinin bütün qiymətlərində $I(\alpha) \geq 0$ olması üçün

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{\bar{C}^2}{4} \quad (10.12)$$

olur. Buradan

$$\sqrt{\overline{(\Delta A)^2}} \sqrt{\overline{(\Delta B)^2}} \geq \frac{\bar{C}}{2} \quad (10.13)$$

alarıq.

Operatorları komutasiya etməyən fiziki kəmiyyətlərdən kordinat və impuls, azimut bucağı və hərəkət miqdarı momentinin birləşəni, zaman və enerji

$$\begin{aligned}
\Delta X \cdot \Delta P_x &\geq \frac{\hbar}{2}, \Delta Y \cdot \Delta P_y \geq \frac{\hbar}{2}, \Delta Z \cdot \Delta P_z \geq \frac{\hbar}{2}, \\
\Delta \varphi \cdot \Delta L_z &\geq \frac{\hbar}{2} \\
\Delta t \cdot \Delta E &\geq \frac{\hbar}{2}
\end{aligned} \quad (10.14)$$

kəmiyyətləri arasında qeyrimüəyyənlik münasibəti yaranır.

(10.14) münasibətinə görə impulsun x-birləşəni barədə mə'lumatı, onun uyğun koordinatı haqqında mə'lumatı tamamən itirdik-

də almaq olur. Eynilə koordinatın dəqiq təyin olunması üçün, impulsun uyğun birləşəni haqqında məlumat almaq olmaz. Həmçinin zərrəciyin müəyyən bir orbitdə vəziyyəti orbitə perpendikulyar müstəvidə impuls momentinin birləşəninin barədə məlumatın tamamən itirilməsi ilə əldə olunur. Enerji ilə zaman üçündə bu sözləri söyləmək mümkündür. Enerjinin ΔE dəqiqliyi ilə təyini Δt zaman intervalında olur. Yə'ni, sistem Δt zaman fərqinin hər hansı bir qiyməti olanda, onun enerjisi $\Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t}$

dəqiqliyi ilə təyin olunur və enerjinin ölçülmə müddəti Δt zamanında müşahidə olunur.

Beləliklə, qeyrimüəyyənlik münasibəti zərrəciyin atom ölçülərində traektoriya anlayışına malik olmamasını göstərir.

§11. Koordinat və impuls operatorlarının aşkar şəkili, onların məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyaları

Bu və ya başqa bir operatorun aşkar şəkilinin müəyyən edilməsi dalğa funksiyasının hansı dəyişəndən asılı olmasına bağlıdır. Koordinata bağlı olan dalğa funksiyası verilmiş olursa, onda bu funksiya koordinat təsvirində verilmiş funksiya olur. Yəni, fərz edək ki, dalğa funksiyası koordinat təsvirində verilmişdi $(\psi(\vec{r}))$. Orta qiymətin

$$\bar{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi dV = \int \psi^* \hat{F} \psi dx dy dz$$

İfadəsinə görə koordinatın orta qiyməti

$$\bar{\vec{r}} = \int \psi^* \hat{\vec{r}} \psi dx dy dz \quad (11.1)$$

yazıla bilər. Digər tərəfdən ψ halında koordinatın qiyməti

$$\bar{\vec{r}} = \int \vec{r} |\psi|^2 dV = \int \vec{r} \psi^* \psi dV = \int \psi^* \vec{r} \psi dV \quad (11.2)$$

bu ifadə ilə təyin olunur. (11.2) ilə (11.1)-i müqayisə edərsək, koordinat təsvirində

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r} \quad (11.3)$$

alırıq.

Deməli, koordinat təsvirində koordinat operatoru, koordinata vurma operatoru olur. Bu operatorun məxsusi qiymətini tapmaq üçün

$$\hat{r} \psi_{r_0}(\vec{r}) = \vec{r}_0 \psi_{r_0}(\vec{r}) \quad (11.4)$$

tənliyini yazaq. Bu tənlikdə $\vec{r} = \vec{r}_0$ olanda, $\psi_{r_0} \neq 0$ olmalı, $\vec{r} \neq \vec{r}_0$ olmayanda isə $\psi_{r_0} = 0$ olması lazımdır. Bu cürə xassəyə Dirakin delta funksiyası $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ malik olur. Yə'ni

$$\psi_{r_0} = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Beləcə, fəza koordinatının operatoru və məxsusi funksiyası

$$\hat{r} = \vec{r}$$

$$\psi_{r_0} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}_0)} d\vec{K} = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (11.5)$$

kimi təyin olunur. Burada koordinat \vec{r} , $-\infty$ -dan, $+\infty$ -a qədər kəsilmiş qiymətlər alır. ($-\infty < \vec{r} < \infty$)

İmpuls operatorunun aşkar şəklini tapmaq üçün dalğa funksiyasının radius vektorundan asılı olmasını fərz edək və onu r -ətrafında sıraya ayıraq.

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow \psi(\vec{r} + \vec{a}) = \psi(\vec{r}) + \vec{a} \frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} \Big|_{\vec{r} = \vec{a}} + \dots \quad (11.6)$$

Əgər ψ funksiyası klassikəbənzər funksiya olarsa,

$$\psi(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar} I(\vec{r})}$$

$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}}$ ifadəsini hesablamış olsaq

$$\frac{\partial \psi}{\partial \vec{r}} = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} e^{\frac{i}{\hbar} I(\vec{r})} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial I}{\partial \vec{r}} e^{\frac{i}{\hbar} I(\vec{r})} \quad (11.7)$$

əldə edərik.

Bəllidir ki, klassik fizikada impuls, təsir inteqralının fəzada dəyişməsi kimi, yəni təsir inteqralının qradientidir. Bunu nəzərə alsaq

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} I(\vec{r}) = \vec{\nabla} I = \vec{p} \quad (11.8)$$

olur. Onda (11.7)-dən

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \psi = \frac{i}{\hbar} \vec{p} \psi$$

Buradan da

alınar.

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (11.9)$$

əldə edilir.

Beləliklə, üç dənə impuls operatoru almış oluruq:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (11.10)$$

Bu operatorlar bir-birləri ilə komutasiya edən operatorlardı

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \hat{p}_y - \hat{p}_y \hat{p}_x &= [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 \\ \hat{p}_y \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{p}_y &= [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0 \\ \hat{p}_z \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{p}_z &= [\hat{p}_z, \hat{p}_x] = 0 \end{aligned} \quad (11.11)$$

Lakin koordinat x, y, z operatorları ilə uyğun $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ operatorları komutasiya etmir, ancaq çarpaz uyğun komponentlər komutasiya edər. Məsələn,

$$(x\hat{p}_x - \hat{p}_x x)\psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi - x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = i\hbar \psi$$

$$(x\hat{p}_y - \hat{p}_y x)\psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} x \right) \psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = 0$$

alınar.

Deməli

$$\begin{aligned} x\hat{p}_x - \hat{p}_x x &= [x, \hat{p}_x] = i\hbar, [x, \hat{p}_y] = [x, \hat{p}_z] = 0 \\ y\hat{p}_y - \hat{p}_y y &= [y, \hat{p}_y] = i\hbar, [y, \hat{p}_x] = [y, \hat{p}_z] = 0 \\ z\hat{p}_z - \hat{p}_z z &= [z, \hat{p}_z] = i\hbar, [z, \hat{p}_x] = [z, \hat{p}_y] = 0 \end{aligned} \quad (11.12)$$

münasibətlərini əldə edərək.

İndi də impuls operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiya-sını tapağın. Bunun üçün öncə məxsusi qiymət və məxsusi funksiya tənliyini yazaq:

$$\hat{p} \psi_p(\vec{r}) = -i\hbar \vec{\nabla} \psi_p(\vec{r}) = \vec{p} \psi_p(\vec{r}) \quad (11.13)$$

Və uyğun birləşənlərin ödədiyi tənliklərin

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{\partial \psi_{p_x}(\vec{r})}{\partial x} &\equiv \hat{p}_x \psi_{p_x}(\vec{r}) = p_x \psi_{p_x}(\vec{r}) \\
-i\hbar \frac{\partial \psi_{p_y}(\vec{r})}{\partial y} &\equiv \hat{p}_y \psi_{p_y}(\vec{r}) = p_y \psi_{p_y}(\vec{r}) \\
-i\hbar \frac{\partial \psi_{p_z}(\vec{r})}{\partial z} &\equiv \hat{p}_z \psi_{p_z}(\vec{r}) = p_z \psi_{p_z}(\vec{r})
\end{aligned} \tag{11.14}$$

həllini

$$\psi_p(\vec{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \tag{11.15}$$

şəklində axtaraq. Onda

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{dX(x)}{dx} Y(y)Z(z) &= p_x X(x)Y(y)Z(z) \\
-i\hbar \frac{dX(x)}{dx} &= p_x X(x) \\
-i\hbar \frac{dY(y)}{dy} &= p_y Y(y) \\
-i\hbar \frac{dZ(z)}{dz} &= p_z Z(z)
\end{aligned} \tag{11.16}$$

olar. Buradan

$$\frac{dX(x)}{X(x)} = \frac{1}{i\hbar} p_x dx, \quad \frac{dY(y)}{Y(y)} = \frac{1}{i\hbar} p_y dy, \quad \frac{dZ(z)}{Z(z)} = \frac{1}{i\hbar} p_z dz \tag{11.17}$$

olduğu üçün

$$\begin{aligned}
X(x) &= e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \\
Y(y) &= e^{\frac{i}{\hbar} p_y y} \\
Z(z) &= e^{\frac{i}{\hbar} p_z z}
\end{aligned} \tag{11.18}$$

alınar.

Yəni

$$\begin{aligned}
\psi_{p_x} &= f_1(y, z) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x} \\
\psi_{p_y} &= f_2(x, z) e^{\frac{i}{\hbar} p_y y}
\end{aligned} \tag{11.19}$$

$$\psi_{p_z} = f_3(x, y) e^{\frac{i}{\hbar} p_z z} \quad \text{olar.}$$

Bu həllər impulsun $-\infty < P_y < +\infty$ və $-\infty < P_z < +\infty$ qiymətlərində yararlı həll olur. (11.19)-da $f_1(y, z), f_2(x, z), f_3(x, y)$ funksiyaları ixtiyari funksiyalardır.

Buradan (11.13)-n həlli

$$\psi_p(\vec{r}) = C e^{\frac{i}{\hbar}(p_x X + p_y Y + p_z Z)} = C e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \quad (11.20)$$

əldə edilir.

İmpulsun $-\infty < P < +\infty$ kəsilməz qiymətlərində ψ_p -nin dalğa funksiyası olmasını saxlar (kəsilməz, birqiymətli, sonlu qalar). İmpuls kəsilməz məxsusi qiymətlər aldığına görə, (11.20) məxsusi funksiyaları δ -funksiyaya normallanan funksiya olar (bax (5.10) və (5.11)-ə)

$$\int \psi_p^*(\vec{r}) \psi_{p'}(\vec{r}) dV = \delta(p' - p) \quad (11.21)$$

Buradan

$$|C|^2 \int e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}' - \vec{p}) \vec{r}} dV = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$$

$$\delta(\vec{p}' - \vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{p}' - \vec{p}) \vec{r}} d\vec{r}$$

$$C = (2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}$$

tapırıq. Beləliklə, impuls operatorunun məxsusi funksiyası

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \quad (11.22)$$

Bu zaman impuls $-\infty < \vec{P} < +\infty$ kəsilməz qiymətlər almış olar.

§12. Enerji operatoru, Şrödinger tənliyi

Dalğa funksiyasının sistemin halını xarakterizə etməsinə müvafiq olaraq, halın zamana görə dəyişməsi də dalğa funksiyasının zamanla dəyişməsi ilə təyin olunur. Bunu göstərmək üçün fərz edək

ki, dalğa funksiyası zamana bağlıdır. t -anında sistemin halı $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyası ilə xarakterizə olunursa, $t' = t + t_0$ anında da $\psi(\vec{r}, t')$ funksiyası ilə xarakterizə olunar. Əgər $\psi(\vec{r}, t')$ funksiyasını Teylor sırasına ayırırsaq:

$$\psi(\vec{r}, t + t_0) = \psi(\vec{r}, t) + t_0 \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) + \dots \quad (12.1)$$

olar. Bu sıranı

$$\psi(\vec{r}, t + t_0) = \sum \frac{t_0^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \psi(\vec{r}, t) = e^{t_0 \frac{\partial}{\partial t}} \psi(\vec{r}, t) \quad (12.2)$$

kimi də yazmaq imkanında da olarıq. $\psi(\vec{r}, t)$ və $\psi(\vec{r}, t')$ funksiyaları eyni bir halı ifadə edən funksilardır. $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyasını kvaziklassik funksiya kimi qəbul etsək

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{i}{\hbar} I(\vec{r}, t)} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial I}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

yaza bilərik.

Klassik mexanikadan $-\frac{\partial I}{\partial t} = H$ hamilton funksiyası olması bəllidir

və

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H \psi \quad (12.3)$$

əldə edilə bilər. Buradan

$$\hat{H} \equiv \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (12.4)$$

yazırıq. (12.4) ifadəsi enerji operatorudur ki, buda Hamiton operatoruna bərabərdir. Hamiton operatoru relyativistik olmayan ($v \ll c$) halda kinetik və potensial enerji operatorlarının toplamıdır:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + U(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z) \quad (12.5)$$

(12.3)-ə görə

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (12.6)$$

Bu tənliyi Şrödinger tənliyi deyilir. Şrödinger tənliyinə görə Hamilton operatorunun dalğa funksiyasına təsiri sistemin halının zamana görə dəyişməsinə verir. Bu tənlik kvant mexanikasının əsas tənliyidir.

Əgər Hamilton operatoru zamandan asqar şəkildə asılı deyilsə, $\psi(\vec{r}, t)$ -ni

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\varphi(t) \quad (12.7)$$

kimi yazırıq və onu (12.6)-da yerinə yazaraq

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} \psi(\vec{r}) = \hat{H}\psi(\vec{r})\varphi(t)$$

əldə edərik. Buradan

$$\frac{i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt}}{\varphi(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = E$$

iki müxtəlif dəyişənlərdən asılı olan ifadələrin bir-birinə bərabər olması üçün, onların bir sabitə bərabər olması lazımdı. Bu sabitə E deyəriksə

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} = E\varphi(t) \quad (12.8)$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

yazılar.

(12.4) görə (12.8)-in brincisindən E-nin tam enerji olması aydın olur. (12.8)-in birinci tənliyindən

$$i\hbar \int \frac{d\varphi(t)}{\varphi(t)} = E \int dt$$

$$i\hbar \ln \varphi(t) = Et \quad (12.9)$$

$$\varphi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

olur.

(12.9) ifadəsində zamana baqlılıqlı E enerjisi ilə təyin olunur. (12.8) ifadəsində

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (12.10)$$

tənliyinə stasionar (qərarlı) hal üçün Şrödinger tənliyi deyilir. İstənilən halın dalğa funksiyasını stasionar halların

$$\psi_s(\vec{r}, t) = \psi_s(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

dalğa funksiyaların superpozisiyası kimi yazırıq:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r}, t)$$

diskret spektr olanda,

$$\psi(\vec{r}, t) = \int a(E) \psi_s(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dE \quad (12.11)$$

kəsilməz spektr olanda alırıq.

Stasionar halda ehtimal sıxlığı zamandan asılı deyil. Doğrudanda stasionar halın ehtimal sıxlığı

$$W = |\psi_s(\vec{r}, t)|^2 = \left| \psi_s^*(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \psi_s(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \right| = \quad (12.12)$$

$$\psi_s^*(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}) = |\psi_s(\vec{r})|^2$$

zamandan asılı olmaz.

Eyni zamanda fiziki kəmiyyətin orta qiyməti

$$\bar{F} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dV$$

zamandan asılı deyil. Həqiqətən orta qiymət

$$\bar{F} = \int \psi_s^*(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \hat{F} \psi_s e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dV = \int \psi_s^*(\vec{r}) \hat{F} \psi_s(\vec{r}) dV \quad (12.13)$$

olar və operatoru zamana bağlı olmazsa, onda

$$\bar{F} = \int \psi_s^*(\vec{r}) \hat{F} \psi_s(\vec{r}) dV$$

asılı deyildir. Eləcə də dinamik dəyişənin hər hansı bir qiymət alma ehtimalı zamandan asılı olmaz. Doğrudanda

$$\begin{aligned} W(F_n) &= |a(F_n)|^2 = \left| \int \psi_{F_n}^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) dV \right|^2 = \\ &= \left| \int \psi_{F_n}^*(\vec{r}) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} dV \right|^2 = \left| \int \psi_{F_n}^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) dV \right|^2 \end{aligned} \quad (12.14)$$

alınar. Stasionar halda sistemin halının zamandan asılılığı enerji ilə müəyyən olunur.

§13. Kvant mexanikasının hərəkət tənliyi

Kvant mexanikasında hərəkət tənliyini almaq üçün fiziki kəmiyyətin orta qiyməti düsturundan

$$\bar{F} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dx dy dz$$

istifadə etmək mümkündür. Burada yalnız

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \frac{d\bar{F}}{dt} \quad (13.1)$$

şərtini, yeni kəmiyyətin dəyişmə sürətinin orta qiymətinin, orta qiymətin zamana görə dəyişməsinə bərabərlik şərtini qəbul edək. Burada

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \frac{d\hat{F}}{dt} \psi(\vec{r}, t) dx dy dz \quad (13.2)$$

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = \frac{d}{dt} \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dx dy dz$$

olduğu üçün

$$\int \psi^*(\vec{r}, t) \frac{d\hat{F}}{dt} \psi(\vec{r}, t) dV = \frac{d}{dt} \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dV \quad (13.3)$$

yazarıq. Buradan

$$\int \psi^*(\vec{r}, t) \frac{d\hat{F}}{dt} \psi(\vec{r}, t) dV = \int \frac{d}{dt} (\psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) dV) = \int \left\{ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} dV \quad (13.4)$$

əldə edərik.

(12.6)-dən Şçödinger tənliyinə görə

$$\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(\vec{r}, t) \quad (13.5)$$

və (12.6)-nin qoşması olan

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = H^* \psi^*(\vec{r}, t)$$

tənliyindən

$$\frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \psi^*(\vec{r}, t) \quad (13.6)$$

yaza bilərik. (13.5) və (13.6)-ni (13.4)-də yerinə yazmış olursak (13.4) ifadəsi

$$\begin{aligned} & \int \psi^*(\vec{r}, t) \frac{d^{\wedge} F}{dt} \psi(\vec{r}, t) dV = \\ & = \int \left\{ \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) + \frac{1}{i\hbar} \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \hat{H} \psi(\vec{r}, t) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} \psi(\vec{r}, t) \right\} dV \end{aligned}$$

şəklinə düşər.

Hamilton operatorunun ermitlik şərtini nəzərə alsaq

$$\int \hat{H}^* \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) dV = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{H} \psi(\vec{r}, t) dV$$

onda alınan ifadəni

$$\int \psi^*(\vec{r}, t) \frac{d^{\wedge} F}{dt} \psi(\vec{r}, t) dV = \int \psi^*(\vec{r}, t) \left\{ \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{F} \hat{H} - \hat{H} \hat{F}) \right\} \psi(\vec{r}, t) dV$$

şəklində göstərə bilərik. Buradan

$$\frac{d^{\wedge} F}{dt} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i} (\hat{F} \hat{H} - \hat{H} \hat{F}) \quad (13.7)$$

alınar. (13.7) tənliyinə kvant mexanikasının hərəkət tənliyi deyilir. (13.7) tənliyində

$$\frac{1}{i\hbar} (\hat{F} \hat{H} - \hat{H} \hat{F}) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}] \quad (13.8)$$

ifadəsi Puasonun kvant mötərizəsi adlanır.

Burada əgər operator. c ~~h~~ ~~an~~ ~~dan~~ aşkar şəkildə asılı olmazsa,

$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0$ və eyni zamanda \hat{F} operatoru Hamilton operatoru

ilə komitasiya edərsə

$$\hat{F} \hat{H} - \hat{H} \hat{F} = 0, \hat{F} \hat{H} = \hat{H} \hat{F} \quad (13.9)$$

onda

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = 0 \quad (13.10)$$

olar.

Yəni

$$\frac{d\bar{F}}{dt} = 0, \bar{F} = const.$$

olur. Deməli, $\frac{d\hat{F}}{dt} = 0, [\hat{F}, \hat{H}] = 0$ olarsa, fiziki kəmiyyət saxlanan kəmiyyətdir. Məsələn, enerji operatoru olan Hamilton operatorunun $\frac{d\hat{H}}{dt} = 0, [\hat{H}, \hat{H}] = 0$ olmasından enerji dəyişəni saxlanılır, sferik simmetrik sahədə hərəkət miqdarı momentinin kvadratı və onun proeksiyası

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{L}^2}{\partial t} = 0 \quad \text{və} \quad [\hat{L}^2, \hat{H}] = 0 \\ \frac{\partial L_z}{\partial t} = 0 \quad \text{və} \quad [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \end{aligned} \quad (13.11)$$

olduğu üçün

$$\begin{aligned} \bar{L}^2 = const \\ \bar{L}_z = const \end{aligned} \quad (13.12)$$

olurlar, yəni L^2 və L_z sferik simmetrik sahədə saxlanılır.

§14. Kəsilməzlik tənliyi

Universal saxlanma qanunlarından olan yükün və maddə miqdarının saxlanması qanunu kvant mexanikasının əsas tənliyi olan Şödinger tənliyində öz əksini tapmışdır.

Belə ki, (12.6) ifadəsinə uyğun olaraq

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi(\vec{r}, t)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} + \Delta^2 + U \right) \psi^*(\vec{r}, t) \quad (14.1)$$

yaza bilirik. Bu tənliklərin hər tərəfini uyğun olaraq birincini $\psi^*(\vec{r}, t)$ ikincini isə $\psi(\vec{r}, t)$ soldan vurub, tərəf-tərəfə çıxaraq:

$$\begin{aligned} i\hbar \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + i\hbar \psi(\vec{r}, t) \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \\ = \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi^*(\vec{r}, t), \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, t)) - \\ - \psi^*(\vec{r}, t) U \psi(\vec{r}, t) + \psi(\vec{r}, t) U \psi^*(\vec{r}, t) \\ i\hbar \frac{\partial W}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) - \psi U \psi^* + U \psi^* \psi \end{aligned}$$

Buradan

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2im} \vec{\nabla} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (14.2)$$

olar.

$$\text{Əgər} \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (14.3)$$

$$W = \psi^* \psi$$

işarə qəbul etsək, (14.2)-dən

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\vec{\nabla} \vec{j}$$

və ya

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \vec{\nabla} \vec{j} = 0 \quad (14.4)$$

əldə edirik.

(14.4) tənliyinə kəsilməzlik tənliyi deyilir. (14.4)-də W ehtimal sıxlığı, \vec{j} cərəyanın ehtimal sıxlığı adlanır.

Əgər W -ni və \vec{j} -ni elektrik yükünə vursaq

$$W_e \equiv \rho_e = e|\psi|^2$$

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (14.5)$$

kəsilməzlik tənliyi

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_e = 0 \quad (14.6)$$

alarıq. Bu (14.6) ifadəsi elektrik yükünün saxlanması qanununu göstərir. Çünki,

$$\int \frac{\partial \rho_e}{\partial t} dV + \int \text{div} \vec{j}_e dV = 0$$

inteqrallama bütün fəza üzrə olduğuna görə

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho_e dV = - \oint \vec{j}_e d\vec{s} \quad (14.6)$$

yaza bilərik və sonsuz həcmi əhatə edən səthdən keçən selin miqdarı sıfır olar. Onda

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho_e dV = 0$$

olar. Buradan

$$Q = \int \rho_e dV = \text{const} \quad (14.7)$$

olur. Yəni tam elektrik yükü saxlanılır

$$Q = \text{const} \quad (14.8)$$

Eyni yolla (14.3)-ü kütlə m-ə vursaq

$$W_n \equiv \rho_m = m|\psi|^2,$$

$$\vec{j}_m = \frac{\hbar}{2i} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad (14.9)$$

maddə miqdarını xarakterizə edən maddə sıxlığını və maddənin selini alarıq və bu da maddənin miqdarının saxlanması qanununu olar. Yəni

$$\frac{\partial W_m}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_m = 0 \quad (14.9)$$

$$\frac{\partial W_m}{\partial t} = 0, \bar{M}_m = \text{const.} \quad (14.10)$$

olur.

Deməli, maddə miqdarının və yükün saxlanması qanunu Şödinger tənliyində öz əksini tapmaqdadır.

§15. Erenfest teoremləri

Kvant mexanikasında zaman keçdikcə impuls və koordinatın dəyişmə qanunauyğunluğunu tapa bilmək lazımdır. Koordinat və impuls operatorları zamandan aşkar şəkildə asılı olmadığına görə hərəkət tənlikləri

$$\begin{aligned} \frac{\hat{d}\vec{r}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}, \hat{H}] \\ \frac{\hat{d}\hat{P}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{P}, \hat{H}] \end{aligned} \quad (15.1)$$

kimi yazılar. (15.1) ifadələri klassik Hamilton tənliklərinə analogi tənliklərdi, yalnız (15.1) ifadələri operatorlu tənliklər şəklindədir. Bu tənliklər sürət ilə impuls arasında və impulsun zamana görə dəyişimini göstərir. (15.1) birincisindən

$$\begin{aligned} [x, \hat{H}] &= \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{p}_x^2 X - X \hat{p}_x^2) \\ [y, \hat{H}] &= \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{p}_y^2 Y - Y \hat{p}_y^2) \\ [z, \hat{H}] &= \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{p}_z^2 Z - Z \hat{p}_z^2) \end{aligned} \quad (15.2)$$

alınır. Buradan

$$[\vec{r}, \hat{H}] = \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{p}^2 \vec{r} - \vec{r} \hat{p}^2) \quad (15.3)$$

yazmaq olar. (15.3) ifadəsində

$$\hat{p}^2 \vec{r} - \vec{r} \hat{p}^2 = -2i\hbar \hat{P} \quad (15.4)$$

alınar və

$$[\vec{r}, \hat{H}] = \frac{\hat{P}}{m} \quad (15.5)$$

əldə edirik.
Beləliklə

$$\frac{\Delta \vec{r}}{dt} = \frac{\hat{P}}{m} \quad (15.6)$$

almır.

Eyni qayda ilə (15.1) ikincisindən

$$\begin{aligned} \frac{\Delta P_x}{dt} &= -\frac{\partial U}{\partial x} \\ \frac{\Delta P_y}{dt} &= -\frac{\partial U}{\partial y} \end{aligned} \quad (15.7)$$

$$\frac{\Delta P_z}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

yaza bilərik. Yəni

$$\frac{\Delta \vec{P}}{dt} = -\vec{\nabla} U \quad (15.8)$$

olar.

(15.6) və (15.8)-ə görə

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int \psi^* \vec{r} \psi dV &= \frac{1}{m} \int \psi^* \hat{P} \psi dV \\ \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{P} \psi dV &= - \int \psi^* \vec{\nabla} U \psi dV \end{aligned} \quad (15.9)$$

(15.9) ifadələri Erenfest teoremləri adlanır. Yə'ni, klassik fizikadan fərqli olaraq, kvant mexanikasında fəza koordinatının və impulsun dəyişməsi orta qiymət anlamında istifadə olunur. Yə'ni

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m},$$

$$\frac{d\bar{P}}{dt} = -\text{grad}U \quad (15.10)$$

olar. Əgər potensialın qradienti çox az dəyişimə məruz qalarsa, onda bütün fəza üzrə potensialın dəyişimi az olar və klassik fizikada olan tənliyi, yəni Nyutonun ikinci qanununu alarıq.

§16. Şrödinger tənliyindən Hamilton-Yakobi tənliyinin alınması

Kvant mexanikası ilə klassik mexanika arasında olan əlaqə Hamilton- Yakobi tənliklərinin, Şchödinger tənliyinin xüsusi hali olmasında daha qabarıq şəkildə özünü göstərir. Mə'lumdur ki, Hamilton- Yakobi tənliyi

$$E - \frac{P^2}{2m} - U = 0 \quad (16.1)$$

şəklindədir. Əgər fərz etsək ki, dalğa funksiyası klassikəbənzər dalğa funksiyasıdır

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}I(\vec{r},t)} \quad (16.2)$$

(burada $a=1$ qəbul olunub). İxtiyari hal üçün Şödinger tənliyini

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi(\vec{r},t) \quad (16.3)$$

şəklində yazmaq.

(12.4) ifadəsinə görə tam enerji

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

olduğu üçün

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi = E\psi$$

tənliyini alarıq. (16.2) kvaziklassi dalğa funksiyasını burada yerinə yazmış oluruqsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 e^{\frac{i}{\hbar}I} + U e^{\frac{i}{\hbar}I} = E e^{\frac{i}{\hbar}I} \quad (16.4)$$

alarıq. (16.4)-də ∇^2 ilə ψ funksiyaya təsirini hesablasaq

$$\begin{aligned}\nabla^2 e^{\frac{i}{\hbar}I} &= \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} e^{\frac{i}{\hbar}I} = \vec{\nabla} \left(\frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} I e^{\frac{i}{\hbar}I} \right) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \nabla^2 I e^{\frac{i}{\hbar}I} + \frac{i}{\hbar} \frac{i}{\hbar} \vec{\nabla} I \cdot \vec{\nabla} I e^{\frac{i}{\hbar}I} = \\ &= \frac{i}{\hbar} \nabla^2 I e^{\frac{i}{\hbar}I} - \frac{1}{\hbar} (\vec{\nabla} I)^2 e^{\frac{i}{\hbar}I}\end{aligned}$$

əldə edərik. Bu ifadələri yerinə yazsaq

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 I + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} I)^2 + U = E \quad (16.5)$$

Klassik mexanikadan mə'lumdur ki,

$$\vec{\nabla} I = \text{grad} I = \vec{P}$$

olur. Bunu nəzərə alsaq

$$\begin{aligned}\frac{P^2}{2m} + U - \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} I \cdot \vec{\nabla} I &= E \\ E - \frac{P^2}{2m} - U + \frac{i\hbar}{2m} \text{div} \vec{P} &= 0\end{aligned}$$

Və ya

$$E - \frac{P^2}{2m} - U + i\hbar \frac{\text{div} \vec{P}}{2m} = 0 \quad (16.6)$$

əldə edərik.

(16.6) tənliyinə kvaziklassik və ya klassikəbənzər tənlik deyilir. Bu tənlik Hamilton-Yakobi tənliyi (16.1) tənliyindən sonuncu hədlə fərqlənir. Əgər

$$\frac{P^2}{2m} \gg \frac{\hbar}{2m} |\text{div} \vec{P}| \quad (16.7)$$

olursa, (16.6) tənliyindən \hbar ilə proporsional həddi nəzərə almarıqsa, Hamilton-Yakobi tənliyi alınır. (16.7)-dən

$$P^2 \gg \hbar \frac{dP}{dx}$$

olur.

Yəni, impulsun kvadratının impulsun qradientindən çox-çox böyük olması halında klassik qanunauyğunluqla kifayətlənmək olar. Bir başqa deyimlə, impulsun dəyişməsi, kinetik enerjiyə nisbətən çox kiçik olarsa, klassik mexanikanın tətbiqi qənaətbəxş hesab oluna

bilər və ya fəzada dalğa uzunluğu $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$ kəskin olmayaraq dəyişərsə, yəni

$$\frac{d\lambda}{dx} \ll 2\pi$$

olarsa, Şhödinger tənliyinin təqribi həlli, klassik mexanikanın müddəaları ilə uzlaşan nəticələr verir.

§17. İmpuls momenti operatorunun aşkar şəklinin alınması, onun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası

Kvant mexanikasında əsas operatorlardan birisidə impuls momenti operatorudur. Bu operatorun nə cürə operator olduğunu tapmaq üçün fəzanın izotoplugundan istifadə edək və fərz edək ki, dalğa funksiyası koordinatın funksiyası olur. Qapalı sistem üçün fəzanın bütün istiqamətləri eyni hüquqlu olduğuna görə fəzada sonsuz kiçik dönüşümə baxarıqsa, $\psi(\vec{r})$ və $\psi(\vec{r}')$ dalğa funksiyası eyni halı xarakterizə edir. Burada \vec{r}' dəyişənin dönməyə məruz qalan radius vektoru

$$\vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{r} = \vec{r} + [\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{r}]$$

şəklində olar. İndi $\psi(\vec{r}')$ -i $\delta\vec{r}$ ətrafında sıraya ayrılırsa

$$\psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \delta\vec{r} \left. \frac{\partial \psi(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \right|_{\vec{r} = \delta\vec{r}} + \dots \quad (17.1)$$

yazıla bilər. Onda

$$\psi(\vec{r}') = \left(1 + [\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{\nabla}] \right) \psi(\vec{r}), \quad \left(\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right)$$

və

$$[\delta\vec{\varphi} \cdot \vec{\nabla}] = \delta\vec{\varphi} \cdot [\vec{r} \cdot \vec{\nabla}] = \delta\varphi_x [\vec{r} \cdot \vec{\nabla}]_x + \delta\varphi_y [\vec{r} \cdot \vec{\nabla}]_y + \delta\varphi_z [\vec{r} \cdot \vec{\nabla}]_z \quad (17.2)$$

olduğu üçün $\delta\varphi_x, \delta\varphi_y$ və $\delta\varphi_z$ bucaqları x, y və z oxları ətrafında aonsuz kiçik dönmə bucaqlarıdır. (17.2) düsturunda

$$[\vec{r}\vec{\nabla}]_x = y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y},$$

$$[\vec{r}\vec{\nabla}]_y = z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z},$$

$$[\vec{r}\vec{\nabla}]_z = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x},$$

olur.

Əgər (17.2)-ni $+i\hbar$ -a vurub və bölsək

$$i\hbar\frac{1}{i\hbar}\delta\vec{\varphi}[\vec{r}\vec{\nabla}] = \frac{i}{\hbar}(-i\hbar)\delta\vec{\varphi}[\vec{r}\vec{\nabla}]$$

alarıq ki, burada \hat{L} operatoruna

$$\hat{L} = -i\hbar[\vec{r}\vec{\nabla}] = [\vec{r}\hat{p}] \quad (17.3)$$

kimi baxa bilərik və bu operatora impuls momenti operatoru deyilir. Buradan üç dənə impuls momenti operatoru

$$\hat{L}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y,$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z,$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, \quad (17.4)$$

olur ki, bunlar bir-birləri ilə komutasiya etməyən operaorlardır. Məsələn, örnek üçün L_x və L_y operatorlarına baxarsaq

$$\begin{aligned} \hat{L}_x\hat{L}_y - \hat{L}_y\hat{L}_x &= (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = \\ &= y\hat{p}_z z\hat{p}_x - z\hat{p}_y z\hat{p}_x - y\hat{p}_z x\hat{p}_z + z\hat{p}_y x\hat{p}_z - z\hat{p}_x y\hat{p}_z + x\hat{p}_z y\hat{p}_z + z\hat{p}_x z\hat{p}_y - \\ &- x\hat{p}_z z\hat{p}_y = y\hat{p}_x \hat{p}_z z - y\hat{p}_x z\hat{p}_z + x\hat{p}_y z\hat{p}_z - x\hat{p}_y \hat{p}_z z = y\hat{p}_x (\hat{p}_z z - z\hat{p}_z) + \\ &+ x\hat{p}_y (z\hat{p}_z - \hat{p}_z z) = -i\hbar y\hat{p}_x + i\hbar x\hat{p}_y = i\hbar(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = i\hbar\hat{L}_z \end{aligned}$$

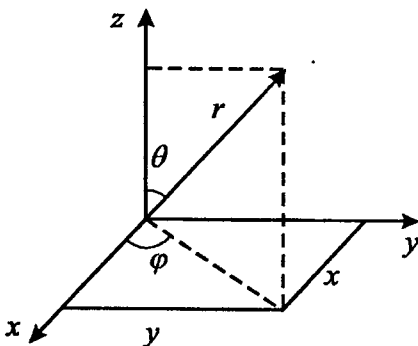
olur. Eyni yolla

$$\begin{aligned}
[L_y, L_z] &= \hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y = i\hbar \hat{L}_x \\
[L_z, L_x] &= \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_y \\
[L_x, L_y] &= \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z
\end{aligned}
\tag{17.5}$$

münasibətlərində alırıq.

Buradan görünür ki, L_x, L_y və L_z operatorları komutasiya etməzlər, yəni onların ortağ məxsusi funksiyaları yoxdur, onlar tam fiziki kəmiyyətlər çoxluğu təşkil etməzlər. Bu baxımdan, əlverişli olur ki, L_x, L_y və L_z operatorlar əvəzinə \hat{L}^2 və impuls momentinin hər hansı bir birləşəni, məsələn, \hat{L}_z işləncisindən istifadə olunur. \hat{L}^2 və \hat{L}_z operatorları komutasiya edən operatorlar olub L^2 və L_z fiziki kəmiyyətləri tam fiziki kəmiyyətlər çoxluğu təşkil edirlər. İmpuls momenti operatoru dönmə ilə əlaqədar olduğu üçün onları sferik koordinatlarda yazmaq lüzumu meydana gəlir. Dekart koordinat sistemindən sferik koordinat sisteminə keçid bu cürə aparılır. $(x, y, z \rightarrow r, \theta, \varphi)$ (şəkil 1.5)

$$\begin{aligned}
x &= r \sin \theta \cos \varphi \\
y &= r \sin \theta \sin \varphi \\
z &= r \cos \theta
\end{aligned}
\tag{17.6}$$



Şəkil 1.5. Sferik koordinata keçid

Burada

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x}, \cos \theta = \frac{z}{r}$$

Və ya

$$\theta = \arccos \frac{z}{r}, \varphi = \arctg \frac{y}{x}$$

olur. Buradan

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{2x}{2\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \end{aligned} \quad (17.7)$$

Onda

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \text{olar.}$$

Eyni qayda ilə $\frac{\partial}{\partial y}$ – də yazarıq.

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial y}$$

yazılar və

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi, \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r}, \frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta}$$

olduğu üçün

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (17.8)$$

ifadəsini almış oluruq.

$\frac{\partial}{\partial z}$ – törəməsini də sferik koordinatlara görə yazmış olursaq

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta, \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$
(17.9)

tapanıq. (17.7)-(17.9) ifadələrinin cəmi

$$\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} = \sin\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \cos\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin\varphi}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} +$$

$$+ \sin\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \sin\varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\varphi}{r \sin\theta} + \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

verir. (17.4) ifadəsində $\frac{\partial}{\partial x}$, $\frac{\partial}{\partial y}$ və $\frac{\partial}{\partial z}$ -ləri yerinə, (17.7),(17.8) və

(17.9) ifadələrini yazarıqsa

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$
(17.10)

alırıq. Buradan (17.10)-a görə

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

əldə edirik .

Beləliklə, sferik koordinat sistemində \hat{L}_x , \hat{L}_y , \hat{L}_z və \hat{L}^2 operatorları

$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$
(17.12)

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$
(17.13)

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (17.14)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (17.15)$$

şəkilində təyin olunur.

\hat{L}_z və \hat{L}^2 operatorları φ və θ -dan asılı operatorlar olduğu üçün, dalğa funksiyasının φ və θ - dan asılılığını qəbul etmək kifayətdir. Məhz buna görə \hat{L}^2 və \hat{L}_z operatorlarının məxsusi qiyməti

$$\hat{L}^2 \psi(\theta, \varphi) = L^2 \psi(\theta, \varphi) \quad (17.16)$$

$$\hat{L}_z \psi(\theta, \varphi) = L_z \psi(\theta, \varphi) \quad (17.17)$$

tənliklərindən tapılmalıdır. İndi əgər göstərsək ki, bu tənliklərin həlli eyni funksiyadır, onda bu operatorlar biri digəri ilə komutasiya edirlər. Öncə (17.17) tənliyinin həllinə baxaq.

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(\varphi)}{\partial \varphi} = L_z \psi$$

ψ funksiyası yalnız φ -dən asılı olduğu üçün

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi$$

$$\frac{\partial \psi}{\psi} = i \frac{L_z}{\hbar} d\varphi,$$

yazılar. Bunu inteqrallasaq

$$\frac{\partial \psi}{\psi} = i \frac{L_z}{\hbar} d\varphi, \quad \psi_{L_z} = e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi}$$

alırıq. Ümumi həll

$$\psi_{L_z} = A e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi}$$

olur. Burada $\frac{L_z}{\hbar} = m$ ədədi olduqda $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ qiymətləri alır və həll

$$\psi_{L_z} = Ae^{im\varphi}$$

kimi yazılar.

Deməli, $L_z = \hbar m$ qiymətləri alır və m -ə maqnit kvant ədədi deyilir və orbital momentin proeksiyasını təyin edir. İmpuls momentinin z -birləşəni

$$L_z = 0$$

$$L_z = \pm \hbar$$

$$L_z = \pm 2\hbar$$

və sairə diskret qiymətləri alır. Yə'ni, L_z dinamik dəyişəni kvantlanır. Bu kvantlanma da m ədədinin impuls momentinin proeksiyasının təyin edən bir kəmiyyət olaraq, fiziki mə'nə daşması aydındır. Dalga funksiyasının normalizə olunması şərtinə görə

$$\int_0^{2\pi} |\psi_{L_z}|^2 d\varphi = 1$$

yazılar. Buradan

$$\int_0^{2\pi} |Ae^{im\varphi}|^2 d\varphi = |A|^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im\varphi} d\varphi = 2\pi |A|^2 = 1$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

alırıq. Onda \hat{L}_z -in məxsusi funksiyası

$$\psi_{L_z} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad (7.18)$$

və məxsusi qiyməti $L_z = \hbar m$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ olar.

İndidə \hat{L}^2 operatorunun məxsusi funksiyası və məxsusi qiymətini tapaq. \hat{L}^2 -nin tənliyi (17.16)-ya görə

$$\hat{L}^2 \psi = L^2 \psi$$

Yəni

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi = L^2 \psi$$

Bu tənliyin həllini

$$\psi = \Phi(\varphi) \Theta(\theta) \quad (17.19)$$

şəklində axtaraq (17.19) həlli (17.16) - da yerinə yazarsaq

$$\frac{\Phi(\varphi)}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta}{d\theta} \right) + \frac{\theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \frac{L^2}{\hbar^2} \theta(\theta) \Phi(\varphi) = 0$$

və ya

$$\frac{\sin \theta}{\theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{L^2}{\hbar^2} \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \quad (17.20)$$

alarıq. (17.20)-dən göründüyü kimi bu tənliyin soldakı qismisi yalnız θ -nin, sağdakı qismisi isə φ -nin funksiyasıdır. Onda onlar bir-birinə bərabər olduğu üçün (17.20) bərabərliyi bir sabitə bərabər olar. Bu sabitə λ^2 deyək. Onda

$$-\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = \lambda^2 \quad (17.21)$$

yazmaq olar və buradan

$$\Phi_m = e^{im\varphi} \quad (\lambda = m) \quad (17.22)$$

taparıq. Tapılan (17.22) həlli L_z operatorunun da məxsusi funksiyasına uyğun gəlir. (17.20)-nin sol tərəfi

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{L^2}{\hbar^2} \sin^2 \theta \theta(\theta) = \lambda^2 \theta(\theta) \quad (17.23)$$

və ya

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \theta(\theta) = 0$$

olur. $z = r \cos \theta$ olduğu üçün

$$\frac{d\psi}{d\theta} = \frac{dz}{d\theta} \frac{d\psi}{dz} = -\sin \theta \frac{d\psi}{dz}$$

$$\frac{\sin \theta}{\sin \theta} \frac{d}{dz} \left(-\sin^2 \theta \frac{d\theta(z)}{dz} \right) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) \theta(z) = 0$$

ifadələrindən (17.23) tənliyi

$$\frac{d}{dz} \left((1-z^2) \frac{d\theta(z)}{dz} \right) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} \right) \theta(z) = 0 \quad (17.24)$$

şəklinə düşər. Bu tənlik $z = \pm 1$ qiymətində $\frac{m^2}{1-z^2}$ həddinə görə

$-z^2 \rightarrow \infty$ sonsuza yaxınlaşır və tənlik sinqulyarlığa sahib olur. Sinqulyarlıqdan azad olmaq üçün (17.24)-ün həllini

$$\theta(z) = (1-z^2)^{\nu/2} U(z) \quad (17.25)$$

kimi axtaraq. (17.24)-də bunu yerin yazmış olsaq

$$(1-z^2)U''(z) - (2\nu z + 2z)U'(z) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1-z^2} - \frac{\nu^2 z^2}{1-z^2} - \nu \right) U(z) = 0$$

$$(1-z^2)U''(z) - 2z(1+\nu)U'(z) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \nu + \frac{\nu^2 z^2 - m^2}{1-z^2} \right) U(z) = 0$$

$$U'(z) = \frac{dU(z)}{dz} \quad (17.26)$$

alırıq.

$\nu = m \geq 0$ qiymətində sinulyarlıq aradan qalxır və (17.26) tənliyi

$$(1-z^2)U''(z) - 2z(m+1)U'(z) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - m(m+1) \right) U(z) = 0 \quad (17.27)$$

şəklinə düşər. (17.27) tənliyinin həllini sıra şəklində

$$U(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k \quad (17.28)$$

axtaraq. (17.27) ifadəsində (17.28) sırasını yerinə yazsaq aşağıdakı cəbri tənliyi alırıq:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (k+2)(k+1)a_{k+2} + \left[\frac{L^2}{\hbar^2} - (k+m)(k+m+1) \right] a_k \right\} z^k = 0$$

buradan

$$a_{k+2} = \frac{\frac{L^2}{\hbar^2} - (k+m)(k+m+1)}{(k+1)(k+2)} a_k \quad (17.29)$$

sirasının əmsalları üçün rekurent düstur alınır. Dalğa funksiyası sonlu olmalıdır. Bunun üçün (17.28) sırasının (17.29) əmsalları böyük k qiymətlərində $a_\rho \neq 0$ olar, lakin $a_{\rho+2} = 0$ olmalıdır. Buda o vaxt olar ki,

$$\frac{L^2}{\hbar^2} - (\rho+m)(\rho+m+1) = 0 \quad (17.30)$$

olsun. ($\rho = 0, 1, 2, 3, \dots$)

Əgər $\rho + m = l$ ilə işarə etsək, l -in $0, 1, 2, \dots$ qiymətlər almasını göstərir.

(17.30) -dan

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l=0, 1, 2, \dots \quad (17.31)$$

qiyməti almaq imkanı yaranır. Deməli, impuls momentinin kvadratı operatoru $\hbar^2 l(l+1)$ məxsusi qiymətə sahib olur. (17.31)-dən

$$l = 0, L^2 = 0$$

$$l = 1, L^2 = 2\hbar^2$$

$$l = 2, L^2 = 6\hbar^2 \quad (17.32)$$

$$l = 3, L^2 = 12\hbar^2$$

Beləliklə, l ədədi orbital kvant ədədi adlanır və bu kvant ədədi impuls momentinin kvadratını təyin edən ədəddir. Göründüyü kimi impuls momentinin kvadratı diskret qiymətlər alır. l kvant ədədinin hər bir qiyməti üçün $2l+1$ qədər həll mövcud olur. Ona görə (17.25) ifadsini

$$\theta_l^m(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \quad (17.33)$$

şəklində yazırıq. Burada $P_l^m(\cos\theta)$ funksiyası Lejandr polinomu adlanır və onun ifadəsi (Əlavə B)

$$P_l^m(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!} (1 - \cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|+l}(\cos^2\theta - 1)^l}{d(\cos\theta)^{|m|+l}} \quad (17.34)$$

kimi əldə edilir. (Əlavə ...)

(17.22) ifadəsini də nəzərə alsaq, impuls momentinin kvadratı və momentin z-birləşəninə məxsusi funksiyası

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (17.35)$$

sferik (kürə) funksiya olur. Yə'ni, həm \hat{L}^2 və həm də \hat{L}_z operatorları

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ \hat{L}_z Y_l^m(\theta, \varphi) &= \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (17.36)$$

tənliklərində $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar m$ məxsusi qiymətə və $Y_l^m(\theta, \varphi)$ məxsusi funksiya malik olurlar.

(17.35)-də $P_l^m(\cos\theta)$ funksiyaları kürənin səthində ortonormallıq şərtini ödəyən

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (Y_l^m(\theta, \varphi))^* Y_l^m(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (17.37)$$

funksiyalardır. Sferik funksiyaların xüsusi halda bəziləri l -in və m -in qiymətlərində cədvəl 1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 1.

$$l=0, m=0 \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad |Y_0^0|^2 = \frac{1}{4\pi}$$

$$l=1, m=0 \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \quad |Y_1^0|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta$$

$$l=1, m=+1 \quad Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta e^{i\varphi} \quad |Y_1^1|^2 = \frac{3}{2\pi} \sin^2\theta$$

$$l=1, m=-1 \quad Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta e^{-i\varphi} \quad |Y_1^{-1}|^2 = \frac{3}{2\pi} \sin^2\theta$$

$$l=2, m=0 \quad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right), \quad |Y_2^0|^2 = \frac{5}{4\pi} \left(\frac{3}{2} \cos^2\theta - \frac{1}{2} \right)^2$$

$$l = 2, m = 2 \quad Y_2^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi} \quad |Y_2^2|^2 = \frac{15}{32\pi} \sin^4 \theta$$

$$l = 2, m = 1, Y_2^1 = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \quad |Y_2^1|^2 = \frac{15}{8\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta$$

$$l = 2, m = -1, Y_2^{-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}, |Y_2^{-1}|^2 = \frac{15}{8\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta$$

$$l = 2, m = -2, Y_2^{-2} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}, |Y_2^{-2}|^2 = \frac{15}{32\pi} \sin^4 \theta$$

İndidə impuls momenti ilə Hamilton operatorunun əlaqəsini və Hamilton operatorunun bəzi özəlliklərini araşdıracağıq.

§18. İmpuls momenti və Hamilton operatorunun bəzi özəllikləri

(17.36) ifadəsinə görə \hat{L}^2 və \hat{L}_z operatorları eyni məxsusi funksiyaya sahib olduqları üçün onlar komutasiya edirlər, yəni fiziki kəmiyyətləri eyni zamanda dəqiq ölçülən kəmiyyətlər olurlar.

(17.5) ifadəsindən istifadə etsək

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_z] &= \hat{L}^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}^2 = (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) \hat{L}_z - \hat{L}_z (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) = \\ &= \hat{L}_x^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y^2 = \hat{L}_x^2 \hat{L}_z + \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_z \hat{L}_x - \hat{L}_z \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \hat{L}_z + \\ &+ \hat{L}_y \hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_z \hat{L}_y - \hat{L}_z \hat{L}_y^2 = \hat{L}_x (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) + (\hat{L}_x \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_x) + \\ &+ \hat{L}_y (\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y) + (\hat{L}_y \hat{L}_z - \hat{L}_z \hat{L}_y) \hat{L}_y = L_x (-i\hbar \hat{L}_y) + (-i\hbar \hat{L}_y) L_x + \\ &+ L_y (i\hbar \hat{L}_x) + i\hbar \hat{L}_x L_y = 0 \end{aligned}$$

olduğunu görürük. Yəni

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad (18.1)$$

olur. Qapalı sistem üçün fəza bircins olduuna görə impuls saxlanır, yəni impuls operatoru, Hamilton operatoru ilə komutasiya edir. Başqa sözlə

$$\begin{aligned}
\bar{H} &= \int \psi^*(\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r}) dV = \int \psi^*(\vec{r} + \vec{a}) \hat{H} \psi(\vec{r} + \vec{a}) dV = \\
&= \int \psi^*(\vec{r}) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \vec{p} + \dots \right) \hat{H} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \vec{a} \vec{p} + \dots \right) \psi(\vec{r}) dV = \\
&= \hat{H} - \frac{i\vec{a}}{\hbar} [\hat{p}\hat{H}] + O(a^2)
\end{aligned}$$

yaza bilərik. Buradan

$$\bar{H} = \bar{H} - \frac{i}{\hbar} \vec{a} [\hat{p}\hat{H}] + O(a^2) \quad (18.2)$$

olur. Yəni $[\hat{p}\hat{H}] = 0$ olar və \vec{p} saxlanan kəmiyyətdir. Fəzanın izotropliyindən isə

$$\begin{aligned}
\bar{H} &= \int \psi^*(\vec{r} + \delta\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) dV = \\
&= \int \psi^*(\vec{r}) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} [\vec{r}\vec{\nabla}] \right) \hat{H} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} [\vec{r}\vec{\nabla}] \right) \psi(\vec{r}) dV = \\
&= \int \psi^*(\vec{r}) \hat{H} \psi(\vec{r}) dV + \frac{i\delta\vec{\varphi}}{\hbar} \int \psi^*(\vec{r}) \left(\frac{i}{\hbar} [\hat{L}\hat{H}] \right) \psi(\vec{r}) dV + O(\delta\varphi^2) = \\
&= \bar{H} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} [\hat{L}\hat{H}] + O(\delta\varphi^2)
\end{aligned}$$

yazarıq. Yəni

$$\bar{H} = \bar{H} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\varphi} [\hat{L}\hat{H}] + O(\delta\varphi^2)$$

olur. Buradan

$$[\hat{L}\hat{H}] = 0 \quad (18.3)$$

Deməli, qapalı sistem üçün impuls momenti saxlanan kəmiyyət olmalıdır. (128) və (14.1) ifadələrinə görə

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi(\vec{r}, t) \\
\hat{H} \psi(\vec{r}) &= E \psi(\vec{r})
\end{aligned}$$

Buradan Hamilton operatoru, kinetik enerji operatoru ilə potensial enerjinin

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U$$

cəmi kimi göstərilə bilər. Sferik koordinat sistemində Laplas operatoru

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (18.4)$$

olduğuna görə \hat{L}^2 operatorunu ∇^2 operatorunun bucaqdan asılı olan qismi ilə

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

əlaqədə olar və Laplas operatoru L^2 ilə ifadə olar. Buradan Hamilton operatoru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} \hat{L}^2 + U \quad (18.6)$$

şəklində yazılar.

Beləliklə, kinetik enerji operatoru radius vektorun hərəkətinin kinetik enerjisindən

$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ və dönmə hərəkətinə uyğun

olan $\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$ kinetik enerjisindən ibarət olur.

Elektromaqnit sahəsində enerji operatoru

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + eV + U \quad (18.7)$$

şəklində yazılır. Burada \vec{A} sahənin vektor-potensialı, eV -isə skalyar potensialdır. (18.7)-dən \hat{H} operatorunu

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}}^2 + \frac{e^2}{c^2} A^2 - \frac{e}{c} \vec{p} \vec{A} - \frac{e}{c} \vec{A} \vec{p} \right) + eV + U$$

yaza bilərik. Əgər

$$\hat{p}\vec{A} + \vec{A}\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}A - 2i\hbar\vec{A}\vec{\nabla}$$

olmasını nəzərə alsaq, Hamilton operatorunu

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 - \frac{e}{mc}\vec{A}\hat{p} + \frac{ie\hbar}{2mc}\text{div}\vec{A} + eV + U \quad (18.8)$$

şəklində əldə edirik.

Deməli, Hamilton operatoru, enerji operatoru olaraq, zərrəciklər sisteminin və onlar arasındakı təsir qüvvətinin xarakteri ilə müəyyən olunur. Dolayısı ilə Hamilton, \hat{L}^2 və \hat{L}_z operatorları siferik simmetrik sahədə bir-biri ilə komutasiya edirlər, onların fiziki kəmiyyətləri saxlanan kəmiyyətlərdir.

Potensialın minimum qiyməti U_{\min} -olarsa, enerjinin orta qiyməti ixtiyari halda

$$\bar{E} = \bar{K} + \bar{U} \quad (18.9)$$

olur. Kinetik enerji operatorunun K məxsusi qiyməti hər zaman müsbətdir, ona görə də $\bar{K} \geq 0$ olar. $\bar{U} > U_{\min}$ olduğu üçün $\bar{E} > U_{\min}$ əldə edirik. Bu şərt ($E > U_{\min}$) bütün hallarda doğrudur, onda bütün məxsusi qiymətlər üçündə

$$E_n > U_{\min} \quad (18.10)$$

olur. Sonsuzluqda sıfıra yaxınlaşan potensial sahədə $U(x,y,z) \rightarrow 0$ olarsa, məxsusi qiymətlər mənfi qiymətlər alır $E < 0$ və onlar diskret qiymətlər olurlar. Bu isə sistemin halının rəbitəli olmasını göstərir, yəni bağlı sistem oluşturlar və hərəkət finit olur. Əksinə məxsusi qiymətlər müsbət olarsa, onda onlar kəsilməz spektr oluşturun və hərəkət infinit hərəkət olar.

Bütün fəzada $U(x,y,z) > 0$ olanda (18.10) görə $E > 0$ olar və $E > 0$ olduqda, spektr kəsilməz olar. Yəni bu halda ümumiyyətlə diskret spektr olmaz və hərəkət həmişə infinitiv olar. Deməli, enerjinin qiyməti potensial enerjinin nə şəkildə olmasından asılı olub, diskret və kəsilməz qiymətlərə uyğun ola bilər. Diskret spektrinin stasionar halları həmişə finit hərəkət edən sistem olur, yəni sistem və ya onun müəyyən qismi sonsuzluğa gedə bilməz.

Fəsil I-ə aid çalışmalar və onların həlli

Çalışma I.1. $\hat{Q} = \frac{d}{dx}$ operatorunun ermit operator olmasını göstərin.

Həll: Ermitlik şərtinə görə

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \hat{Q} \psi_2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 \hat{Q}^* \psi_1^* dx$$

olmalıdır. Onda $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_2 dx$ -da inteqralı açsaq:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \frac{d\psi_2}{dx} dx = [\psi_1^* \psi_2]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 \frac{d\psi_1^*}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 \frac{d}{dx} \psi_1^* dx$$

Yəni

$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^* \frac{d\psi_2}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2 \frac{d\psi_1^*}{dx} dx$ olur. Deməli, $\frac{d}{dx}$ operatoru antihermit operatorudur.

Çalışma I.2. $\hat{Q} = \frac{d}{dx}$ operatorunun məxsusi funksiyasının və məxsusi qiymətini tapın.

Həll: \hat{Q} operatorunun məxsusi funksiyası və məxsusi qiymətini təyin edən tənliyi

$$\hat{Q}\psi(x) = f\psi(x) \quad \text{yazarsaq}$$

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = f\psi(x), \frac{d\psi(x)}{\psi(x)} = f dx, \int \frac{d\psi}{\psi} = \int f dx$$

$$\ln \psi = fx, \psi = e^{fx}$$

alırıq. Onda bu funksiyayı

$$\psi = Ae^{fx}$$

yaza bilərik. $f = \pm ik$ olanda ψ -funksiyası birqiymətli, kəsilməz və sonlu olar. k -nın bütün kəsilməz qiymətlərində bu funksiya dalğa funksiyası olur, yəni f -xəyali qiymətlər almış olur.

Çalışma 1.3. Ermit operatorun məxsusi qiymətinin və dinamik dəyişənin orta qiymətinin həqiqi olmasını göstərin.

Həlli: Diskret spektrə malik olan \hat{Q} operatoru götürək. Onun məxsusi qiyməti

$$\hat{Q}\psi_k = q_k\psi_k \quad (I.3.1)$$

tənliyindən tapılır. Onun kompleks qoşması

$$\hat{Q}^*\psi_k^* = q_k^*\psi_k^* \quad (I.3.2)$$

olar. Ermitlik şərtinə görə

$$\int \psi_1^* (\hat{Q}\psi_2) dV = \int \psi_2 (\hat{Q}^*\psi_1^*) dV$$

olduğu üçün

$$\int \psi_k^* (\hat{Q}\psi_k) dV = \int \psi_k (\hat{Q}^*\psi_k^*) dV$$

yazılar. Buradan (I.3.1) və (I.3.2)-yə görə

$$\int \psi_k^* (q_k\psi_k) dV = \int \psi_k (q_k^*\psi_k^*) dV$$

olar ki, buda

$$\begin{aligned} q_k \int \psi_k^* \psi_k dV &= q_k^* \int \psi_k^* \psi_k dV, \\ q_k &= q_k^* \end{aligned} \quad (I.3.3)$$

deməkdir.

Fiziki dəyişənin orta qiyməti $\bar{F} = \int \psi^* \hat{Q}\psi dV$ -dir.

Hər iki tərəfindən ermit qoşma əlsaq $\bar{F}^* = \int \psi (\hat{Q}^*\psi^*) dV$ olar. Ermitlik şərtinə görə bu ifadələrin sağ tərəfləri bərabərdir, ona görə də $\bar{F} = \bar{F}^*$ və ya $\langle F \rangle = \langle F^* \rangle$ əldə edərik.

Çalışma 1.4. Kompleks qoşma operatorun ermit və xətti operator olmasını göstərin.

Həll: Kompleks qoşma operator tərifə görə

$$\hat{Q}\psi = \psi^*$$

olar. İxtiyari a_1 və a_2 sabitləri üçün

$$\hat{Q}(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = (a_1\psi_1 + a_2\psi_2)^* = a_1^*\psi_1^* + a_2^*\psi_2^* = a_1^*\hat{Q}\psi_1 + a_2^*\hat{Q}\psi_2$$

yazılar. $a_1 \neq a_1^*$ və $a_2 \neq a_2^*$ olduğuna görə bu qoşma xətti operator deyil.

İnteqral $\int \psi_1^* \hat{Q} \psi_2 dV = \int \psi_1^* \psi_2^* dV$ olduğu üçün və inteqral

$$\int \psi_2 \hat{Q}^* \psi_1^* dV = \int \psi_2 (\hat{Q} \psi_1)^* dV = \int \psi_2 \psi_1^* dV$$

olmasına görə $\int \psi_1^* \psi_2^* dV \neq \int \psi_1 \psi_2 dV$ olar. Lakin ermitlik şərtindən

$$\int \psi_1^* \psi_2^* dV = \int \psi_1 \psi_2 dV$$

olmalı idi. Ona görə, kompleks qoşma operator ermitlik şərtini ödəmir.

Çalışma 1.5. Cütlük operatorunun məxsusi qiymətini tapın.

Həll: Cütlük operatorunun tərifinə görə

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$$

Məxsusi qiymət isə $\hat{P}\psi(x) = q\psi(x)$ tənliyindən tapılır. Tərifə görə

$\psi(-x) = q\psi(x)$ olduğundan

$$\hat{P}\psi(-x) = q\hat{P}\psi(x)$$

olar. Bu ifadəni $\psi(x) = q^2\psi(x)$, $q^2 = 1$, $q = \pm 1$ yazırıq. $q = +1$ olması cüt-lüyün müsbət, $q = -1$ olması isə cütüyün mənfi olması deməkdir.

Çalışma 1.6. $\hat{A} = \left(x \frac{d}{dx}\right)^2$ və $\hat{B} = \left(\frac{d}{dx} x\right)^2$ operatorlarını tapın və onları müqayisə edin.

Həll:

$$\begin{aligned} \hat{A}\psi(x) &= \left(x \frac{d}{dx}\right)^2 \psi(x) = \left(x \frac{d}{dx}\right) \left(x \frac{d\psi}{dx}\right) = \left(x \frac{d\psi}{dx} + x \cdot x \frac{d^2\psi}{dx^2}\right) = \\ &= \left(x \frac{d}{dx} + x^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) \psi(x) \end{aligned}$$

$$\hat{A} = x \frac{d}{dx} + x^2 \frac{d^2}{dx^2}$$

Bu yolla

$$\begin{aligned}\hat{B}\psi(x) &= \left(\frac{d}{dx}x\right)^2\psi = \left(\frac{d}{dx}x\right)\left(\frac{d}{dx}x\psi(x)\right) = \left(\frac{d}{dx}x\right)\left(\psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{dx}\right) = \\ &= \psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{dx} + 2x\frac{d\psi(x)}{dx} + x^2\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \psi(x) + x\frac{d\psi(x)}{dx} + \\ &+ 2x\frac{d\psi(x)}{dx} + x^2\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \psi(x) + 3x\frac{d\psi}{dx} + x^2\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\end{aligned}$$

hesablayaraq

$$\hat{B} = 1 + 3x\frac{d}{dx} + x^2\frac{d^2}{dx^2}$$

tapırıq. Beləliklə,

$$\hat{A} = x\frac{d}{dx} + x^2\frac{d^2}{dx^2}, \quad \hat{B} = 1 + 3x\frac{d}{dx} + x^2\frac{d^2}{dx^2}$$

alarıq.

Çalışma 1.7. $\hat{Q} = -i\hbar\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})$ operatorunu kvadrata yüksəldin.

$$\text{Həll: } \vec{\nabla} = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\begin{aligned}\hat{Q}^2\psi(\vec{r}) &= \left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right)\left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}) = \\ &= \left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right)\left(-i\hbar\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) + \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\psi(\vec{r})\right) = -\hbar^2\nabla^2\psi(\vec{r}) - \\ &- i\hbar\frac{e}{c}\vec{A}\vec{\nabla}\psi + \frac{e^2}{c^2}A^2(\vec{r})\psi = -\hbar^2\nabla^2\psi(\vec{r}) -\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{e}{c}(\vec{\nabla}\vec{A}\cdot\psi(\vec{r}) + \vec{A}\vec{\nabla}\psi + \vec{A}\vec{\nabla}\psi) + \frac{e^2}{c^2}A^2(\vec{r})\psi &= -\hbar^2\nabla^2\psi(\vec{r}) - \\ -i\frac{e\hbar}{c}(\vec{\nabla}\vec{A})\psi(\vec{r}) - 2i\hbar\vec{A}\vec{\nabla}\psi(\vec{r}) + \frac{e^2}{c^2}A^2(\vec{r})\psi(\vec{r})\end{aligned}$$

Yəni

$$\hat{Q}^2 = -\hbar^2\nabla^2 - i\frac{e\hbar}{c}\vec{\nabla}\vec{A}(\vec{r}) - 2i\frac{e\hbar}{c}\vec{A}(\vec{r})\vec{\nabla} + \frac{e^2}{c^2}A^2(\vec{r}) \quad \text{olur.}$$

Çalışma 1.8. xe^{-kx^2} funksiyası k -nın hansı qiymətlərində

$\hat{Q} = \frac{d^2}{dx^2} - ax^2$ operatorunun məxsusi funksiyası olduğunu göstərən və uyğun məxsusi qiyməti tapın.

Həll:
$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - ax^2\right)\psi(x) = f\psi(x)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dx^2} - ax^2\right)xe^{-kx^2} &= \frac{d^2}{dx^2}xe^{-kx^2} - ax^3e^{-kx^2} = \frac{d}{dx}\left(e^{-kx} - 2kx^2e^{-kx^2}\right) - \\ &- ax^3e^{-kx^2} = -2kxe^{-kx^2} - 4kxe^{-kx^2} + 4k^2x^3e^{-kx^2} - ax^3e^{-kx^2} = \\ &= -6kxe^{-kx^2} + 4k^2x^3e^{-kx^2} - ax^3e^{-kx^2} = (-6k + 4k^2x^2 - ax^2)xe^{-kx^2} = \\ &= -6kxe^{-kx^2} + (4k^2 - a)x^2xe^{-kx^2} \end{aligned}$$

Burada

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - ax^2\right)xe^{-kx^2} = fxe^{-kx^2}$$

olması üçün $4k^2 - a = 0, k = \pm \frac{\sqrt{a}}{2}$ olmalıdır. Onda

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - ax^2\right)xe^{-kx^2} = [-6k + (4k^2 - a)x^2]xe^{-kx^2}$$

olduğu üçün

$$f = -6k$$

$$f = \mp 6 \frac{\sqrt{a}}{2} = \mp 3\sqrt{a}$$

olar. Deməli, \hat{Q} operatorunun məxsusi funksiyası xe^{-kx^2} olursa, məxsusi qiyməti $\mp 3\sqrt{a}$ olar.

Çalışma 1.9. Bircins xarici elektrik sahəsində yarımkəçiricinin udma zolağının kənar qisminin pozulmasının (Frans-Keldiş effekti) qiymətini tapın.

Həll: Elektrik sahəsində yarımkəçiricinin elektronlarının enerjisinin minimal qiyməti azalır. Bu zaman optik udma zolağının kənar hissəsi pozulur. Onda da kiristal tərəfindən enerjisi qadağan olmuş zolağın enindən az olan fotonlar udular.

Mə'lumdur ki, elektrik sahəsində elektronun enerjisi dəyişirsə və bu dəyişmə

$$\Delta E = \frac{P^2}{2m^*} + e\epsilon x \quad \text{olur (1.9.1)}$$

m^* -keçirici zonada elektronun effektiv kütləsidir, ϵ -xarici sahənin intensivliyidir. Qeyrimüəyyənlik münasibətinə əsasən

$$\bar{P} \cdot \bar{X} = \frac{\hbar}{2}, \bar{X} = \frac{\hbar}{2\bar{P}} \quad (1.9.2)$$

yazılar. Onda enerji impulsu

$$\Delta \bar{E}(P) = \frac{\bar{P}^2}{2m^*} + \frac{e\epsilon \hbar}{2\bar{P}} \quad (1.9.3)$$

ifadə olunar və enerjinin minimumluq şərtinə görə $\frac{d\Delta \bar{E}(P)}{d\bar{P}} = 0$ olması lazımdır. (1.9.3)-ə görə

$$\left(\frac{\bar{P}^2}{2m^*} + \frac{e\epsilon \hbar}{2\bar{P}} \right) = 0; \frac{\bar{P}}{m^*} - \frac{e\epsilon \hbar}{2\bar{P}^2} = 0; 2\bar{P}^3 - e\hbar m^* \epsilon = 0 \quad (1.9.4)$$

$$\frac{2\bar{P}^3 - e\hbar m^* \epsilon}{2m^* \bar{P}^2} = 0; \bar{P} = \sqrt[3]{\frac{e\hbar m^* \epsilon}{2}}$$

taparıq.

Bu qiyməti (1.9.3)-də yerinə yazsaq, enerji dəyişimi $\Delta E = E_g - t_n$

(E_g - keçirici zonadakı enerjidir)

$$\Delta E = \frac{1}{2m^*} \left(\sqrt[3]{\frac{e\hbar m^* \epsilon}{2}} \right)^2 + \frac{e\epsilon \hbar}{2\sqrt[3]{\frac{e\hbar m^* \epsilon}{2}}} = \frac{\left(\sqrt[3]{\frac{e\hbar m^* \epsilon}{2}} \right)^3 + e\hbar m^* \epsilon}{m^* 2\sqrt[3]{\frac{e\hbar m^* \epsilon}{2}}} =$$

$$= \frac{\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2} + e\hbar m^* \varepsilon}{m^* 2^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2}}} = \frac{3e\hbar m^* \varepsilon}{4 \left(\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2} \right)^{1/3} m^*} = \frac{3 \left(\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2} \right)^{2/3}}{2} \frac{1}{m^*}$$

$$\Delta E = \frac{3 \left(\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2} \right)^{2/3}}{2} \frac{1}{m^*} = \frac{3}{2} \sqrt[3]{\left(\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2} \right)^2} \frac{1}{m^*} \text{ olar}$$

Yəni
$$\Delta E = \frac{3}{2} \left(\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2} \right)^{2/3} \quad (1.9.5)$$

alarıq. Deməli, yarımkəçiricinin keçirici zonasında elektronun enerjisinin qiyməti xarici elektrik sahəsinin intensivliyi ilə mütənasib olur

$$\Delta E = \frac{3}{2} \sqrt[3]{\left(\frac{e\hbar m^* \varepsilon}{2} \right)^2} \frac{1}{m^*} \quad (1.9.6)$$

Çalışma 1.10. Dışkret spektrdə məxsusi qiymətləri fərqli olan məxsusi funksiyaların ortoqonal olmasını göstərin.

Həll: \hat{Q} -operatorunun müxtəlif məxsusi qiymətləri var.

$$\hat{Q}\psi_k = q_k\psi_k, \hat{Q}\psi_{k'} = q_{k'}\psi_{k'} \quad (1.10.1)$$

Bunları uyğun olaraq $\psi_{k'}$ və ψ_k vurub, inteqrallasaq

$$\int \psi_{k'} (\hat{Q}\psi_k) dV = q_k \int \psi_{k'} \psi_k dV$$

$$\int \psi_k (\hat{Q}\psi_{k'}) dV = q_{k'} \int \psi_k \psi_{k'} dV$$

alarıq. Tərəf-tərəfə çıxsaq,

$$\int \psi_{k'} (\hat{Q}\psi_k) dV - \int \psi_k (\hat{Q}\psi_{k'}) dV = (q_k - q_{k'}) \int \psi_{k'} \psi_k dV$$

sol tərəfdə fərq sıfır olur. Onda

$$0 = (q_k - q_{k'}) \int \psi_{k'} \psi_k dV$$

olur və $q_k \neq q_{k'}$ olduğu üçün

$$\int \psi_{k'} \psi_k dV = 0 \quad (1.10.2)$$

şerti alınar ki, buda məxsusi funksiyaların ortoqonallıq şərti olur. (1.10.2) ifadəsini

$$(\psi_{k'}, \psi_k) = 0 \quad (1.10.3)$$

şəklində də yazı bilərik. Yəni, $q_k \neq q_{k'}$ deyilsə, sistemin eyni zamanda həm k , həm də k' halında olma ehtimalı sıfırdır.

Çalışma 1.11. Halı $\psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{a^2} + ik_0 x}$ funksiyası ilə xarakterizə olunan sistemin koordinat və impulsunun orta qiymətini tapın.

$$\text{Həll: } \bar{X} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\frac{x^2}{a^2} - ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{a^2} + ik_0 x} dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x \left| e^{-\frac{x^2}{a^2}} \right|^2 dx$$

İntegralaltı ifadə tək funksiya olduğuna görə $(-\infty, +\infty)$ intervalında onun cavabı sıfır olar: $\bar{X} = 0$

İmpulsun orta qiyməti:

$$\begin{aligned} \bar{P} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2} - ik_0 x} \left(i\hbar \frac{2x}{a^2} + \hbar k_0 \right) e^{-\frac{x^2}{a^2} + ik_0 x} dx = \\ &= \frac{2i\hbar}{a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} x \left| e^{-\frac{x^2}{a^2}} \right|^2 dx + \hbar k_0 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx \end{aligned}$$

Burada birinci integral, integralaltı ifadə tək funksiya olduğu üçün sıfır olar və ikinci integral isə normalama şərtinə görə vahid olur. Onda

$$\bar{P} = \hbar k_0 \quad \text{olar.}$$

Çalışma 1.12. Sistemin halı

$$\psi(x) = c\varphi(x)e^{\frac{i}{\hbar}P_0 x} \quad (\varphi(x)\text{-həqiqi funksiyadır})$$

funksiyası ilə xarakterizə olunursa, impulsun orta qiymətini tapın.

Həll: $\psi(x)$ -in normallama şərtinə görə

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

$$|c|^2 \int e^{-\frac{i}{\hbar} P_0 x} \varphi(x) e^{\frac{i}{\hbar} P_0 x} \varphi(x) dx = |c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^2(x) dx = 1$$

$$|c|^2 = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx \right]^{-1} = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx}$$

alırıq.

$$\begin{aligned} \bar{P} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |c|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} P_0 x} \varphi(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi(x) e^{\frac{i}{\hbar} P_0 x} dx = \\ &= |c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} P_0 x} \varphi(x) \left(-i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx} - i\hbar \frac{i}{\hbar} P_0 \varphi(x) \right) e^{\frac{i}{\hbar} P_0 x} dx = \\ &= |c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} P_0 x} \varphi(x) \left(-i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx} + P_0 \varphi(x) \right) e^{\frac{i}{\hbar} P_0 x} dx = \\ &= -i\hbar |c|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} dx + |c|^2 P_0 \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx \end{aligned}$$

$|c|^2$ -nin qiymətii yerinə yazsaq

$$\bar{P} = P_0 - i\hbar \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx} \frac{(\varphi(x))^2}{2} \Big|_{-\infty}^{+\infty} = P_0$$

$$\bar{P} = P_0$$

tapırıq.

Çalışma 1.13. Sistem $\psi(\theta, \varphi) = A \sin \theta \cos \varphi$ halında olduqda L^2 orta qiymətini tapın.

Həll: Normalama şərtinə görə

$$\int \psi^*(\theta, \varphi) \psi(\theta, \varphi) d\Omega = 1, d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$$

$$|A|^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \cos \varphi \sin \theta \cos \varphi \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

$$\int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} (1 + \cos 2\varphi) d\varphi = \frac{1}{2} \varphi \Big|_0^{2\pi} + \frac{1}{4} \sin 2\varphi \Big|_0^{2\pi} = \pi$$

$$\int_0^{2\pi} \sin^3 \theta d\theta = \left[-\cos \theta + \frac{1}{3} \cos^3 \theta \right]_0^{2\pi} = \left(1 - \frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3} \right) = 2 - \frac{2}{3} = \frac{4}{3}$$

$$|A|^2 \frac{4\pi}{3} = 1, A = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$$

$$\begin{aligned} \bar{L}^2 &= \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \right)^2 \int \sin \theta \cos \varphi (-\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2) \sin \theta \cos \varphi d\Omega = \\ &= \left(\frac{3}{4\pi} \right) \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \cos \varphi \left[-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \right] \sin \theta \cos \varphi d\Omega = \\ &= -\hbar^2 \left(\frac{3}{4\pi} \right) \iint (-\sin^2 \theta + \cos^2 \theta - 1) \sin \theta \cos^2 \varphi d\theta d\varphi = \\ &= -\pi \hbar^2 \left(\frac{3}{4\pi} \right) \int_0^\pi -2 \sin^2 \theta \sin \theta d\theta = -2\pi \hbar^2 \left(\frac{3}{4\pi} \right) \int_0^\pi (\cos^2 \theta - 1) d(\cos \theta) \end{aligned}$$

alarıq. Buradan da

$$\bar{L}^2 = 2\pi \hbar^2 \left(\frac{3}{4\pi} \right) \frac{4}{3} = 2\hbar^2; \bar{L}^2 = 2\hbar^2$$

əldə edərik.

Çalışma 1.14. $Ae^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}} e^{\frac{i}{\hbar} P_0 x}$ (a, P_0, x_0 -sabitlərdi) funksiyası ilə verilmiş halda $\bar{x}, \bar{p}, \overline{(\Delta x)^2}, \overline{(\Delta P_x)^2}$ və $(\Delta x \cdot \Delta P_x)$ -ləri hesablayın.

Həll: Normalama şərtinə görə

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = |A|^2 \int e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx = |A|^2 a \sqrt{\pi} = 1; |A| = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$$

alınır.

$$\bar{X} = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{a^2}} dx$$

$$\bar{X} = \frac{a}{\sqrt{\pi}} \int y e^{-y^2} dy + \frac{x_0}{\sqrt{\pi}} \int e^{-y^2} dy = X_0, \text{-da } y = \frac{x-x_0}{a} \text{ əvəzləməsi}$$

edərik, $\bar{X} = X_0$ əldə edirik.

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 \text{ olduğu üçün}$$

$$\begin{aligned} \overline{x^2} &= \int \psi^* \psi x^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int (ay + x_0)^2 e^{-y^2} dy = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[a^2 \int y^2 e^{-y^2} dy + \right. \\ &\left. + 2ax_0 \int y e^{-y^2} dy + x_0^2 \int e^{-y^2} dy \right] = \frac{a^2}{2} + x_0^2 \end{aligned}$$

alınar. Onda da

$$\overline{(\Delta x)^2} = \frac{a^2}{2} + x_0^2 - x_0^2 = \frac{a^2}{2}$$

Sonra

$$\bar{P}_x = \int \psi^* \hat{P}_x \psi dx = P_0$$

olduğu üçün ($\bar{P}_x^2 = P_0^2$)

$$\overline{(\Delta P_x)^2} = \overline{(P_x - \bar{P}_x)^2} = \overline{P^2} - \bar{P}_0^2$$

yazıb

$$\overline{(\Delta P_x)^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2} + P_0^2$$

əldə edirik. Onda

$$\overline{(\Delta P_x)^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2} + P_0^2 - P_0^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2}$$

yazırıq. $\Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}}, \Delta P_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}a}$ olduğundan

$$\Delta x \cdot \Delta P_x = \frac{a}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\sqrt{2}a} = \frac{\hbar}{2}$$

alınar.

Çalışma 1.15. Laplas operatorunun ermit operator olduğunu gösterin.

Həll: Ermitlik şərtinə görə

$$\int \psi_1^* \Delta \psi_2 dV = \int \psi_2 (\Delta \psi_1^*) dV$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

olmalıdır. Bunun sol tərəfini açsaq

$$\begin{aligned} \int \psi_1^* \Delta \psi_2 dV &= \int \psi_1^* \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \psi_2) dV = \int \vec{\nabla} (\psi_1^* \vec{\nabla} \psi_2) dV = \int (\vec{\nabla} \psi_1^*) (\vec{\nabla} \psi_2) dV = \\ &= \int \text{div} (\psi_1^* \vec{\nabla} \psi_2) dV = - \int (\vec{\nabla} \psi_2 \vec{\nabla} \psi_1^* - \psi_2 \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \psi_1^*)) dV = \\ &= \int \psi_2 (\vec{\nabla} \vec{\nabla} \psi_1^*) dV = \int \psi_2 (\vec{\nabla}^2 \psi_1^*) dV = \int \psi_2 (\Delta \psi_1^*) dV \end{aligned}$$

olar.

o halda

$$\int \psi_1^* (\Delta \psi_2) dV = \int \psi_2 (\Delta \psi_1^*) dV$$

olur. Yə'ni, Laplas operatoru ermit operatorudur.

Çalışma 1.16. \hat{M}_z operatorunun məxsusi qiymətini və məxsusi funksiyasını tapın.

Həll: $\hat{M}_z \Phi = M_z \Phi$ tənliyində $M_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ olduğuna görə, onun

ümumi həlli $-i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = M_z \Phi; \Phi = A e^{\frac{i}{\hbar} M_z \varphi}$ şəklində axtaraq. φ dəyişəni

0 ilə 2π arasında olduğu üçün

$$2\pi \frac{i}{\hbar} M_z = 2\pi m$$

yazarıq. Burada $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Yəni $M_z = \hbar m, \Phi_m = A e^{im\varphi}$

olar. Normallama şərtindən

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m|^2 d\varphi = 1, |A|^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} e^{im\varphi} d\varphi = 1; 2\pi |A|^2 = 1; A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

əldə edərik.

II F əsil

Bə'zi sadə hallarda Şrödinger tənliyinin həlləri

Kütlesi m olan zərrəciyin potensiallı sahədə hərəkəti stasionar Şödinger tənliyinin

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z)+U(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \quad (\text{II.A})$$

və ya ümumi halın Şurodinger tənliyinin

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=\hat{H}\psi(\vec{r},t) \quad (\text{II.B})$$

verilmiş potensial enerjinin ifadəsi ilə müəyyənləşən həll ilə təyin olunur. Onda (II.A) tənliyinin, yəni stasionar həllin Şödinger tənliyini araşdıracağın. Stasionar hal üçün Şödinger tənliyinin

$$\hat{H}\psi=E\psi \quad (\text{II.C})$$

həlli, $U(x,y,z)$ potensial enerjinin ifadəsindən asılı olaraq müxtəlif xarakter daşıyır. Ona görə də müxtəlif potensial enerji üçün (II.C) tənliyinin həlli ilə məşğul olağın.

§19. Potensial qutuda hərəkət edən zərrəcik

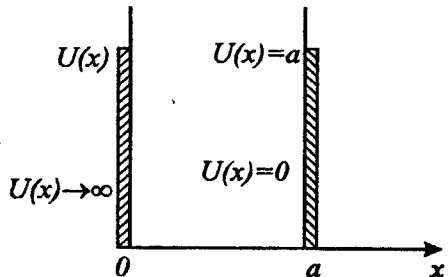
Daxildə potensial enerjisi sıfır və onun xaricində sonsuz böyük olan qapalı sistemə potensial «qutu» deyilir. Sadəlik üçün fərz edək ki, X istiqamətində olan hərəkətə baxırıq. Yəni potensial qutu dedikdə şəkil I.6-dakı kimi zərrəcik nəzərdə tutulur:

$$U(x)=0, 0 \leq x \leq a$$

$$U(x)=\pm\infty, x < 0 \text{ olanda}$$

$$U(x) \rightarrow -\infty \text{ olsun, } x > a \text{ olanda}$$

$$U(x) \rightarrow \infty \text{ olur.}$$



(II.F) tənliyi qutudan kənarında

Şəkil I.6. Dərin Potensial qutuda hərəkət

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \pm \infty \psi(x) = E\psi(x) \quad (19.1)$$

şəklində olar və qutu daxilində isə

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (19.2)$$

Bu tənliyin həllini

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (19.3)$$

yaza bilərik, haradaki

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{-dir.}$$

$\psi(x)$ funksiyası kəsilməz olduğu üçün qutunun kənarlarında ($x=0$, $x=a$ qiymətlərində)

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (19.4)$$

olmalıdır. Bu şərhəd şərtinin olması göstərir ki, $B=0$ olmalıdır. Onda (19.3)-də həll

$$\psi(x) = A \sin kx \quad (19.5)$$

olması vacibdir. $\psi(a) = 0$ şərtinə görə

$$ka = n\pi \quad (19.6)$$

olar və (19.5)-dən həll

$$\psi(x) = A \sin\left(n \frac{\pi x}{a}\right)$$

şəklində olar. (19.6) münasibətindən

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n\pi$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} a^2 = n^2 \pi^2$$

yazarıq. Buradan

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 n^2}{8ma^2} \quad (19.8)$$

alarıq. (19.8) ifadəsindən görüldüyü kimi potensial qutuda hərəkət edən zərrəciyin enerjisi diskret qiymətlər alır, burada olan n kvant ədədi $n=0,1,2,3,\dots$ qiymətləri alır:

$$n = 0, E_0 = 0$$

$$n = 1, E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

$$n = 2, E_2 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$$

və cəirə olur. Qutu daxilində zərrəciyin olma ehtimalı

$$|\psi|^2 = A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x \quad (19.8)$$

olub, 0-dan A^2 -ə qədər qiymətlər almış olar.

Qutuda zərrəciyin impulsu

$$\bar{P} = \frac{\int_0^a \psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi dx}{\int_0^a \psi^* \psi dx} = -i\hbar \frac{\int_0^a \sin \frac{n\pi}{a} x \cos \frac{n\pi}{a} x dx}{\int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx} = 0 \quad (19.9)$$

olur və

$$\bar{P^2} = \frac{\int_0^a \psi^* \left(-\hbar \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi dx}{\int_0^a \psi^* \psi dx} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{a^2} \quad (19.10)$$

əldə edilir. Buradan

$$E = \frac{\bar{P^2}}{2m}$$

olduğu üçün

$$\bar{P^2} = 2mE$$

alanıq. Bu nəticə klassik fizikadakı zərrəciyin qutu daxilində irəli və geriyyə hərəkətinə uyğun gəlir. Əgər qutu daxilində zərrəciyin vəziyyətini təyin edərsək

$$\bar{X} = \frac{\int_0^a x \sin^2 \left(n \frac{\pi}{a} x \right) dx}{\int_0^a \sin^2 \left(n \frac{\pi}{a} x \right) dx} = \frac{a}{2} \quad (19.11)$$

olar ki, buda klassik nəticənin üstünə ($|\psi|^2 = A^2 \sin^2 n \frac{\pi}{a} x$ olanda

$$\bar{X} = \frac{\int_0^a xcdx}{\int_0^a cdx} = \frac{a}{2}) \text{ düşür. Amma } x^2\text{-nin orta qiyməti üçün}$$

$$\bar{X^2} = \frac{\int_0^a x^2 \sin^2\left(n\frac{\pi}{a}x\right)dx}{\int_0^a \sin^2\left(n\frac{\pi}{a}x\right)dx} = \frac{a^2}{3}\left(1 - \frac{3}{2\pi^2 n^2}\right) \quad (19.12)$$

alınır ki, buda klassik fizikanın verdiyi nəticə ilə uyğunlaşır. Klassik fizikada

$$\bar{X_{kl}^2} = \frac{\int_0^a x^2 cdx}{\int_0^a cdx} = \frac{a^2}{3} \quad (19.13)$$

Lakin n-nin çox böyük qiymətlərində buradan alınan nəticə ilə klassik nəticə üst-üstə düşür. Əgər zərrəcik üçölçülü qutu daxilində hərəkət edərsə, x,y,z istiqamətlərində potensial

$$U(x, y, z) = 0 \begin{cases} 0 \leq x \leq a \\ 0 \leq y \leq b \\ 0 \leq z \leq c \end{cases} \quad (19.14)$$

olur və bu sərhədlərdən kənarlarda isə $U \rightarrow \pm\infty$ yaxınlaşır. Bu halda dalğa funksiyası

$$\psi(x, y, z) = A \sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z \quad (19.15)$$

şəkində yazıla bilər. Buradan

$$k_1 = n_1 \frac{\pi}{a}, k_2 = n_2 \frac{\pi}{b}, k_3 = n_3 \frac{\pi}{c}$$

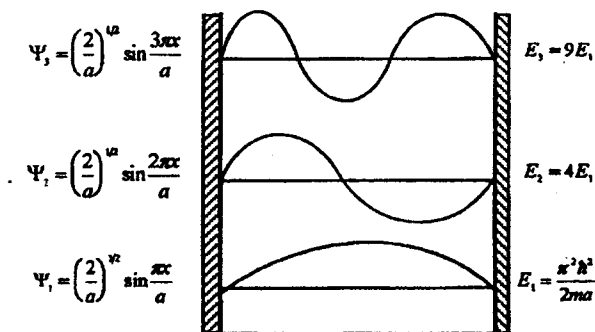
Üçölçülü qutuda zərrəciyin enerjisi

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_1}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{c}\right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2) \quad (19.16)$$

qiymətini almış olar. Burada hər bir n_1, n_2 və n_3 kvant ədədi 1-dən başlayaraq tam ədədlər dəyəri alır. Enerjinin qiymətləri artdıqca, enerji səviyyələri bir-birinə yaxınlaşır. Bir neçə haldan eyni enerjili qruplar yaranır. Məsələ, $(n_1, n_2, n_3) = (1, 1, 6), (1, 3, 2)$ və $(2, 1, 3)$ halları eneji E -olan qrupa uyğun gəlir.

Dərin potensial qutuda dalğa funksiyası və enerjinin qiyməti şəkil I.7-də göstərilmişdi.

$$\begin{aligned} \psi_3 &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi x}{a} & E_3 &= 9E_1 \\ \psi_2 &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} & E_2 &= 4E_1 \\ \psi_1 &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} & E_1 &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma} \end{aligned}$$



Şəkil I.7. Dərin qutuda zərrəciyin enerji səviyyələri.

§20. Harmonik osilyatorun kvant nəzəriyyəsi

Kvazielastiki qüvvə təsiri altında müəyyən tezliklə rəqs edən m kütləli maddə obyektə osilyator deyilir. Belə bir obyektin yerdəyişimi

$$x = x_0 \sin(\omega t + \varphi) \quad \text{yazılır.}$$

(x_0 -rəqsin amplitududur) φ -fazadır.

Cisimə təsir edən kvazielastiki qüvvə
 $F = -kx$
 olur. Potensial enerji bu qüvvə üçün

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

şəklində yazılır və obyekt $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ tezliyi ilə harmonik rəqs edər.

Bu rəqs k- elastiklik əmsalı ilə müəyyən olunur. Belə sistemin enerjisi klassik fizikada

$$E_k = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \quad (20.1)$$

ilə təyin olunur. Bu ifadədən aydın olur ki, klassik fizikada osilyatorun enerjisi kəsilməz qiymətlər alır.

Born nəzəriyyəsində isə osilyatorun enerjisi diskret qiymətlər alıb,

$$E_n = n\hbar\omega \quad (20.2)$$

şəklində olur. Born nəzəriyyəsinə görə osilyatorun minimum enerjisi sıfırdır. Amma təcrübənin nəticəsinə görə diskret qiymətlər alan osilyatorun minimum enerjisi sıfırdan fərqlidi və $\frac{\hbar\omega}{2}$ qiymətini alır. İndi kvant nəzəriyyəsinə görə harmonik osilyatorun fiziki xassələrini ətraflı araşdıracağıq.

Problemin bəsit halı olan x – istiqamətində rəqs edən, yəni xətti harmonik osilyatorun fiziki hallarını araşdıracağıq. Birölçülü osilyatorun potensial enerjisi

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (20.3)$$

olan zərrəciyin Şödinger tənliyi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (20.4)$$

yazıla bilər. Bu tənliyin hər tərəfini $-\frac{\hbar^2}{2m}$ -ə bölsək

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = 0 \quad (20.5)$$

alarıq. Yeni dəyişən olan $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ -ə keçsək, onda

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi}{d\xi^2}$$

olduğu üçün, (20.5) tənliyi

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - (\xi^2 - \varepsilon)\psi = 0 \quad (20.6)$$

şəklinə düşər. Burada $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ -dir.

(20.6) tənliyinin həllini Sommerfeldin polinom qaydası ilə tapmaq lazımdır. Çünki, kəsilməz, sonlu və birqiymətli həll (bu şərtlər həllin dalğa funksiyası olmasını göstərir) polinom qaydasında ödənən həlldir. Bunun üçün əvvəlcə (20.6)-nın asimtotik həllini, yəni $\xi \rightarrow \pm\infty$ qiymətindəki həlli tapaq. (20.6) tənliyinin asimtotik tənliyi

$$\frac{d^2\psi_a}{d\xi^2} - \xi^2\psi_a = 0 \quad (20.7)$$

olar və bu tənliyin həllini

$$\psi_a = e^{c\xi^2} \quad (20.8)$$

kimi axtaraq. Onda

$$\psi'_a = c(\xi^2)' e^{c\xi^2} = 2c\xi e^{c\xi^2}$$

$$\psi'_a = 2ce^{c\xi^2} + 2c\xi(c\xi^2)' e^{c\xi^2} = 2ce^{c\xi^2} + 4c^2\xi^2 e^{c\xi^2} = (2c + 4c^2\xi^2)e^{c\xi^2};$$

($4c^2\xi^2 \gg 2c$ olacaq)

birinci və ikinci tərtib törəmələr olurlar. (20.7)-dən

$$4c^2\xi^2 e^{c\xi^2} - \xi^2 e^{c\xi^2} = 0$$

tənliyi alınır və $4c^2 - 1 = 0$ qiymətini tapırıq və buradanda c - üçün

$$c = \pm \frac{1}{2}$$

əldə edirik. Ona görə (20.8)-in iki hissədən ibarət olduğu aşkar olur:

$$\psi_a = c_1 e^{\frac{1}{2}\xi^2} + c_2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

Burada $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$ həlli, $\xi \rightarrow \pm\infty$ olanda dağılan olur, ona görə də bu həlldən vaz keçərik və yalnız

$$\psi_a = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (20.9)$$

həllindən istifadə etmək lazımdır. (20.9) həlli ilə birlikdə (20.6) tənliyinin həllini

$$\psi(\xi) = U(\xi)\psi_a = U(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (20.10)$$

şəklində axtaraq. (20.10)-dəki $U(\xi)$ -ni

$$U(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \xi^k \quad (20.11)$$

sırası kimi seçək. Bunu Şchödinger tənliyində yerinə yazsaq

$$\frac{d^2 U}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dU}{d\xi} + (\varepsilon - 1)U = 0$$

yeni tənlik alarıq. (20.11)-dən törəmə etsək

$$\frac{dU}{d\xi} = \sum_k k C_k \xi^{k-1}; \frac{d^2 U}{d\xi^2} = \sum_k k(k-1) C_k \xi^{k-2}$$

və burada k -ni $k+2$ ilə əvəz etsək

$$\frac{d^2 U}{d\xi^2} = \sum_{k'} (k'+2)(k'+1) C_{k'+2} \xi^{k'+2-2}$$

yazarıq. Burada k' -i k ilə dəyişək

$$\frac{d^2 U}{d\xi^2} = \sum_k (k+1)(k+2) C_{k+2} \xi^k$$

olar. Buradan

$$\sum_k \{(k+1)(k+2)C_{k+2} - (2k+1-\varepsilon)C_k\} \xi^k = 0 \quad (20.12)$$

cəbri tənlik alarıq. Bu tənliyin əmsalları üçün

$$C_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+1)(k+2)} C_k \quad (20.13)$$

ifadəsini tapırıq. (20.13) düsturunu (20.12) cəbri tənliklər sisteminin əmsalları üçün rekkurent düstur olur. Çox böyük k-lar üçün $C_n \neq 0$ olub, $C_{n+2}=0$ olmalıdır ki, (20.11) sırası sonsuz sıra olmasın. Çünki sıra sonsuz olarsa, ψ -funksiyası sonsuz olar və dalğa funksiyasının şərtlərindən biri pozular. U-nun dalğa funksiyası olması üçün onu sonlu sıraya çevirmək lazımdır. Bu o zaman olar ki, böyük k-larda ($k = n$) $C_n \neq 0$ olmaqla, $C_{n+2}=0$ olsun. (20.13)-ə görə bu şərt

$$2n + 1 - \varepsilon = 0$$

münasibətindən tapılmış olur. Buradan

$$\varepsilon = 2n + 1$$

alınar. $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$ olduğuna görə

$$2E = \hbar\omega(2n + 1)$$

yazırıq. Onda

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (20.14)$$

əldə edilir. Burada olan n-ədədi tam ədədlər çoxluğudur. Yəni $n=0,1,2,\dots$ sonsuz qiymətlər alan kvant ədədidir. (20.14)-dən

$$n = 0, E_0 = E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$n = 1, E_1 = 3 \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$n = 2, E_2 = 5 \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$n = 3, E_3 = 7 \frac{\hbar\omega}{2}$$

enerji dəyərləri olar ki, buda enerjinin diskret qiymətlər alması deməkdir. Deməli, osilyatorun enerjisi kvantlanır və diskret qiymətlər almaqla yanaşı, Born nəzəriyyəsindən fərqli olaraq $n=0$ -da $E_B=0$

olanda, burada $E_{kv} = \frac{\hbar\omega}{2}$ olur. Klassik fizikada isə E_{kv} -kəsilməz

dəyərlərə mənsub olur. Yəni enerji

$$E_{kl} = \frac{m\omega^2 x_0^2}{2}$$

$$E_B = n\hbar\omega \quad (20.15)$$

$$E_{kv} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

klassik, Borh və kvant nəzəriyyələrində fərqli nəticələr verir. Enerjinin kvant xarakteri daşmasının Born nəzəriyyəsindən fərqli olaraq kvant mexanikasında osilyatorun sıfırıncı enerjisinin sıfırdan fərqli olub, $\frac{\hbar\omega}{2}$ olması qeyrimüəyyənlik münasibətinin (koordinat ilə impuls arasında) nəticəsidir. Koordinat ilə impuls arasında qeyrimüəyyənlik münasibəti

$$\overline{(\Delta x)^2 (\Delta P_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

olur və osilyator üçün $\overline{(\Delta x)^2} \geq \overline{x^2}$ və $\overline{(\Delta P_x)^2} = \overline{P_x^2}$ olduğuna görə bu münasibət

$$\overline{x^2 P_x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (20.16)$$

şəklində yazıla bilər. Osilyatorun tam enerjisinin orta qiymətini yazmış olursaq, (20.16) bərabərsizliyinə görə

$$\overline{E} = \frac{\overline{P^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \overline{x^2}}{2} \geq \frac{\hbar^2}{8m\overline{x^2}} + \frac{m\omega^2 \overline{x^2}}{2} \quad (20.17)$$

əldə edilir. $x^2=0$ və ya da $x^2 \rightarrow \infty$ olan zaman enerjinin orta qiyməti sonsuz olur. Enerjinin minimum qiymətini tapmaq üçün (20.17) ifadəsindən $\overline{x^2}$ -yə görə törəmə alaraq, sıfıra bərabər götürsək, yeni minimumluq şərtini yazsaq:

$$\frac{\partial}{\partial(\overline{x^2})} E = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{8m(\overline{x^2})^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0$$

Buradan

$$m\omega^2 = \frac{\hbar^2}{4m(x^2)^2}$$

$$4m^2\omega^2(x^2)^2 = \hbar^2, x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

aliriq. Əldə edilən bu qiyməti (20.17)-də yerinə yazmış olarıqsa

$$\bar{E} \geq \frac{\hbar^2}{8m} \frac{2m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

tapırıq. Yəni

$$\bar{E} \geq \frac{\hbar\omega}{2} \quad (20.18)$$

olur. Deməli, osilyatorun ən kiçik enerjisi $\frac{\hbar\omega}{2}$ di.

Beləliklə, koordinatla impulsun arasında olan qeyrimüəy-yənlik münasibəti osilyatorun minimum enerjisinin sıfır deyil, $\frac{\hbar\omega}{2}$ qiyməti almasını göstərir. (20.11) ifadəsi bu zaman sonlu sıra olar ki,

$$U(\xi) \equiv H_n(\xi) = C_n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \quad (20.19)$$

bu polinoma Ermit polinomu deyilir. Ermit polinomu

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n = \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} + \dots +$$

$$+ \begin{cases} b_1 \xi & n \text{ tək olanda} \\ & n \text{ cüt olanda} \end{cases}$$

kimi verilə bilər (əlavə C)

Buradan xüsusi halda

$$H_0(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

və s. Ermit polinomlarının ifadələri alınar. (20.19) ifadəsində (20.10)-da nəzərə alsaq Şchödinger tənliyinin osilyator üçün həlli

$$\psi_n(\xi) = C_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \quad (20.20)$$

şəklində olur. Harmonik osilyatorun enerjisi diskret qiymətlər aldığına görə, ψ_n funksiyaları ortonormallıq şərtini ödəyən funksiyalar olar:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx = \delta_{n,n}$$

$$\int \psi_n^* \psi_n dx = C_n^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi = 1$$

Burada $H_n(\xi)$ -birisinin əvəzinə

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$$

ifadəsini yazarsaq

$$(-1)^n \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} C_n^2 \int H_n(\xi) \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = 1$$

alırıq. Mə'lum

$$\int_{-\infty}^{+\infty} UV^{(n)} dx = (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} U^{(n)} V dx \quad (20.21)$$

düsturunu gözönün alırıqsaq və n dəfə hissə-hissə inteqrallamış olarsaq

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} C_n^2 \int e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi = 1 \quad (20.22)$$

əldə edərik. Bəlli düsturları

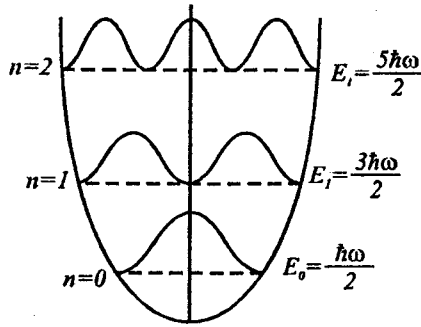
$$\frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) = 2^n n!; \int e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} \quad (20.23)$$

nəzərə alsaq, C_n əmsalları üçün

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} \frac{\hbar}{m\omega}}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} x\right)^2} H_n\left(\frac{m\omega}{\hbar} x\right) \quad (20.25)$$

tapırıq.

Şəkil I.8-də (20.14) enerji və (20.25) dalğa funksiyasının qrafiki $n=0,1,2$ halında göstərilmişdi.



Şəkil I.8. Osilyatorun enerji səviyyələri.

(20.14) və (20.25) ifadələrindən xüsusi halda

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \psi_0 = C_0 e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega, \psi_1 = C_1 2\xi e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

$$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega, \psi_2 = C_2 \left(4\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 2 \right) \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{2^0 0! \sqrt{\pi} \frac{m\omega}{\hbar}}}, C_1 = \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi} \frac{m\omega}{\hbar}}}, C_2 = \frac{1}{\sqrt{8\sqrt{\pi} \frac{m\omega}{\hbar}}}$$

Şəkil I.8-dəki qiymətlər verilmişdi.

§ 21. Maqnit sahəsində zərrəciklərin hərəkəti

Xarici maqnit sahəsində zərrəciyin hərəkətini tapmaq üçün Hamilton operatorunun elektromaqnit sahəsində yazmaq lazımdır.

(18.18)-də $\text{div}\vec{A} = 0$ və $eV=0$ götürsək,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{mc}\vec{A}\vec{P} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2$$

əldə edirik. Sadəlik üçün $A_y = A_z = 0$, $A_x = B_y$ qəbul etsək, $B_x = B_y = 0$, $B_z = B$ olur. Bu halda Şrödinger tənliyi

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e}{mc} \vec{A} \hat{P} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \right) \psi = E \psi \quad (21.1)$$

şəklində yazılar. Buradan

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e}{mc} \vec{A}_x \hat{P}_x + \frac{e^2}{2mc^2} A_x^2 \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

olar və ya

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{ie\hbar}{mc} B_y \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e^2}{2mc^2} B^2 y^2 \right) \psi = E \psi \quad (21.2)$$

yazılar. Burada dalğa funksiyasını

$$\psi(x, y, z) = f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)}$$

kimi axtaraq. (α və β sabitlərdi) Onda

$$\nabla^2 f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)} = (\alpha^2 + \beta^2) f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)} + \frac{d^2 f(y)}{dy^2} e^{i(\alpha x + \beta z)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)} = i\alpha f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)}$$

əldə edilər. Ona görə (21.2) ifadəsi

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\alpha^2 + \beta^2 - \frac{d^2}{dy^2} \right) f(y) - \frac{e\hbar\alpha}{mc} B_y f(y) + \frac{e^2 B^2 y^2}{2mc^2} f(y) = E f(y) \quad (21.3)$$

şəklini alar. Əgər

$$y = y' - \frac{c\hbar\alpha}{eB}, \omega_0 = \frac{eB}{mc}, \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \quad (21.4)$$

əvəzləmələri qəbul edəriksə, onda

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(y')}{dy'^2} + \frac{m\omega_0^2 y'^2}{2} f(y') = \varepsilon f(y') \quad (21.5)$$

tənliyini əldə edirik.

(21.5) tənliyi harmonik osilyatorun tənliyidir və onun həlli

$$f_n(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi), n = 0, 1, 2, \dots \quad (21.6)$$

olar. Yeni dəyişənlərdə

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} y' = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \left(y - \frac{c\hbar\alpha}{eB} \right) \quad (21.7)$$

$$\varepsilon = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

tapılar. Beləliklə, maqnit sahəsində enerji

$$E_n = \frac{e\hbar B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} \quad (21.8)$$

qiymətini alar. Burada $\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$ həddi OZ istiqamətində hərəkət edən

zərrəciyin kinetik enerjisidir, $\frac{e\hbar B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right)$ həddi isə OZ istiqaməti-

nə perpendikulyar müstəvidəki rəqsi hərəkətin enerjisidir.

Deməli, maqnit sahəsində zərrəciyin hərəkəti OZ istiqamətindəki irəliləmə hərəkəti və tarazlıq ətrafında titrəmə hərəkətindən ibarət olur.

§ 22. Mərkəzi sahədə hərəkət. Rotator

Əgər potensial enerji radius vektorunun mütləq qiymətinin funksiyasıdırsa, belə potensial sahəyə mərkəzi və ya sferik-simmetrik sahə deyilir. Sferik-simmetrik sahədə Şrödinger tənliyi

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (22.1)$$

olaraq, Hamilton operatoru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + U(r)$$

şəklindədir.

Sferik-simmetrik sahə üçün

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) R(r) \quad (22.2)$$

$$U(\vec{r}) = U(r)$$

götürülür. Burada $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sferik funksiya olub, (17.35) ifadəsi ilə təyin olunur. Yeni mərkəzi sahədə tənlik

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) Y_l^m(\theta, \varphi) R(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} Y_l^m(\theta, \varphi) R(r) + \quad (22.3)$$

$$+ U(r=a) Y_l^m(\theta, \varphi) R(r) = E Y_l^m(\theta, \varphi) R(r)$$

olar. Onda radial hissə $U(a)=0$ qiymətlərində ($R(r=a)$)

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0 \quad (22.4)$$

tənliyini ödəyən funksiya olur. Rotator sabit radiusla $r=a=\text{const}$, hərəkət edən obyekt $R(r)=R(a)=c$ olduğundan

$$\frac{1}{a^2} \frac{\partial}{\partial a} \left(a^2 \frac{\partial R(a)}{\partial a} \right) = 0$$

olar və (22.4)-dən

$$\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{a^2} = 0$$

olur. Buradan

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2} \quad (22.5)$$

alınar. Burada $ma^2 = J$ ətalət momentidir. (22.5) ifadəsini rotatorun klassik ifadəsi ilə

$$E_{kl} = \frac{M^2}{2J} \quad (22.6)$$

və Born nəzəriyyəsindəki

$$E_B = \frac{n_\varphi^2 \hbar^2}{2J} \quad (22.7)$$

ifadəsi ilə müqayisə edərixsə, kvant mexanikasındakı $E_{kl} \sim l(l+1)$ dəyəri olması L_x, L_y və L_z operatorlarının komitativ olmaması ilə əlaqədardır. l -in çox böyük qiymətlərində $l^2 \gg l$ olar və

$$E_{kl} \approx \frac{l^2 \hbar^2}{2J}$$

ifadəsi (22.7) ilə üst-üstə düşür.

Göründüyü kimi enerjinin qiyməti l orbital kvant ədədi ilə, lakin dalğa funksiyasının qiyməti Y_l^m isə l və m orbital və maqnit

kvant ədədləri ilə təyin olunur. m ədədi $-l$ -dən $+l$ -ə qədər qiymətlər aldığı üçün E_l qiymətlərində $2l+1$ qədər qarşılıqlı ortoqonal məxsusi funksiyalar uyğun gəlir. Yəni rotatorun halı E_l , $2l+1$ tərtibdən cırlaşmış hal olur.

Rotatorun enerji səviyyələrinin cırlaşması sistemin sferik-simmetriyaya malik olmasıdır. Koordinat mərkəzindən bütün istiqamətlər eyni hüquqludur və istənilən mərkəzi simmetrik sistemlər cırlaşmaya məruz qalır. Əgər fəzada müəyyən seçilmiş istiqamət varsa (məsələn, maqnit sahəsi varsa) mərkəzi simmetriya pozulur, onda cırlaşma ya tamamilən, ya da qismən aradan qalxır. Rotatorun $l=0$ halı s-səviyyəsi, $l=1$ halı p-səviyyəsi, $l=2$ halı d-səviyyəsi və s. adlanır.

Rotatorun s-səviyyəsində enerjisi $E_0=0$, hal funksiyası

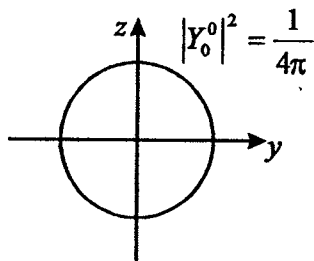
$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, p-səviyyəsində enerji $E_1 = \frac{\hbar^2}{J}$ olub, hal funksiyası

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta$$

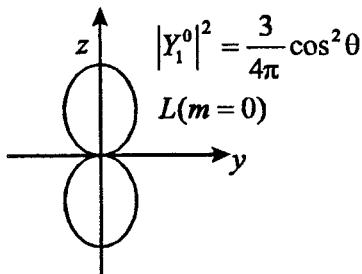
$$Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \theta$$

üç məxsusi funksiyalar şəklində olurlar. s-halında ZY müstəvisində ehtimal sıxlığı $\frac{1}{4\pi}$ qiyməti alar (Şəkil I.9a)



Şəkil I.9a. Rotatorun s-halında ehtimal sıxlığı.

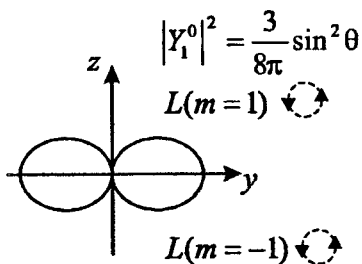
Burada L -in Z -istiqamətində qiyməti istənilən ola bilər, çünki $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, sıfır olur. Yəni sferik a -radiuslu səth üzrə rotatorun vəziyyətin eyni hüquqludur. Rotatorun $l=1, m=0$ halında olması, Z oxundan keçən müstəvidə olması deməkdir. Bu zaman moment Z oxuna perpendikulyar olur (Şəkil I.9b)



Şəkil I.9b. Rotatorun p -halında ehtimal sıxlığı.

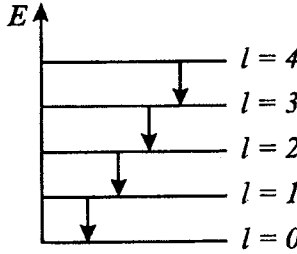
P -səviyyəsinin $l=1$ və $m=0$ halında rotatorun ən çox ehtimallı traektoriyası XY - müstəvisində olur.

Bu halda $m=1$ və $m=-1$ qiymətləri fırlanma istiqamətlərinin bir-birinə əks istiqamətdə olması ilə fərqlənir. (Şəkil I.9c) $m=1$ olanda rotator sağ fırlanma (hərəkət miqdarı momenti Z -oxuna paraleldir), $m=-1$ olanda isə rotator sol fırlanma (impuls momenti Z -oxuna antiparaleldir) hərəkətində olur.



Şəkil I.9c. Rotatorun p -halında ehtimal sıxlığı.

Beləliklə, $l=2$ (d -səviyyəsi), $l=3$ (f -səviyyəsi) və s. hallarında rotatorun ehtimal sıxlığı və onun enerjisini müəyyən edə bilərik. Rotatorun enerji səviyyələri Şəkil I.10-dakı kimi göstərmək olar.



Şəkil I.10. Rotatorun enerji səviyyələri.

§23. Kulon sahəsində zərrəciyin hərəkəti

Elektrik yükü Z_1e və Z_2e olan zərrəciklərin coulomb qarşılıqlı potensial enerjisi, sferik-simmetrik sahənin potensialı olub

$$U = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

şəkilindədir. Əgər zərrəciklər elektron və proton olarsa, $Z_1 = Z_2 = 1$ olur ki, buradan da

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (23.1)$$

yazıla bilər. Bu cürə potensialı sahədə hərəkət edən zərrəcik coulomb sahəsinə bağlı olur və beləliklə, elektron protonun coulomb sahəsində hərəkət etmiş olar ki, buda hidrogen atomu deməkdir. Beləliklə, (23.1) potensialı olan sahə üçün Hamilton operatoru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad (23.2)$$

yazılır. Burada $m_e = \frac{m_p m_a}{m_p + m_e}$ götürülmüş kütlədir və təqribən elektronun kütləsinə bərabər olur. Onda hidrogen atomu üçün Şchödingər tənliyi

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \frac{e^2}{r} + E \right) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (23.3)$$

şəkilində yazılır. (23.3) tənliyinin sferik koordinat sistemində araşdırılması əlverişlidir. Onda (23.3) tənliyi

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2me}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \right\} \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (23.4)$$

şəklində yazılır. Bu tənliyin həllini

$$\psi(r, \theta, \varphi) = F(r)Y(\theta, \varphi) \quad (23.5)$$

cürə axtaraq. (23.5)-i (23.4)-d yerinə yazsaq

$$\begin{aligned} & \frac{r^2}{F} \left(\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} \right) + \frac{2mer^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) = \\ & = -\frac{1}{Y(\theta, \varphi)} \left(\frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial Y(\theta, \varphi)}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right) \end{aligned}$$

əldə edirik. Bu tənliklərin birincisi r -lə, ikincisi isə θ, φ -yə bağlıdır. Bu tənliklər bir-birinə bərabər o zaman olar ki, onların hər ikisi eyni bir sabitə bərabər olsun. Yə'ni

$$\begin{aligned} & \frac{r^2}{F} \left(\frac{d^2 F}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) = c \\ & -\frac{1}{Y} \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) = c \end{aligned} \quad (23.6)$$

olur. (23.6) ikincisindən (17.35) və (17.36)-ya görə

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

olur və bununla da C sabiti

$$C = l(l+1)$$

qiymətini alar. Onda (23.6)-nın birincisindən $R(r) = rF(r)$ qəbul etsək

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \left(\varepsilon + \frac{2m_e e^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (23.7)$$

tənliyi əldə edilər. Burada

$$\varepsilon = \frac{2m_e E}{\hbar^2}$$

(23.7) tənliyində $r \rightarrow 0$ -da həll sıfıra yaxınlaşır, $R \rightarrow 0$ olması üçün $E > 0$ halında həll, asimtotik bölgədə osilyasiyaya uğrar. E -nin bütün sıfırdan böyük qiymətləri məxsusi qiymət olaraq qalar. Bu halda da rabitəli sistem alınmaz və elektron protondan səpilir.

$E < 0$ olanda isə iki cürə $e^{\sqrt{-E}r}$ və $e^{-\sqrt{-E}r}$ funksiyaların birlikdə ifadələrindən ibarət olaraq E -nin yalnız müəyyən qiymətlərində məxsusi qiymət olur.

$$(23.7) \text{ tənliyini } -\frac{E}{4} \text{ yə vuraq və } x = 2r\sqrt{-E} \text{ əvəzləməsi}$$

edərixsə

$$-\frac{1}{4\varepsilon} \frac{d^2 R}{dr^2} - \frac{1}{4\varepsilon} \left[\varepsilon + \frac{2m_e e^2}{\hbar^2} \frac{1}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

tənliyini alarıq və alınan tənlikdədə

$$\frac{dR}{dr} = \frac{dR}{dx} \frac{dx}{dr} = 2\sqrt{-\varepsilon} \frac{dR}{dx}$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} = 2\sqrt{-\varepsilon} \frac{d}{dr} \frac{dR}{dx} = 2\sqrt{-\varepsilon} \frac{d^2 R}{dx^2} \frac{dr}{dx} = -4\varepsilon \frac{d^2 R}{dx^2}$$

əvəzlənməsini etmiş olarıqsa

$$\frac{1}{4\varepsilon} 4\varepsilon \frac{d^2 R}{dx^2} - \left(\frac{1}{4} - \frac{2m_e e^2}{4\hbar^2} \frac{2\sqrt{-\varepsilon}}{-\varepsilon x} + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) R(x) = 0 \quad (23.8)$$

alarıq. Buradan

$$\frac{d^2 R(x)}{dx^2} - \left(\frac{1}{4} - \frac{m_e e^2}{\hbar^2 \sqrt{-\varepsilon} x} + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) R(x) = 0 \quad (23.9)$$

$$\frac{d^2 R}{dx^2} - \left(\frac{1}{4} - \frac{\nu}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2} \right) R = 0$$

yazılar. Burada $\nu = \frac{m_e e^2}{\hbar^2 \sqrt{-\varepsilon}}$ -dir.

(23.9) tənliyinin həllini polinom qaydası ilə tapaq. $x \gg 1$ qiymətində (23.9) tənliyinin asimtotik tənlik şəklinə keçməsinə baxaq. $x \gg 1$ halında asimtotik tənlik

$$\frac{d^2 R_a}{dx^2} - \frac{1}{4} R_a = 0 \quad (23.10)$$

olur. Bu tənliyin sonlu həllini

$$R_a = e^{-\frac{1}{2}x} \quad (23.11)$$

kimi göstərə bilərik. (23.7) ifadəsinin həllini (23.11)-lə ifadə edərik-sə

$$R(x) = L(x)e^{-\frac{1}{2}x} \quad (23.12)$$

göstərmiş olarıq və buradan $\frac{dR}{dx}$ ilə $\frac{d^2 R}{dx^2}$ üçün

$$\frac{dR}{dx} = -\frac{1}{2}L(x)e^{-\frac{1}{2}x} + \frac{dL(x)}{dx}e^{-\frac{1}{2}x}$$

$$\frac{d^2 R}{dx^2} = \frac{d^2 L(x)}{dx^2}e^{-\frac{1}{2}x} - \frac{dL(x)}{dx}e^{-\frac{1}{2}x} + \frac{1}{4}L(x)e^{-\frac{1}{2}x}$$

ifadələrini alarıq. Bunları (23.7)-də yerinə yazarıqsa

$$\frac{d^2 L(x)}{dx^2} - \frac{dL(x)}{dx} + \frac{1}{4}L(x) = \left[-\frac{1}{4} + \frac{\nu}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] L(x) = 0$$

və ya

$$\frac{d^2 L(x)}{dx^2} - \frac{dL(x)}{dx} + \left[\frac{\nu}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] L(x) = 0$$

əldə edərik. $L(x)$ həlli sabitlə başlamaz, çünki $L(x) = C_0 + C_1 X + C_2 X^2 + \dots$ olarsa (23.13)-də yerinə yazanda $C_0 X^2$ həddi meydana gələr və buda tənliyin saxlanmasını pozar. Bu səbəbdən (23.13) tənliyinin həllini

$$L(x) = x^{\nu} \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i \quad (23.14)$$

şəklində axtaraq. (23.14)-ü (23.13)-də yerinə yazarıqsa, belə bir cəbri tənlik alarıq

$$c_0[k(k-1)-l(l+1)]x^{k-2} + \sum_{i=1}^{\infty} [(k+i-1)(k+i)-l(l+1)]c_i +$$

$$+ [(k+i-1)-\nu]c_{i-1} x^{k+i-2} = 0$$

(23.15)-dən

$$k(k-1)-l(l+1)=0$$

və

$$[(k+i-1)(k+i)-l(l+1)]c_i - [\nu - (k+i-1)]c_{i-1} = 0$$

münasibətlərini alırıq. Buradan

$$c_i = \frac{\nu - (k+i-1)}{(k+i-1)(k+i)-l(l+1)} c_{i-1}; k = l+1 \quad (23.16)$$

əldə edirik. Yəni x-in dərəcəsi (l+1)-dən başlar. Əgər x-in dərəcəsi sonsuzdursa, (23.16)-dan C_i -lər üçün

$$C_i = \frac{1}{i} C_{i-1}$$

yazırıq. Bu göstərirki $x \gg 1$ olanda $L(x)$ funksiyası e^x kimi davranır. Lakin $L(x)$ -in sonlu sıraya, yəni polinoma çevrilməsi zəruriyyəti meydana çıxır. Onda $i=j$ həddindən başlayaraq sonrakı həddlər sıfır olar. Bu halda

$\nu = k + j = l + j + 1$ olanda $c_j \neq 0, c_{j+1} = 0$ olmalıdır.

Əgər $\nu = l + j + 1$

tam say olaraq qəbul edilərsə, (23.16)-ı

$$c_i = \frac{(l+i-n)}{(l+i)(l+i+1)-l(l+1)} c_{i-1}$$

kimi yazırıq və $c_i=0$ olması o vaxt olurki

$$n = l + i = \nu \quad (23.17)$$

olsun. Buradan

$$n = \frac{m_e e^2}{\hbar^2 \sqrt{-\varepsilon}}$$

yazırıq. Deməli

$$n^2 = \frac{-m_e^2 e^4}{\hbar^4 \varepsilon}, E = E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{R\hbar}{n^2}$$

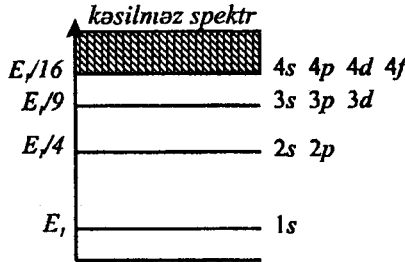
olar. Burada R - Ridberg sabitidir

$$R = \frac{m_e e^4}{2\hbar^3} \approx 109677,58 \text{ lsm}^{-1}$$

Beləliklə, hidrogen atomunun enerjisi üçün

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (23.18)$$

qiymətini əldə edərək ki, buda hidrogen atomunun enerjisinin diskret qiymətlər alması deməkdir. Yə'ni kvant mexanikasında enerji kvantlanır. (23.18)-də n-tam ədədlər olub, baş kvant ədədi adlanır. Onun aldığı qiymətlər 1-dən sonsuzluğa qədər tam ədədlər çoxluğu. ($n=1,2,3,\dots\infty$). (23.18)-ə görə enerji səviyyələri şəkil I.11-dəki kimi olur.



Şəkil I.11. Hidrogen atomunun enerji səviyyələri.

Baş kvant ədədinin hər bir qiyməti üçün $l=0,1,2,\dots(n-1)$ dəyərlərini ala bilər.

(23.16) ifadəsinə istinad edərək

$$L(x) = (-1)^k \left(x^k - \frac{k(k+s)}{1!} x^{k-1} + \frac{k(k-1)(k+s)(k+s-1)}{2!} x^{k-2} \right) =$$

$$= \sum_{j=0}^k (-1)^{k+j} x^{k-j} \frac{k(k+s)!}{j(k-j)(k+s-1)!}$$

əldə edərək. E_n məxsusi qiymətinə uyğun olan dalğa funksiyası (23.5)-ə görə

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{e^{-\sqrt{-\epsilon r}}}{r} L_{nl}(2\sqrt{-\epsilon r}) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (23.19)$$

olar. Burada $L_{ne}(2\sqrt{-\epsilon r})$ Laguerre polinomu adlanır (əlavə B) və onun ifadəsi xüsusi funksiyalar sinfinə aid olan

$$L_{ne}(2\sqrt{-\epsilon r}) = e^{2\sqrt{-\epsilon r}} \frac{d^{n+l}}{d(2\sqrt{-\epsilon r})^{n+l}} \left(e^{-2\sqrt{-\epsilon r}} (2\sqrt{-\epsilon r})^{n+l} \right)$$

şəklində təyin olunur. Hidrogen atomunun dalğa funksiyasının radial hissəsi

$$R_{nl} = \sqrt{\frac{2(n-l-1)!}{n 2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{n}\right) L_{nl}(2\sqrt{-\epsilon r}) e^{-\frac{r}{n}} \quad (23.20)$$

müxtəlif n və l üçün aşağıdakı ifadələri alır:

$$n = 1, l = 0, R_{10} = 2e^{-r}$$

$$n = 2, l = 0, R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2}r\right) e^{-\frac{r}{2}}$$

$$n = 2, l = 1, R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} r e^{-\frac{r}{2}}$$

$$n = 3, l = 0, R_{30} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3}r + \frac{2}{27}r^2\right) e^{-\frac{r}{3}}$$

və s. Laguerre polinomları ilə Ermit polinomları arasında müəyyən əlaqə var. Məsələn,

$$H_{2k}(x) = (-1)^k 2^{2k} k! L_k^{\frac{1}{2}}(x^2)$$

$$H_{2k+1}(x) = (-1)^k 2^{2k+1} k! L_k^{\frac{1}{2}}(x^2)$$

münasibətləri bu əlaqələrdən birisidir.

(23.19) və (23.20)-dən görüldüyü kimi hidrogen atomunun dalğa funksiyası üç kvant ədədindən asılı olur. Bu kvant ədədləri baş kvant ədədi - n , orbital kvant ədədi l və maqnit kvant ədədi m -dir. (nlm)

Enerjinin hər bir E_n qiyməti üçün $l=0,1,2,\dots,n-1$ və hər bir l üçün isə $m=0,1,-1,\dots$, yəni $m=-1,\dots,+1$ olması səbəbindən hidrogen atomunun halı cırılmış hala uyğun gəlir. Bu halda cırılmanın tərtibi

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

$$k = n^2$$

ilə təyin olunur. Yəni cırlaşmanın tərtibi baş kvant ədədi ilə təyin olunur. Hidrogen atomunun $n=1$ halında $l=0$, $m=0$ olar ki, bu əsas hal olur. Bu hala 1s halı deyilir, $n=2$ qiymətində $l=0$, $m=0$, $+1$, -1 qiymətləri alar ki, $l=0$, $m=0$ halına 2s halı; $l=1$, $m=0$, $+1$, -1 halına isə 2p halı deyilir; $l=2$ olanda 3d halı olur. Burada bir 3s, üç dənə 3p və beş dənə 3d halı mövcud olur. Hər hansı səbəbdən atom həyacanlaşmış halda olursa, aşağı səviyyələrə keçid edir. Əgər yuxarı səviyyələrdən, $n=1$ səviyyəsinə keçid edərsə, Layman, $n=2$ səviyyəsinə keçidlər edərsə, Balmer, $n=3$ səviyyəsinə keçidlərdə Pufut və s. seriyalarına uyğun gələn xətlər alınır. Beləliklə, atomların xətti spektrlər seriyalar şəklində alınır. Buda təcrübədə müşahidə olunmuşdur.

Bütün bunlar göstərir ki, elektron müəyyən traektoriya ilə hərəkət etmədiyinə görə elektronun atomda hər hansı halda olması dalğa funksiyası ilə təsvir olunur və bu funksiya (23.19)-dəki kimi olur. Bu zaman elektronun bir haldan başqa hala keçidi elektronun fəzadakı hərəkəti ilə əlaqədar olmaz.

§24. Birvalentli atomların enerjisi və dalğa funksiyası

Birvalentli atomlarda bir valent elektronu olur və belə atomlar qələvi metal atomları adlanır. Bu atomlara litium Li, natrium Na, kalium K, rubidium Rb, sezium Cs kimi atomlar daxildir. Onlar 3,11,19,37,55 elektrona sahib olub, bir elektrondan başqa, yerdə qalan elektronlarla eZ^* yüklü nüvə arasında effektiv sahə yaranır və valent elektronu bu sahədə olur. Buna uyğun olan $-eN$ yükü

$$-eN = 4\pi \int_0^{r_0} \rho(r) r^2 dr = 4\pi \int_0^{r_0} |\psi_{nlm}|^2 r dr = -eN(r_0) \quad (24.1)$$

olar və onda eZ^* yükü effektiv qiymət alar ki, buda

$$Z^* = Z - N(r_0) \quad (24.2)$$

olur. Z valent elektrondan başqa, yerdə qalan elektronların sayıdır. Yəni xarici elektron $Z-1$ saylı elektron təbəqəsini bir qədər demorfə edir və coulomb sahəsi dəyişər. Ona görə valent elektronun hərəkət etdiyi sahənin potensial enerjisi

$$U = -e \left(\frac{1}{r} + \frac{A}{r^2} + \frac{B}{r^3} + \dots \right) \quad (24.3)$$

yazıla bilər. Burada A və B həddləri qələvi atomların sahəsinin hidrogen atomlarının sahəsindən fərqləndirən qismini göstərən düzəlişlərdi.

(24.3) ifadəsində birinci və ikinci həddləri nəzərə alsaq, hidrogen atomundakı hesablamalar öz gücündə qalır və yalnız Şchrödinger tənliyinin radial hissəsi

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left[\frac{e^2}{r} + E + \frac{e^2 A}{r^2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right] R(r) = 0 \quad (24.4)$$

şəklində olar. Bu tənliyi

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m_e}{\hbar^2} E + \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{e^2}{r} - \frac{1}{r^2} \left[l(l+1) - \frac{2e^2 A m_e}{\hbar^2} \right] \right\} R = 0 \quad (24.5)$$

kimi yazası olursaq

$$l(l+1) - \frac{2m_e}{\hbar^2} e^2 A = l'(l'+1) \quad (24.6)$$

işarəsini qəbul edərik. Bu halda Şchrödinger tənliyi qələvi atomlar üçün

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left\{ \frac{2m_e}{\hbar^2} E + \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{e^2}{r} - \frac{l'(l'+1)}{r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (24.7)$$

şəklini alar. (24.6) ifadəsi l' -ə görə kvadrat tənlik olur və buradan

$$l'^2 + l' - \frac{2m_e e^2}{\hbar^2} A = 0, l' = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + l^2 + l - \frac{2m_e e^2}{\hbar^2} A} \quad (24.8)$$

yaza bilərik. (24.8) ifadəsində $l' = -\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} + l^2 + l - \frac{2m_e e^2}{\hbar^2} A}$

olan qiyməti dalğa funksiyasının sıfır nöqtəsində sonsuz olduğunu göstərir və ona görə də bu həddi nəzərə almaya bilərik. Onda

$$\begin{aligned} l' &= -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(2l+1)^2 - \frac{4m_e e^2}{\hbar^2} A} = \\ &= -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} (2l+1) \sqrt{1 - \frac{4m_e e^2}{(2l+1)^2 \hbar^2}} \end{aligned} \quad (24.9)$$

yazırıq. Əgər $A=0$ olursa, $l'=l$ olar və hidrogen atomunun nəticələrini alırıq. Deməli, $A \neq 0$ olması, sahənin qismən dəyişməsini

göstərir. (24.9) ifadəsindən

$$\sqrt{1 - \frac{4m_e e^2}{(2l+1)^2 \hbar^2}} A \approx 1 - \frac{2m_e e^2}{(2l+1)^2 \hbar^2} A$$

yaza bilərik. Beləliklə, (24.9)-dan

$$l' = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{2m_e e^2}{\left(l + \frac{1}{2}\right) \hbar^2} A + l$$

və ya

$$l' = l - \frac{m_e e^2 A}{2\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)} \quad (24.10)$$

alarıq. Deməli, §23-dəki bütün düsturların burada da keçərli olması görünür. Lakin bu düsturlarda l -in yerinə l' -daxil olur. Onda baş kvant ədədi n^*

$$n^* = l' + k + 1 = l + k + 1 - \frac{m_e e^2 A}{2\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)} = n - \frac{m_e e^2 A}{2\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)} \quad (24.11)$$

şəklində olur. Yə'ni qələvi atomların enerjisi

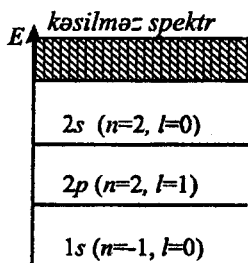
$$\begin{aligned} E_{n,l} &= -\frac{m_e z^2 e^4}{2\hbar^2 n^{*2}} = -\frac{m_e z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{\left[n + \frac{m_e e^2 A}{2\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)} \right]^2} = \\ &= -\frac{m_e z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2 + \frac{m_e e^2 A}{\hbar^2} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} + \frac{m_e^2 e^4 A^2}{4\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}} \end{aligned}$$

yazılar və

$$E_{nl} = -\frac{m_e z^2 e^4}{2\hbar^2} \left[\frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{n^2 \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{m_e e^2}{\hbar^2} A \left(l + \frac{1}{2}\right) + \frac{m_e e^4 A^2}{4\hbar^2}} \right]$$

əldə edilir.

Buradan aydın olur ki, bu atomların enerjisi baş kvant ədədi ilə yanaşı, həm də orbital kvant ədədindən də asılı olur. Orbital kvant ədədindən asılılığı da, hidrogen atomundakı asılılığındakından fərqli olmasını alınır. Baş kvant ədədinin eyni bir qiymətində, orbital kvant ədədinin müxtəlif qiymətlərinə uyğun olan hallar bir-birindən fərqli olur. Kalium atomunun enerji səviyyələri şəkil I.12-də göstərilmişdi.



Şəkil I.12. Kalium atomunun enerji səviyyələri.

Qələvi atomların dalğa funksiyası isə hidrogen atomunun dalğa funksiyası kimi olub

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (24.13)$$

üç kvant ədədindən asılıdır. Bunun (24.12) ilə müqayisəsindən alınır ki, l kvant ədədinə görə olan cırılma olmaz, yalnız maqnit kvant ədədinə m görə cırılma olar.

§25. Atomların maqnit momentləri

Stasionar halda atomun elektrik cərəyanının və yükünün sıxlığı (14.5) ifadələri ilə müəyyən olunur

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{2im} (\psi \cdot \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*), \quad \rho = e|\psi|^2 \quad (14.5)$$

Sferik koordinatlarda cərəyanın ehtimal sıxlığını yazmalı olarıqsa, nabra operatoru

$$\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}, \nabla_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, \nabla_\varphi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

şəklində ifadə edilir. Ona görə cərəyanın ehtimal sıxlığı üç hissədən ibarət olur.

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{e\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial r} \right), \\ j_\theta &= \frac{e\hbar}{2imr} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \theta} \right), \\ j_\varphi &= \frac{e\hbar}{2imr \sin \theta} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial \varphi} \right), \end{aligned} \quad (25.1)$$

Atomlar üçün dalğa funksiyası

$$\psi_a \equiv \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (25.2)$$

olduğuna görə (25.1)-də ψ və ψ^* -lərin yerinə (25.2)-ni yazarıq:

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{e\hbar}{2im} \left(\psi_{nlm}^* \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial r} - \psi_{nlm} \frac{\partial \psi_{nlm}^*}{\partial r} \right), \\ j_\theta &= \frac{e\hbar}{2imr} \left(\psi_{nlm}^* \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial \theta} - \psi_{nlm} \frac{\partial \psi_{nlm}^*}{\partial \theta} \right), \\ j_\varphi &= \frac{e\hbar}{2imr \sin \theta} \left(\psi_{nlm}^* \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial \varphi} - \psi_{nlm} \frac{\partial \psi_{nlm}^*}{\partial \varphi} \right), \end{aligned} \quad (25.3)$$

R_{nl} və P_l^m həqiqi funksiyalar olduğu üçün (25.2)-ni burada yerinə yazarsaq

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{e\hbar}{2im_e} \left(R_{nl} P_l^m e^{-im\varphi} \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} P_l^m e^{im\varphi} - R_{nl} P_l^m e^{im\varphi} \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} P_l^m e^{-im\varphi} \right) = \\ &= \frac{e\hbar}{2m_e i} R_{nl} P_l^m \left(\frac{\partial R_{nl}}{\partial r} - \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} \right) P_l^m = 0 \end{aligned}$$

$$j_{\theta} = \frac{e\hbar}{2im_e r} \left(R_{nl} P_l^m e^{-im\varphi} \frac{\partial P_l^m}{\partial \theta} R_{nl} e^{im\varphi} - R_{nl} P_l^m e^{im\varphi} \frac{\partial P_l^m}{\partial \theta} R_{nl} e^{-im\varphi} \right) =$$

$$= \frac{e\hbar}{2m_e i r} R_{nl}^2 P_l^m \left(\frac{\partial P_l^m}{\partial \theta} - \frac{\partial P_l^m}{\partial \theta} \right) = 0$$

$$j_{\varphi} = \frac{e\hbar}{2im_e r \sin\theta} \left(R_{nl} P_l^m e^{-im\varphi} R_{nl} P_l^m \frac{de^{im\varphi}}{d\varphi} - R_{nl} P_l^m e^{im\varphi} R_{nl} P_l^m \frac{de^{-im\varphi}}{d\varphi} \right) =$$

$$= -\frac{e\hbar m}{m_e r \sin\theta} |\psi_{nlm}|^2$$

əldə edirik. Bu münasibətlərə diqqət edərsək, aydın olur ki, stasionar hallarda cərəyanın radius boyunca da mütləq qiyməti və meridian boyunca proeksiyası sıfır olur və cərəyan en dairəsi boyunca axar. Cərəyanın bu qismi sıfırdan fərqli olar. dS sahəsindən keçən j_{φ} eninə cərəyan sıxlığı dI cərəyan şiddəti yaradar və

$$dI = j_{\varphi} dS \quad (25.5)$$

şəklində təyin olunur. Elektrik kursundan bəllidir ki, belə cərəyan şiddətinin yaratdığı maqnit momenti

$$d\mu_z = \frac{dI \cdot S}{c} = \frac{j_{\varphi} S dS}{c} \quad (25.6)$$

kimi tapılır. Burada S sahəsi dI cərəyanının əhatə etdiyi sahədir. Bu sahə

$$S = \pi r^2 \sin^2 \theta \quad (25.7)$$

olduğu üçün (25.6)-dən maqnit momenti

$$d\mu_z = \frac{\pi r^2 \sin^2 \theta}{c} j_{\varphi} dS = -\frac{\pi r^2 \sin^2 \theta}{c} \frac{em\hbar}{m_e r \sin\theta} |\psi_{nlm}|^2 dS \quad (25.8)$$

$$\mu_z = -\frac{e\hbar m}{2m_e c} \int 2\pi \sin\theta dS |\psi_{nlm}|^2 \quad (25.9)$$

olur. $2\pi r \sin\theta dS = dV$ həcm elementi olduğu üçün

$$\mu_z = -\frac{e\hbar m}{2m_e c} \int |\psi_{nlm}|^2 dV \quad (25.10)$$

alınar. Normalama şərtinə görə $\int |\psi_{nlm}|^2 dV = 1$

$$\mu_z = -\frac{e\hbar m}{2m_e c} \quad (25.11)$$

əldə edərik. $L_z = \hbar m$ olduğu üçün

$$\mu_z = -\frac{e\hbar}{2m_e c} L_z \quad (25.12)$$

yazarıq. Buradan da z- istiqaməti heç bir üstünlüyə malik olmadığı üçün maqnit momenti vektorunun, mexaniki moment vektoruna nisbətini

$$\frac{\vec{\mu}}{\vec{L}} = -\frac{e}{2m_e c} \quad (25.13)$$

yazmaq olar. Bu münasibət, klassik fizikada $-e$ yüklü, m kütləli zərəcəyin hesabına yaranan münasibətlə eynidir. Orbital momentin qiyməti

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

və momentin proeksiyası $L_z = \hbar m$ olduğundan

$$\cos(\angle \vec{L}) = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}} \quad (25.14)$$

aralarındakı bucağın kosinusu şəklində olar. Onda fəza kvantlanması (25.12)-dən

$$\mu_z = -\mu_B m \quad (25.15)$$

taparıq. Burada $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ -Born maqnitonudur. S-halında orbital

moment sıfır olur və bu özəllik klassik fizikada yoxdur.

Fəsil II-ə aid çalışmalar

Çalışma II.1. Potensial $U(z)=az$ (a -sabitdir) olan sahədə enerjinin, impulsun və impuls momentinin saxlanan kəmiyyət olmasını araşdırın.

Həll: Kvant mexanikasında hərəkət tənliyi

$$\frac{d\hat{Q}}{dt} = \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{Q}\hat{H}]$$

olur və

$$\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} = 0, [\hat{Q}\hat{H}] = 0$$

olanda $\frac{d\hat{Q}}{dt} = 0$ olur. Yəni Q =sabit və ya $\bar{Q} = \text{sabit}$ olur, saxlanılır.

1) $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$ və $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ olduğu üçün $\bar{H} = \text{sabitdir}$.

2) $\frac{\partial \hat{P}_x}{\partial t} = 0, \frac{\partial \hat{P}_x}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{P}_x, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{P}_x, \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) \right] = 0;$ 3)

$\bar{P}_x = \text{sabit}$

$\frac{\partial \hat{P}_y}{\partial t} = 0, \frac{\partial \hat{P}_y}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{P}_y, \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) \right] = 0; \bar{P}_y = \text{sabit}$

4) $\frac{\partial \hat{P}_z}{\partial t} = 0, \frac{d\hat{P}_z}{dt} = 0 + \frac{1}{i\hbar} \left(-i\hbar \frac{daz}{dz} + i\hbar az \frac{d}{dz} \right) = -a; \frac{d\hat{P}_z}{dt} = -a;$

$\bar{P}_z = -a \neq 0$

5) $\frac{d\hat{L}_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ (y\hat{P}_z - z\hat{P}_y) \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + a(y\hat{P}_z - z\hat{P}_y) \right\} -$

$$\begin{aligned}
& -az(y\hat{P}_z - z\hat{P}_y) - \frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)(y\hat{P}_z - z\hat{P}_y) \Big\} = -ay + \\
& + \frac{1}{2i\hbar m} \left\{ \hat{P}_z [(y\hat{P}_y - \hat{P}_y y)\hat{P}_y + \hat{P}_y (y\hat{P}_y - \hat{P}_y y)] - \hat{P}_y ((z\hat{P}_z - \hat{P}_z z)\hat{P}_z + \right. \\
& \left. + \hat{P}_z (z\hat{P}_z - \hat{P}_z z)) \right\} = -ay \\
& \frac{d\hat{L}_x}{dt} = -ay, \frac{d\hat{L}_y}{dt} = ax, \frac{d\hat{L}_z}{dt} = 0
\end{aligned}$$

Eyni qayda ilə

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{L}^2}{dt} &= -a\hat{L}_x y - ay\hat{L}_x + a\hat{L}_y x + ax\hat{L}_y \\
\frac{d\hat{L}^2}{dt} &= -2i\hbar a + 2a(x\hat{L}_y - y\hat{L}_x)
\end{aligned}$$

əldə edirik. Deməli, $U(z) = az$ sahəsində P_x, P_y, \hat{L}_z saxlanılır, lakin P_z, L_x, L_y, L^2 kəmiyyətləri saxlanılmayan kəmiyyətlərdir.

Çalışma II.2. Eni a olan qutuda sərbəst hərəkət edən zərrəciyin enerjisi-ni tapın.

Həll: Dalğa funksiyasının periodikliyinə görə

$$\psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} = \psi(\vec{r} + \vec{a}, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}[Et + \vec{p}(\vec{r} + \vec{a})]}$$

$$Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}}; e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}} = 1, \vec{p}\vec{a} = 2\pi\hbar n, \vec{p} = 2\pi\hbar \frac{n}{\vec{a}}$$

$$p_n = \frac{2\pi\hbar}{a} n, E = \frac{p^2}{2m}, E_n = \frac{P_n^2}{2m} = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2, E_n = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} n^2$$

əldə edirik.

Çalışma II.3. Sonsuz dərin, eni 0 ilə a arasında dəyişən potensial qutuda zərrəciyin enerjisini və dalğa funksiyasını tapın.

Həll: $(0, a)$ intervalından kənarında zərrəciyin enerjisi, potensialın dəyəridən az olur və burada enerji sıfır olur. Lakin $(0, a)$ intervalında

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

yazırıq.

Şchrödinger tənliyinin həlli

$$\psi(x) = ce^{\pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))} x}$$

yazıla bilər. Sərhəd şərtinə görə

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

olmalıdır. Onda $(0, a)$ bölgəsində həll

$$\psi(x) = A \sin(kx + \varphi)$$

olduğu üçün $\psi(0) = \psi(a) = 0$ şərtinə görə

$$\psi(0) = A \sin \varphi, \varphi = 0$$

$$\psi(a) = A \sin ka = 0 \quad ka = n\pi, \quad k = \frac{n\pi}{a}$$

olur. $U=0$ olan zonada

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} = k, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

yazılar. Buradan

$$\frac{\pi^2}{a^2} n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

enerji dəyərini alırıq. Dalğa funksiyası isə

$$\psi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

olacaq. Normalama şərtinə görə

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx = \frac{|A|^2}{2} \int_0^a \left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a} x\right)\right] dx =$$

$$= |A|^2 \left[\frac{a}{2} - \sin\left(\frac{2\pi m}{a} x\right) \right]_0^a = \frac{a|A|^2}{2} = 1$$

yəni

$$A = \sqrt{\frac{a}{2}}, \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{a}{2}} \sin\left(\frac{\pi m}{a} x\right)$$

funksiyasını əldə edərək.

Çalışma II.4. Harmonik osilyatorun məxsusi funksiyalarının ortoqonal olmasını göstərin.

Həll: Osilyatorun məxsusi funksiyaları

$$\frac{d^2 \psi_n}{d\xi^2} + (2n + 1 - \xi^2) \psi_n = 0$$

$$\frac{d^2 \psi_m^*}{d\xi^2} + (2m + 1 - \xi^2) \psi_m^* = 0$$

tənliklərindən tapılır. Bu tənliklərin birincisini ψ_m^* -ə, ikincisini isə ψ_n -ə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallasaq:

$$\int \psi_m^* \frac{d^2 \psi_n}{d\xi^2} d\xi + (2n + 1) \int \psi_m^* \psi_n d\xi - \int \xi^2 \psi_m^* \psi_n d\xi$$

$$\int \psi_n^* \frac{d^2 \psi_m}{d\xi^2} d\xi + (2m + 1) \int \psi_m^* \psi_n d\xi - \int \xi^2 \psi_m^* \psi_n d\xi$$

alınar və bunları tərəf-tərəfə çıxsaq

$$\int \left(\psi_m^* \frac{d^2 \psi_n}{d\xi^2} - \psi_n \frac{d^2 \psi_m^*}{d\xi^2} \right) d\xi = 2(n - m) \int \psi_m^* \psi_n d\xi$$

$$\int \frac{d}{d\xi} \left(\psi_m^* \frac{d^2 \psi_n}{d\xi^2} - \psi_n \frac{d^2 \psi_m^*}{d\xi^2} \right) d\xi = 2(n - m) \int \psi_m^* \psi_n d\xi$$

$$\left(\psi_m^* \frac{d^2 \psi_n}{d\xi^2} - \psi_n \frac{d^2 \psi_m^*}{d\xi^2} \right)_{-\infty}^{+\infty} = 2(n - m) \int \psi_m^* \psi_n d\xi$$

yaza bilərik. Əgər $m \neq n$ -dirsə, onda

$$\int \psi_m^* \psi_n d\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int \psi_m^* \psi_n dx$$

olar. $m=n$ -dirsə, onda

$$\int |\psi_n|^2 d\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int |\psi_n|^2 dx = 1$$

olar. Yə'ni $m \neq n$ olanda müxtəlif enerji dəyərli osilyatorun məxsusi funksiyaları ortoqonaldır:

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int \psi_m^* \psi_n dx = 0$$

Başka sözlə, harmonik osilyatorun məxsusi funksiyaları ortonormalik

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$$

şertini ödəyən funksiyalar olurlar.

Çalışma II.5. Xətti osilyatorun potensial enerjisinin orta qiymətini tapın.

Həll: Osilyatorun enerji təmsilində ifadəsi

$$X_{k'k} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{k}{2}} \delta_{k',k-1} + \sqrt{\frac{k+1}{2}} \delta_{k',k+1} \right]$$

olur. Buradan

$$\bar{X}_{k'k}^2 = \sum_l \bar{X}_{k'l} \cdot \bar{X}_{lk} = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\sqrt{\frac{l}{2}} \delta_{k',l-1} + \sqrt{\frac{l+1}{2}} \delta_{k',l+1} \right] \cdot$$

$$\cdot \left[\sqrt{\frac{k}{2}} \delta_{l,k-1} + \sqrt{\frac{k+1}{2}} \delta_{l,k+1} \right] = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\sqrt{\frac{k(k-1)}{4}} \delta_{k',k-2} + \sqrt{\frac{n^2}{4}} \delta_{k'k} + \right.$$

$$\left. + \sqrt{\frac{(k+1)^2}{4}} \delta_{k'k} + \sqrt{\frac{(k+1)(k+2)}{4}} \delta_{k',k+2} \right]$$

yazarıq. $k' = k$ olanda

$$\overline{X_k^2} = \frac{\hbar}{m\omega} \left(\sqrt{\frac{k^2}{4}} + \sqrt{\frac{(k+1)^2}{4}} \right) = \frac{\hbar}{m\omega} \left(\frac{k}{2} + \frac{k+1}{2} \right) = \hbar \frac{1}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)_p$$

$$\overline{X^2} = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

otensiyal enerji osilyator üçün $U(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$ olduğuna görə

$$\overline{U_n} = \frac{m\omega^2}{2} \overline{x^2} = \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\overline{U_n} = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} E_n, \overline{U_n} = \frac{1}{2} E_n$$

alınar.

Çalışma II.6. Osilyatorun enerjisinin minimum qiymətini tapın.

Həll: Koordinatla impuls arasında qeyrimüəyyənlik münasibəti

$$(\Delta x)^2 (\Delta P_x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{2}$$

şəklindədir. $(\Delta X)^2 = X^2$, $(\Delta P_x)^2 = P_x^2$ olduğu üçün $X^2 \cdot P^2 \geq \frac{\hbar^2}{2}$ yararlıq. Osilyatorun tam enerjisi

$$E = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

olduğundan

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8mx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

alırıq. Enerjinin minimumluğuna görə $\frac{\partial E}{\partial(x^2)} = 0$ olmalıdır. Enerjiden x^2 görə törəmə alsaq

$$-\frac{\hbar^2}{8m(x^2)^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0, \quad m^2\omega^2 - \frac{\hbar^2}{4x^2} = 0$$

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

tapırıq. Onda

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m} \frac{2m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2}$$

Yə'ni, osilyatorun minimum enerjisi

$$E_{\min} \geq \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{olur.}$$

Çalışma II.7. Metal daxilində olan elektron qazının, potensial qutuda sərbəst hərəkət edən elektronlara uyğun olaraq elektron keçiriciliyi meydana çıxarır. Kub şəkilli gümüş parçasının (Vahid iona düşən sıxlıq) sıxlığı $\rho = 10,5g/sm^3$ -dir. Bu elektronun maksimum enerjisini, onun orta enerjisini və elektron qazının təzyiqini tapın.

Həll: Həcmi L^3 olan gümüş kubun daxilində enerjinin qiyməti

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^3} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

müəyyən olunur, burada n_1, n_2, n_3 müsbət tam ədədlərdir (1,2,...)

$n^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ halına baxaq. Radiusları n ilə $n+dn$ olan nöqtələrin sayını

$$\frac{1}{8} 4\pi n^2 dn = \frac{\pi}{2} n^2 dn$$

yaza bilərik. Bu nöqtələrin hər birində spinləri bir-birinə zidd olan iki elektron yerləşdirək. Onda n ilə $n+dn$ arasında $\pi n^2 dn$ qədər elektron olar. Yəni, bu elektronların enerjisi

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad dE = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL^2} ndn$$

olar və E ilə E+dE enerji dəyərləri arasında olan elektronların sayı

$$dN = \pi n^2 dn = \pi \sqrt{\frac{2mL^2}{\pi \hbar^2}} E \quad \frac{mL^2}{\pi^2 \hbar^2} dE$$

və ya

$$dN = \sqrt{2m} \frac{mL^3}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE$$

alınar. Enerjinin maksimum qiymətini tapmaq üçün əsas halda olan elektronların sayını

$$N = \sqrt{2m} \frac{mL^3}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_{\max}} \sqrt{E} dE$$

yazırıq. Vahid həcmə düşən elektronların sayı (sıxlıq) $N = \frac{N}{L^3}$ olduğu üçün

$$N = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2mE_{\max}}{\hbar^2} \right)^{3/2}$$

yaza bilərik. Buradan

$$E_{\max} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 N)^{2/3}$$

alırıq. $N = \frac{\rho}{M}$ olduğuna görə M bir gümüş atomunun kütləsi olmaq

la $M = 1,80 \cdot 10^{-22}$ gram olduğu üçün $N = 5,85 \cdot 10^{22} (sm)^{-3}$ əldə edirik.

E_{\max} qiymətindən $E_{\max} = 8,80 \cdot 10^{-12} \text{ erg} = 5,55 \text{ ev}$ dəyərini alırıq. Bu qiymət istilik enerjisindən ($kT = 0,026 \text{ ev}$ ($T = 300 \text{ K}$))) qat-qat çoxdur. Ona görə istilik enerjisi elektronların enerjisini cüzi dəyişir. Enerjinin bu dəyişməsinə fermi qazın cırlaşması deyilir. E_{\max} ifadəsi elektron qazının Fermi enerjisi adlanır. Elektron qazının orta enerjisi

$$\bar{E} = \frac{\int E dN}{\int dN}$$

düsturu ilə təyin olunur. dN qiymətini burada yerinə yazsaq

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{E_{\max}} \sqrt{E} E dE}{\int_0^{E_{\max}} \sqrt{E} dE} = \frac{3}{5} E_{\max}$$

$$\bar{E} = \frac{3}{5} E_{\max}$$

alanıq. Elektron qazının təzyiqi qazın həcmnin azalmasında görülən işi isə $dA = p dv$ müəyyən edir. Bu iş qazın enerjisinin azalmasına sərf olunur:

$$dA = dU$$

Digər tərəfdən qaz zərrəciklərinin enerjilərinin cəmi

$$U = N \cdot \bar{E} = \frac{3}{5} N E_{\max}$$

olar. Bu enerji qazın həcmi ilə mütənasib olduğu üçün

$$U \sim V^{-2/3}$$

$$\frac{dU}{U} = -\frac{2}{3} \frac{dV}{V}$$

yazılar. Onda qazın təzyiqi

$$P = -\frac{dU}{dV} = \frac{2}{3} \frac{U}{V} = \frac{2}{5} N E_{\max}$$

alınar və təzyiqi üçün $P = 2,06 \cdot 10^{11} \text{ dina/sm}^2 \approx 200000 \text{ atm}$ əldə edilər.

Çalışma II.8. Müstəvi osilyatorun dalğa funksiyasını və enerji qiymətini tapın.

Həll: İkiölçülü osilyatorun Hamilton operatoru

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2)$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} y^2$$

Bu operatorların məxsusi funksiyaları

$$\psi_{n_1}(x) = C_{n_1} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_{n_1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$\psi_{n_2}(y) = C_{n_2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2} H_{n_2}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)$$

olur. Bu halların enerjisi

$$E_{n_1} = \hbar\omega\left(n_1 + \frac{1}{2}\right)$$

$$E_{n_2} = \hbar\omega\left(n_2 + \frac{1}{2}\right)$$

olacaq. Onda müstəvi osilyatorun enerjisi üçün

$$E = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1) = \hbar\omega(N + 1)$$

əldə edərik. $N = n_1 + n_2$ kvant ədəddir. Yəni, müstəvi osilyatorun enerjisi $(N+1)$ dəfə cırlaşmış haldadır.

Çalışma II.9. Yüklü zərrəcik sabit maqnit sahəsində hərəkət edərkən onun enerjisini tapın.

Həll: Maqnit sahəsini OZ oxu istiqamətində yönəldək: $B_x = B_y = 0, B = B_z$. Sahənin vektor potensialı

$A_y = A_z = 0, A_x = By$ olar. Xarici sahədə Hamilton operatoru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{mc}\vec{A}\hat{p} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2$$

olduğu üçün Şrödinger tənliyi

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{mc}\vec{A}\hat{p} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2\right)\psi = E\psi$$

və ya

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e}{mc}A_x\hat{p}_x + \frac{e^2}{2mc^2}A_x^2\right)\psi = E\psi$$

olur.

Buradan

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{ie\hbar}{mc} B y \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e^2}{2mc^2} B^2 y^2 \right) \psi = E \psi$$

tənliyini yazırıq. Bu tənliyin həllini

$$\psi(x, y, z) = f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)}$$

şəklində axtaraq. (α və β -lar sabitlərdi) Onda

$$\nabla^2 f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)} = -(\alpha^2 + \beta^2) f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)} + \frac{d^2 f(y)}{dy^2} e^{i(\alpha x + \beta z)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)} = i\alpha f(y) e^{i(\alpha x + \beta z)}$$

olduğundan

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\alpha^2 + \beta^2 - \frac{d^2}{dy^2} \right) f(y) + \frac{e\hbar\alpha B y}{mc} f(y) + \frac{e^2 B^2 y^2}{2mc^2} f(y) = E f(y) \text{ t\ae}$$

nliyini alırıq. Əgər

$$y = y' - \frac{\alpha\hbar}{eB}, \quad \omega_o = \frac{eB}{mc}, \quad \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$$

əvəzləməsi aparsaq bu tənliyi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(y)}{dy^2} - \frac{m\omega_o^2 y^2}{2} f(y) = \varepsilon f(y)$$

yaza bilərik. Göründüyü kimi bu tənlik harmonik osilyatorun tənliyidir. Yə'ni

$$f_n(\xi) = H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega_o}{\hbar}} y'$$

$$\varepsilon = \hbar\omega_o \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$$

$$E_n = \frac{e\hbar B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$$

ifadələrini alırıq. Burada $\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m}$ -OZ oxu boyunca kinetik enerji,

$\frac{e\hbar B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right)$ isə XY müstəvisində maqnit sahəsinə perpendikulyar olaraq hərəkət edəndə osilyatorun enerjisi olur.

Çalışma II.10. Harmonik osilyatorun kvadrupol şüalanmasını tapın və onu spontan şüalanma intensivliyi ilə müqayisə edin.

Həll: Kvadrupol şüalanmanın intensivliyi

$$I = \frac{1}{180c^5} (D_{kk}^m)^2$$

ilə təyin olunur. Burada

$$D_{kk} = e(3x_k x_k - r^2 \delta_{kk}) (x^2)_{kk} = \sum x_{k\gamma} x_{k\gamma}$$

ifadə edilir. Osilyator üçün matris elementi

$$x_{k-1,k} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\frac{k}{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} k$$

$$x_{k+1,k} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (k+1)$$

olduğuna görə

$$(x^2)_{k-2,k} = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{k(k-1)}$$

$$(x^2)_{k+2,k} = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{(k+1)(k+2)}$$

$$(x^2)_{k,k} = \frac{\hbar}{2m\omega} (2k+1)$$

kvadrupol şüalanmanın matris elementlərini alaraq və buradan da seçmə qaydası olaraq

$$\Delta k = 0, \pm 2$$

əldə edirik. Spontan şüalanmanın ehtimalı

$$A_{kk} = \frac{\omega_{kk}^5}{90\hbar c^5} (D_{mn})_{kk}^* (D_{mn})_{kk}$$

Eynişteyn əmsalı ilə təyin olunur. Burada

$$(D_{mn})_{kk} = \int \psi_k^* D_{mn} \psi_k dx$$

$E_n \approx n\hbar\omega$ halində, yəni, böyük kvant ədədlərində kvadrupol keçidin ehtimalı

$$W^{kvad} = \frac{16 e^2 \omega^2}{15 m^2 c^5} E_n^2$$

olar. Dipol şüalanmasının ehtimalı

$$W^{dip} = \frac{2 e^2 \omega^2}{3 m c^3} E_n$$

olduğu üçün, onların nisbəti

$$\frac{W^{kvad}}{W^{dip}} = \frac{4}{5} \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \frac{2E_n}{m\omega^2} = \frac{8}{5} \frac{E_n}{mc}$$

qiymətini alar. Yə'ni

$$\frac{W^{kvad}}{W^{dip}} \approx \left(\frac{2}{m\omega^2} \right) \frac{E_n}{\lambda^2}$$

tapılar.

Çalışma II.11. Potensial qutuda olan zərrəciyin koordinatının orta qiymətini və kvadratik xətanın orta qiymətini tapın.

Həll: Potensial qutuda zərrəciyin dalğa funksiyası

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

olur. Onda:

$$\bar{x} = \int_0^a \psi_n^*(x) x \psi_n(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = \frac{a}{2}$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{(x^2 - 2x\bar{x} + \bar{x}^2)} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \overline{x^2} - \frac{a^2}{4}$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a \psi_n^*(x) x^2 \psi_n(x) dx = \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right)$$

$$\overline{(\Delta x)^2} = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{4} \right) - \frac{a^2}{2\pi^2 n^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right)$$

$$\bar{x} = \frac{a}{2}, \overline{(\Delta x)^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right)$$

Çalışma II.12. Sferik-simmetrik sahədə impuls momenti olan zərrəciyin kvadrupol momentini hesablayın.

Həll: Sferik sahədə zərrəciyin hal funksiyası

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

zərrəciyin kvadrupol momenti tenzoru kənniyyət olub

$$Q_{ik} = 3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}$$

izi sıfırdır. Onun beş asılı olmayan komponenti var:

$$r^2 Y_2^0 = c(3z^2 - r^2), r^2 Y_2^{\pm 1} = \pm c\sqrt{6}(x \pm iy)z$$

$$r^2 Y_2^{\pm 2} = \frac{c}{2} \sqrt{6}(x \pm iy)^2, c = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}, \oint |Y_l^m|^2 d\Omega = 1$$

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$$

Yə'ni

$$r^2 Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} Q_{33}, r^2 Y_2^{\pm 1} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (Q_{13} \pm iQ_{33})$$

$$r^2 Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{5}{24\pi}} \left[\frac{1}{2} (Q_{11} - Q_{22}) \pm iQ_{12} \right]$$

olur. Orta qiymət Kvadrupol momentin

$$\bar{Q}_{ik} = \int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m|^2 Q_{ik} d\Omega$$

ilə təyin olunur. Q_{ik} -nin diaqonal olmayan elementləri φ -dən asılıdır.

$|Y_l^m|^2$ isə φ -dən asılı olmur. Ona görə uyğun inteqrallar sıfır olar. Diaqonal elementlər

$$Q_{xx} = r^2(3\sin^2\theta\cos^2\varphi - 1)$$

$$Q_{yy} = r^2(3\sin^2\theta\sin^2\varphi - 1)$$

$$Q_{zz} = r^2(3\cos^2\theta - 1)$$

φ -yə görə inteqrallama 1/2 vuruğu verər və

$$\frac{3}{2}\sin^2\theta - 1 = -\frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$$

olur. $\overline{Q}_{xx} = \overline{Q}_{yy} = \overline{Q}_{zz}$ olduğu üçün, əgər

$$\overline{r^2} = \int_0^{\infty} r^2 |R_{nl}(r)|^2 dr$$

işarəsi qəbul etsək,

$$\overline{Q}_{zz} = \overline{r^2} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (3\cos^2\theta - 1) |Y_l^m|^2 d\Omega$$

yazarıq.

$$\cos\theta Y_l^m = a_l^m Y_{l+1}^m + a_{l-1}^m Y_{l-1}^m$$

olduğuna görə $\left(a_l^m = \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2} \right)$

$$\overline{Q}_{zz} = \overline{r^2} \left((a_l^m)^2 + (a_{l-1}^m)^2 \right)$$

əldə edirik. Buradan

$$\overline{Q}_{zz} = \overline{r^2} \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l+1)(2l+3)}$$

taparıq. S halı üçün $l=0$ olur və $\overline{Q}_{zz} = 0$ olar. p- halı üçün isə

$$\overline{Q}_{zz} = \frac{4}{5} \overline{r^2} \left(1 - \frac{3}{2} m^2 \right)$$

alırıq. $m=0$ olanda $\overline{Q}_{zz} > 0$ olur, $m=1$ olanda isə \overline{Q}_{zz} iki dəfə az olar və $\overline{Q}_{zz} < 0$ qiymətini alar.

Çalışma II.13. Müxtəlif məxsusi qiymətləri olan \hat{Q} operatorun məxsusi funksiyalarının ortoqonallığını göstərir.

Həll: Məxsusi qiymət və məxsusi funksiya tənliyindən

$$\hat{Q}\psi_1 = q_1\psi_1$$

$$\hat{Q}\psi_2 = q_2\psi_2$$

$$\int \psi_1^* (\hat{Q}\psi_2) dV = \int \psi_1^* q_2 \psi_2 dV = q_2 \int \psi_1^* \psi_2 dV$$

$$\int \psi_2 \hat{Q}^* \psi_1^* dV = q_1 \int \psi_1^* \psi_2 dV$$

$$\int \psi_1^* \hat{Q}\psi_2 dV = \int \psi_2 \hat{Q}^* \psi_1^* dV \quad q_2 \int \psi_1^* \psi_2 dV = q_1 \int \psi_1^* \psi_2 dV$$

alırıq. Buradan

$$q_2 \neq q_1 \quad \int \psi_1^* \psi_2 dV = 0 \text{ olar.}$$

III Fəsil

Təsvir və ya Təmsil (göstərim) nəzəriyyəsi elementləri

İkinci fəsildə fiziki kəmiyyətlərə qarşı qoyulan operatorlar diferensial operatorlar idi. Ona görə də belə təsvirdə kvant mexanikasında alınan tənliklər xətti diferensial tənliklər olurlar. Lakin operatorlar arasında komutasiya münasibətləri fiziki məna daşdığı üçün bu məna, operatorların hansı riyazi şəkildə verilməsindən asılı olmaz. Operatorların bu və ya başqa riyazi şəkildə verilməsi, onların birinin digərinə çevrilməsi, təmsil və ya təsvir (göstərim) nəzəriyyəsində araşdırılır. Operatorları və hal vektorunu bir təmsildən (təsvirdən) başqa bir təmsilə çevirəndə matris cəbrindən istifadə olunur. Ona görə kvant mexanikasının bu yeni şəkli matris kvant mexanikası adını daşıyır.

Bu baxımdan ikinci fəsildə aldığımız bir çox anlayışların yeni şəklin təmsil nəzəriyyəsində araşdıracağın.

§26. Dalğa funksiyasının müxtəlif təsvirdə verilməsi

Məxsusi funksiyası diskret spektrə uyğun olan məxsusi funksiyadırsa, \hat{F} operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyasını təyin edən tənlik

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n \quad (26.1)$$

şəklində olur. İxtiyari halın dalğa funksiyasını $\psi(\vec{r}, t)$ məxsusi funksiyaların superpozisiyası şəklində

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n \psi_n \quad (26.2)$$

yaza bilərik. (26.2)-də ψ_n , \hat{F} operatorunun məxsusi funksiyasıdır, $\psi(\vec{r}, t)$ isə koordinat təmsilində verilmiş ixtiyari halın funksiyasıdır. (26.2)-ni ψ_n^* -ə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallasaq,

$$\int \psi_n^* \psi(\vec{r}, t) dV = \int \psi_n^* \sum_n a_n \psi_n dV = \sum_n a_n \int \psi_n^* \psi_n dV$$

alırıq. Diskret spektrin məxsusi funksiyaları ortonormallanan funksiyalar olduğu üçün, (6.5)-ə görə

$$\int \psi_n^* \psi_n dV = \delta_{n'n} = \begin{cases} 1 & n' = n \\ 0 & n' \neq n \end{cases}$$

olur. Onda

$$\int \psi_n^* \psi(\vec{r}, t) dV = \sum_n a_n \delta_{n'n} = a_{n'} \quad (26.3)$$

$$a_{n'} = \int \psi_n^* \psi(\vec{r}, t) dV \equiv (\psi_n, \psi)$$

alınar. (26.3) göründüyü kimi alınan $a_{n'}$ yeni təsvirdə $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyasının ifadəsi olur. Çünki (26.3)-i dV həcmi üzrə inteqrallasaq nəticə yalnız n' -dən asılı olar.

Əgər \hat{F} operatoru kəsilməz spektrə malikdirsə, onda

$$\hat{F}\psi_f = F\psi_f \quad (26.4)$$

yazılar və ψ_f (və ya $\psi(f)$) kəsilməz spektrin məxsusi funksiyalarıdır. $\psi(\vec{r}, t)$ -ni $\psi_f \equiv \psi(f)$ -in inteqralı şəklində yazıb

$$\psi(\vec{r}, t) = \int a(f) \psi(f) df \quad (25.5)$$

bu ifadənin hər iki tərəfini $\psi^*(f')$ vuraraq, inteqrallasaq

$$\int \psi^*(f') \psi(\vec{r}, t) dV = \iint a(f) \psi^*(f') \psi(f) df dV$$

alınar. (5.8)-ə görə

$$\int \psi^*(f') \psi(f) dV = \delta(f' - f)$$

olduğu üçün

$$\int a_f \delta(f' - f) df = \int \psi^*(f') \psi(\vec{r}, t) dV$$

əldə edirik. Buradan

$$a(f') = \int \psi^*(f') \psi(\vec{r}, t) dV \quad (26.6)$$

alınır. (25.6) ifadəsi yeni təmsildə $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyasının ifadəsi olur. (26.3) və (26.6) düsturları koordinat təsvirində verilmiş $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyanın \hat{F} təmsilində alınan a_n və $a(f)$ funksiyaların olur. Göründüyü kimi \hat{F} -in məxsusi funksiyaları ψ_n^* və $\psi^*(f)$ ilə təmsil olunurlar. Örnək olaraq koordinat təmsilində verilmiş dalğa funksiyasını enerji təmsilində yazsaq

$$a_E(t) = \int \psi_E^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) dV \quad (26.7)$$

olar. Burada ψ_E^* funksiyası $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$ tənliyinin həllidir. İmpuls təmsilində isə

$$a_p = \int \psi_p^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) dV$$

olar və ψ_p impuls operatorunun məxsusi funksiyası olduğuna görə ψ_p -ni

$$\psi_p(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$$

şəklində yazsaq,

$$a_p = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \psi(\vec{r}, t) dV \quad (26.8)$$

impuls təmsilində dalğa funksiyası olur.

İmpuls momenti təsvirində dalğa funksiyası

$$a_L = \int \psi_L^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) dV = \int Y_l^{*m}(\theta, \varphi) \psi(\vec{r}, t) dV$$

yazılır. Burada Y_l^{*m} funksiyası impuls momenti operatorunun məxsusi funksiyasıdır. Örnək olaraq

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i(p_0+p)x} \quad \left(-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}\right)$$
 funksiyasını impuls təmsilində

yazaq.

$$\begin{aligned} a_p &= \int \psi_p^*(x) \psi(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}px} \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i(p_0+p)x} dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} e^{i\frac{p-p_0}{\hbar}x} dx = \frac{2\hbar}{\sqrt{2\pi a \hbar}} \frac{1}{p_0} \frac{e^{\frac{i}{2\hbar}p_0 a} - e^{-\frac{i}{2\hbar}p_0 a}}{2i} = \end{aligned} \quad (26.9)$$

$$= \frac{2\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \frac{\sin \frac{p_0}{\hbar}}{p_0} = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a}} \frac{\sin \frac{p_0}{\hbar}}{p_0}$$

$$a_p = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a}} \frac{\sin \frac{p_0}{\hbar}}{p_0}$$

Bu impuls təmsilində $\psi(x)$ funksiyasının ifadəsi olur.

Beləliklə, requlyar funksiya olan $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyası (2.1) şərtini ödəyən funksiya olar və a_n və $a(f)$ əmsalları ilə təyin olunur. Ona görə sistemin halı ya requlyar funksiya olan $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyası, yadək

$$\psi = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (26.10)$$

matrisi ilə təsvir olunur. (26.2), (26.3), (26.5) və (26.6) düsturlarından istifadə edərək və Hilbert fəzasının vektorunun a_0, a_1, a_2, \dots komponentlərini bilərək, ψ -funksiyasını və yadək ψ -ni bilərək, a_0, a_1, a_2, \dots əmsallarını tapmaq mümkündür. Normalama şərtinə görə

$$\int |\psi|^2 dV = \int \psi^* \psi dV = 1$$

olduğu üçün superpozisiya prinsipinə istinad etsək

$$\int \sum_{n'} a_n^* \psi_n^* \sum_n a_n \psi_n dV = 1$$

əldə edirik. Bu ifadəni

$$\sum_{n'} \sum_n a_n^* a_n \int \psi_n^* \psi_n dV = 1 \quad (26.11)$$

yaza bilirik. Diskret spektr halında ortonormallıq şərtinin

$$\int \psi_n^* \psi_n dV = \delta_{n'n}$$

olduğunu nəzərə alsaq, (26.11)-dən

$$\sum_{n'} \sum_n a_n^* a_n \delta_{n'n} = 1$$

yazaraq (26.11)-i

$$\sum_n a_n^* a_n = \sum_n |a_n|^2 = 1 \quad (26.12)$$

kimi alırıq. Kəsilməz spektr halında isə (26.11)-in yerinə

$$\iiint a^*(f')\psi_{f'}^* a(f)\psi_f df df' dV = 1$$

ifadəsini alırıq. Kəsilməz spektr halında

$$\int \psi_{f'}^* \psi_f dV = \delta(f' - f)$$

olduğuna görə

$$\iint a^*(f') a(f) \delta(f' - f) df df' = 1$$

olar. δ -funksiyasının

$$\int f(x) \delta(x - x') dx' = f(x)$$

xassəsinə əsasən

$$\int a^*(f) a(f) df = 1$$

və ya

$$\int |a(f)|^2 df = 1 \quad (26.13)$$

şərtini əldə edirik. (26.12) və (26.13) şərtləri məxsusi funksiyaların tam sistem təşkil etməsi şərtidir. Çünki bu şərtlər istənilən ixtiyari funksiyanı, məxsusi funksiyaların superpozisiyası şəklində təsvir etməyə imkan verir.

§27. Operatorların müxtəlif təsvirdə yazılışı

Operatorların tərifinə görə eyni çoxluqda verilmiş bir funksiyayı, başqa bir funksiyaya çevirmə əməliyyatına operator deyildiyi üçün

$$\psi = \hat{Q}\varphi \quad (27.1)$$

yazılır. Burada verilən ψ, φ və \hat{Q} -lər eyni dəyişənlərin funksiyasıdır. Əgər burada ψ , və φ -ni hər hansı bir operatorun məxsusi funksiyalarının superpozisiyası kimi

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_n a_n \psi_n \\ \varphi &= \sum_n b_n \psi_n \end{aligned} \quad (27.2)$$

yazmış olursaq, onda

$$\sum_n a_n \psi_n = \hat{Q} \sum_n b_n \psi_n$$

olar. Bu ifadənin hər iki tərəfini ψ_n^* -ə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallasaq

$$\sum_n a_n \int \psi_n^* \psi_n dV = \sum_n b_n \int \psi_n^* \hat{Q} \psi_n dV \quad (27.3)$$

əldə edərik. Məxsusi funksiyaların ortonormalanma şərtindən istifadə etsək

$$\sum_n a_n \delta_{n'n} = \sum_n b_n Q_{n'n}$$

yazırıq. Buradan

$$a_{n'} = \sum_n b_n Q_{n'n} \quad (27.4)$$

haradakı

$$Q_{n'n} = \int \psi_n^* \hat{Q} \psi_n dV \quad (27.5)$$

(27.1) və (27.4) ifadələri müxtəlif təmsillərdə verilmiş hal vektorunun təmsilidir. (27.5) düsturu isə yeni təmsildə verilmiş operatorun ifadəsidir və \hat{Q} operatorunun matris elementi adlanır.

Koordinat təmsilində koordinata vurma əməliyatı olan operatoru impuls təmsilində ifadəsini tapaq. Matris elementlərinin (27.5) ifadəsinə görə koordinat operatoru impuls təmsilində

$$\bar{r}_{p'p} = \int \psi_p^* \hat{r} \psi_{p'} dV$$

yazılar. Burada impuls operatorunun məxsusi funksiyasını yerinə

yazmış olursaq $\left(\psi_p \sim e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} \right)$

$$\begin{aligned} \bar{r}_{p'p} &= (2\pi\hbar)^{-3} \int e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \vec{r}} \hat{r} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} dV = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} (2\pi\hbar)^{-3} \int e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p}' - \vec{p}) \vec{r}} dV \end{aligned}$$

alırıq. Bu inteqral δ -funksiya olduğu üçün

$$\bar{r}_{p'p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \delta(\vec{p}' - \vec{p})$$

əldə edərik. Beləliklə, matris şəkilində operatorun kəsilməz spektr halında ifadəsi

$$b(\vec{p}') = \int \vec{r}_{p'} C(p) dp$$

yazılmış oluruq. Yəni

$$b(\vec{p}') = -i\hbar \int \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \delta(\vec{p}' - p) C(p) dp$$

olur. Bunu hissə-hissə inteqrallasaq

$$b(\vec{p}') = [-i\hbar \delta(\vec{p}' - \vec{p}) C(p)]_{-\infty}^{\infty} + i\hbar \int \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \frac{\partial C(\vec{p})}{\partial \vec{p}} d\vec{p}$$

yazılar. Bu ifadədə birinci həddi redulyarlıq şərtinə görə sıfır olur və ondada

$$b(\vec{p}) = i\hbar \frac{\partial C(\vec{p})}{\partial \vec{p}} \quad (24.6)$$

əldə edilir. Yəni, koordinat təmsilində verilmiş (27.1) tənliyinə ekvivalent tənlikdir. Onda

$$\hat{r} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \quad (27.7)$$

operatoru impuls təsvirində verilmiş koordinat operatorudur. Deməli, koordinat operatoru impuls təmsilində impulsa görə diferensial operatorudur. Eyni qayda ilə kəsilməz spektrə malik olan, məxsusi qiymətlərini və məxsusi funksiyalarını istifadə etmiş olursaq,

$$\psi = \int a(f) \psi_f df, \quad \varphi = \int b(f) \psi_f df \quad (27.8)$$

yazıb

$$\int a(f) \psi_f df = \hat{Q} \int b(f) \psi_f df$$

ifadələrinin hər tərəfini ψ_f^* vurub, inteqrallasaq (V həcmi üzrə)

$$\iint a(f) \psi_f^* \psi_f df dV = \iint b(f) \psi_f^* \hat{Q} \psi_f df dV$$

alırıq. Mə'lumdur ki, kəsilməz spektrin məxsusi funksiyaları δ -funksiyaya normalanan funksiyadır:

$$\int \psi_f^* \psi df dV = \delta(f' - f)$$

Eyni zamanda

$$Q_{ff} = \int \psi_f^* \hat{Q} \psi_f dV \quad (27.8^1)$$

işarəsi qəbul olunarsa,

$$\int a(f) \delta(f' - f) df = \int b(f) \mathcal{Q}_{f,f'} df$$

və buradanda

$$a(f') = \int b(f) \mathcal{Q}_{f,f'} df \quad (27.9)$$

alınar.

Kəsilməz spektr halında da (27.1) ilə (27.9) ifadələri bir-birinə ekvivalent ifadələrdi, yalnız onlar başqa- başqa təsvirlərdə yazılmış dalğa funksiyalardı.

(27/5)-i vw (27/8)-i matris ;wklindw dw yazmaq m]mk]nd]r^r

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \cdots & Q_{1n} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} \cdots & Q_{2n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ Q_{n'1} & Q_{n'2} \cdots & Q_{n'n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \quad (27.10)$$

Kəsilməz spektrin matrisi isə hər kəməsi dolu olan bir matrisdir. Buradan bəlli olur ki, hər bir operatora qarşı yeni təmsildə (təsvirində) bir matris uyğun gəlir. Onda (27.1) ifadəsini, M matrisini φ vektoruna təsirini

$$\psi = M\varphi$$

kimi yazı bilərik. Yəni sonsuz sayda komponentləri olan φ -vektoruna

$$\begin{aligned} \psi_1 &= M_{11}\varphi_1 + M_{12}\varphi_2 + \cdots + M_{1k}\varphi_k + \cdots \\ \psi_2 &= M_{21}\varphi_1 + M_{22}\varphi_2 + \cdots + M_{2k}\varphi_k + \cdots \\ &\cdots + \cdots + \cdots + \cdots + \cdots + \cdots + \cdots \\ \psi_k &= M_{k1}\varphi_1 + M_{k2}\varphi_2 + \cdots + M_{kk}\varphi_k + \cdots \\ &\cdots + \cdots + \cdots + \cdots + \cdots + \cdots + \cdots \end{aligned} \quad (27.11)$$

yazılar və M φ -nində sonsuz sayda komponentləri olan vektordur. M -matrisi

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \cdots & M_{1k} & \cdots \\ M_{21} & M_{22} \cdots & M_{2k} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ M_{k1} & M_{k2} \cdots & M_{kk} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \quad (27.12)$$

olaraq, ψ -vektorunun komponentləri

$$a'_k = \sum_{k=1}^{\infty} a_k M_{kk} \quad (27.13)$$

düsturu ilə təyin olunur.

Matrislərin toplanması və vurulması, operatorların toplanması və vurulması kimidir. Yə'ni

$$C\psi = A\psi + B\psi, D\psi = AB\psi$$

$$A + B = C, C_{n'n} = \int \psi_n^* C \psi_n dV = \int \psi_n^* (A + B) \psi_n dV = \int \psi_n^* A \psi_n dV + \int \psi_n^* B \psi_n dV; C_{n'n} = A_{n'n} + B_{n'n}$$

olur. Digər tərəfdən $A \cdot B = D$ olduqda

$$\int \psi_n^* AB \psi_n dV = \int \psi_n^* A (B \psi_n) dV = \int \psi_n^* A \varphi_n dV = A_{n'n} \quad (27.14)$$

əldə edirik. $B\psi_n = \varphi_n$ bir funksiyadır və ortonormal olan bu funksiyaları ψ_k -lərin sırası kimi yazıla bilər

$$\hat{B}\psi_n = \sum_k b_k \psi_k \quad (27.15)$$

burada

$$b_k = \int \psi_k^* \hat{B}\psi_n dV = B_{kn} \quad (27.16)$$

(26.15)-i (26.14)-də yazırıqsa

$$D_{n'n} = \int \psi_n^* A \sum b_k \psi_k dV = \int \psi_n^* A \sum B_{kn} \psi_k dV = \sum B_{kn} \int \psi_n^* A \psi_k dV = \sum_k B_{kn} A_{n'k}$$

olar. Yə'ni

$$D_{n'n} = \sum_k A_{n'k} B_{kn} \quad (27.17)$$

alınır. Deməli, iki matrisin hasilində, bir matrisin uyğun sətir elementlərini, o biri matrisin uyğun sütun elementlərinə vurub, cəmləmək lazımdır.

(27.5) düsturundan istifadə edərək, ermitlik şərtini matris şəklində yazıla bilər

$$\int \psi_n^* \hat{Q} \psi_n dV = \int \psi_n^* \hat{Q}^* \psi_n dV$$

ermitliyə görə buradan

$$Q_{n'n} = Q_{nn}^* \quad (27.18)$$

alarıq. Yəni ermit operator, elementləri kompleks qoşma olan və eyni zamanda transporizə olunan matrisə uyğun gəlir. Əgər

$$\hat{Q}\psi = q\psi$$

tənliyi varsa və hər hansı bir \hat{F} operatorunun, ψ_n məxsusi funksiyası mövcuddursa, onda

$$\hat{Q}\sum_k a_k \psi_k = q\sum_k a_k \psi_k$$

yazarıq. Hər iki tərəfini ψ_k^* -ə vurub, integrallasaq

$$\begin{aligned} \sum_k a_k \int \psi_k^* \hat{Q} \psi_k dV &= q \sum_k a_k \int \psi_k^* \psi_k dV \\ \sum (Q_{kk} - q \delta_{kk}) a_k &= 0 \end{aligned} \quad (27.19)$$

tənliyini alırıq. Buradan

$$\det(Q_{kk} - q \delta_{kk}) = 0 \quad (27.20)$$

və ya

$$\begin{pmatrix} Q_{11} - q & Q_{12} \cdots & Q_{1k} \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} - q \cdots & Q_{2k} \cdots \\ \dots & \dots & \dots \dots \\ Q_{k'1} & \dots & Q_{k'k} - q \dots \\ \dots \dots \dots \dots \end{pmatrix} = 0$$

tənlik kimi yazılır. (27.20) tənliyinə bəzən əsri tənlik də deyilir. Fiziki kəmiyyətin orta qiyməti diskret məxsusi funksiyalarına uyğun olanda

$$\langle F \rangle = \int \psi^* \hat{F} \psi dV = \sum_k a_k \psi_k^* \hat{F} \sum_k a_k \psi_k dV = \sum_{k'} \sum_k a_{k'}^* a_k F_{k'k} \quad (27.21)$$

$$F_{k'k} = \int \psi_k^* \hat{F} \psi_k dV$$

şəklində yazılır. Əgər kəsilməz spektrin məxsusi funksiyaları varsa, orta qiymət

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \iiint a^*(k') \psi(k') \hat{F} a(k) \psi(k) dV dk dk' = \\ &= \iint a^*(k') a(k) dk dk' F_{kk} \end{aligned}$$

belə yazılar. Burada

$$F_{kk} = \int \psi^*(k') \hat{F} \psi(k) dV \quad (27.22)$$

Şrödinger tənliyinin də

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

matris şəklində yazmaq olar. Bunun üçün tənlikdə olan ψ -funksiyayı məxsusi funksiyaların cəmi kimi yazaraq,

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k \psi_k$$

$$i\hbar \sum_k \left(\frac{\partial a_k}{\partial t} \psi_k + a_k \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \hat{H} \sum_k a_k \psi_k$$

alırıq. Burada $a_k = f(t)$ zamanın funksiyasıdır. ψ_k -lar isə zamandan asılı olmaz. Onda

$$\sum_k i\hbar \frac{da_k}{dt} \psi_k = \sum_k a_k \hat{H} \psi_k$$

əldə edirik. Bu ifadənin hər iki tərəfini ψ_k^* -a vurub, integrallasaq

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \int \psi_k^* \psi_k dV = \sum_k a_k \int \psi_k^* \hat{H} \psi_k dV$$

alınar. Buradan

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \delta_{kk} = \sum_k a_k H_{kk} \quad (27.23)$$

yazarıq. (26.23)-dən də

$$i\hbar \frac{da_k}{dt} = \sum_k H_{kk} a_k \quad (27.24)$$

alınar. (26.24)-də H_{kk}

$$H_{kk} = \int \psi_k^* \hat{H} \psi_k dV \equiv (\psi_k^* \cdot \hat{H} \psi_k) \equiv \langle \psi_k | H \psi_k \rangle \quad (27.25)$$

Hamilton operatorunun matris elementidir. (27.24) tənliyi də Şrödinger tənliyidir, lakin bu tənlik yeni təmsildə yazılmışdır. Hamilton operatoru ermit operatoru, olduğu üçün

$$H_{k\kappa} = H_{\kappa k}^* \quad (27.26)$$

yazılar. Əgər (27.25) matris elementində ψ_k -lar enerji operatorunun məxsusi funksiyasıdırsa, onda

$$\hat{H}\psi_k = E\psi_k$$

tənliyindən istifadə etsək, (27.25)-dən

$$H_{k\kappa} = \int \psi_k^* E\psi_\kappa dV = E \int \psi_k^* \psi_\kappa dV$$

yaza bilərik. Buradan

$$H_{k\kappa} = E\delta_{k\kappa} \quad (27.27)$$

olur. Yəni enerji təmsilində hamilton operatorunun matris elementi dioqonal matris elementidir. Ümumiyyətlə, hər bir operator öz təmsilində dioqonal matrislə xarakterizə olunur. Əgər $\hat{Q}\psi_q = q\psi_q$ -dirsə və ψ_q operatorunun məxsusi funksiyasıdırsa

$$\int \psi_q^* \hat{Q}\psi_q dV = q \int \psi_q^* \psi_q dV = q\delta_{q'q} \quad (27.28)$$

$$Q_{q'q} = q\delta_{q'q}$$

olar. Yəni $Q_{q'q}$ dioqanal matris olub

$$Q_{q'q} = \begin{pmatrix} Q_{11} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & Q_{22} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & Q_{k\kappa} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

şəkilindədir.

§28. Unitar çevirmələr

Xətti və ermit operatoru ixtiyari bir təmsildən digər təmsilə çevirmək üçün unitar çevirmələrdən istifadə olunur. \hat{Q} operatoru hər hansı bir F təmsilində Q_{mn} və hər hansı bir başqa təmsildə

$Q_{\alpha\beta}$ olsun. Yəni F təsvirində məxsusi funksiyalar $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_m, \dots, \psi_n, \dots$ dir. ($\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n$), G təsvirində məxsusi funksiyalar $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_\beta, \dots, \varphi_\alpha, \dots$ dir. Başqa sözlə

$$\begin{aligned} Q_{mn} &= \int \psi_m^* \hat{Q} \psi_n dV && \text{F - təmsili} \\ Q_{\alpha\beta} &= \int \varphi_\beta^* \hat{Q} \varphi_\alpha dV && \text{G - təmsili} \end{aligned} \quad (28.1)$$

yazılar. İndi $Q_{mn} \xrightarrow{\leftarrow} Q_{\alpha\beta}$ keçidini aparmaq üçün lazım olan çevirməni tapaı. Bunun üçün məxsusi funksiyaları, digər məxsusi funksiyaların superpozisiyası kimi yazı bilərik:

$$\varphi_\alpha = \sum_n U_{n\alpha} \psi_n, \quad \varphi_\beta = \sum_m U_{m\beta}^* \psi_m^*, \quad (28.2)$$

(28.1)-in ikisindən

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\beta} &= \int \varphi_\beta^* \hat{Q} \varphi_\alpha dV = \int \sum_m U_{m\beta}^* \psi_m^* \hat{Q} \sum_n U_{n\alpha} \psi_n dV = \\ &= \sum_m \sum_n U_{m\beta}^* U_{n\alpha} \int \psi_m^* \hat{Q} \psi_n dV = \sum_m \sum_n U_{m\beta}^* U_{n\alpha} Q_{mn} \end{aligned}$$

alırıq. Yə'ni

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\beta} &= \sum_m \sum_n U_{m\beta}^* U_{n\alpha} Q_{mn} = \sum_n \sum_m U_{n\alpha} U_{\beta m}^* Q_{mn} \\ Q_{\alpha\beta} &= \sum_n \sum_m U_{n\alpha} Q_{mn} U_{m\beta}^* = \sum_m \sum_n U_{m\beta}^* Q_{mn} U_{n\alpha} \end{aligned} \quad (28.3)$$

$$\hat{Q}' = U^* \hat{Q} U \quad (28.4)$$

olur. (28.2)-ni bir-birinə vurub, inteqrallasaq

$$\begin{aligned} \int \varphi_\beta^* \varphi_\alpha dV &= \sum_n \sum_m U_{n\alpha} U_{\beta n}^* \int \psi_m^* \psi_n dV = \\ &= \sum_n \sum_m U_{n\alpha} U_{\beta n}^* \delta_{mn} = \sum_n U_{n\alpha} U_{\beta n} = \delta_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

tapırıq. $\alpha = \beta$ olanda

$$U_{\alpha n}^* U_{n\alpha} = U^* U = 1 = U U^*; \quad U^* = U^{-1} \quad (28.5)$$

(28.5) şərtini ödəyən çevirməyə unitar çevirmə deyilir. Deməli, unitar çevirmə $U^* U = 1$ və ya $U U^* = 1$ ilə operatoru istənilən bir təmsildən, başqa bir təmsilə çevirmək olur.

Sonsuz kiçik faza çevirməsinə unitar çevirmə kimi baxsaq $d \ll 1$ olanda

$$U = e^{\frac{i\hat{F}}{\hbar}} = e^{id} \quad (28.6)$$

öz-özünə qoşma (ermitlik) faza alarıq. Unitarlığa görə

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{F}^+ - \dots\right) \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{F}^+ + \dots\right) = 1 + \frac{i}{\hbar}(\hat{F} - \hat{F}^+) + O(F^2) = 1$$

yazılar. Əgər $U = e^{\frac{i\hat{F}}{\hbar}}$ olursa, $\hat{F} = \hat{F}^+ - d$ rsa, onda $U^*U = 1$ olar. Buradan

$$\hat{F} = \hat{F}^+ \quad (28.7)$$

əldə edərik. Unitar çevirmədə dalğa funksiyası aşağıdakı kimi yazılar:

$$\psi' = U\psi = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{F} + \dots\right) \psi = \psi + \frac{i}{\hbar}\hat{F}\psi$$

Operator isə

$$\begin{aligned} \hat{Q}' &= U^* \hat{Q} U = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{F} + \dots\right) \hat{Q} \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{F} + \dots\right) = \hat{Q} + \frac{i}{\hbar}\hat{Q}\hat{F} - \\ &- \frac{i}{\hbar}\hat{F}\hat{Q} + \frac{1}{\hbar^2}\hat{F}\hat{Q}\hat{F} + \dots = \hat{Q} + \frac{i}{\hbar}(\hat{Q}\hat{F} - \hat{F}\hat{Q}) + \dots = \hat{Q} + \frac{i}{\hbar}[\hat{Q}\hat{F}] + \\ &+ \frac{1}{2\hbar^2}[[\hat{Q}\hat{F}]\hat{F}] + \dots \end{aligned}$$

olar. Beləliklə, unitar çevirmədə faza dəyişməsi olaraq (\hat{F} -faza)

$$\begin{aligned} \psi' &= \psi + \frac{i}{\hbar}\hat{F}\psi \\ Q' &= Q + \frac{i}{\hbar}[\hat{Q}\hat{F}] \end{aligned} \quad (28.8)$$

göstərmək gərəkdir.

$A \cdot B = C, A + B = C, [A, B] = A \cdot B - B \cdot A$ münasibətləri unitar çevirmə zamanı şəklini dəyişməzlər, yəni invariant qalırlar.

§29. Zamanı dəyişdirən unitar çevirmə

Sistemin halının zamana görə dəyişməsinə unitar çevirmə vasitəsilə təyin etmək olur. Bu halda üç müxtəlif duruma təsadüf edən halları nəzərə almaq lazımdır. Birinci dalğa funksiyasının zamandan asılı olmaqla, operatorlar zamanın funksiyası olmasın. Bu halda Şrödinger təmsili deyilir.

İkincisi, dalğa funksiyasının zamandan asılı olmayıb, operatorun zamanın funksiyası olmasıdır. Belə hala Heyzenberq təmsili deyilir.

Üçüncü halda isə, həm dalğa funksiyası və həm də operator zamandan asılıdır ki, bu hal da qarşılıqlı təsir təmsili adlanır. Sistemin halının zamana görə dəyişməsi bu təmsillərdə fərqli cürə ifadə olunur.

A) Şrödinger təmsili. Məxsusi qiymətlər spektri zaman dəyişdikcə, eyni qalırsa, zamandan asılı olmayan operatorlardan istifadə olunur və zamana görə halın dəyişimi, dalğa funksiyasının zamana bağlılığı ilə təyin olunur. Onda hal vektorunun zamandan asılılığını unitar çevirmə vasitəsi ilə

$$\psi(\vec{r}, t) = U(t)\psi(\vec{r}) \quad (29.1)$$

kimi yazaraq $t=0$ anında $U(0)=1$ olur və hal $\psi(\vec{r})$ ilə ifadə olunur. Unitarlıq şərtinə görə,

$$U^+(t)U(t) = 1 \quad (29.2)$$

olmalıdır. $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyası

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r}, t) \quad (29.3)$$

tənliyini ödəyən funksiyadır. Burada \hat{H} operatoru zamandan asılı deyildir. (29.1)-i yerinə yazsaq

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} \psi(\vec{r}) = \hat{H}U(t)\psi(\vec{r})$$

olur. Buradan

$$\frac{dU}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}U$$

əldə edirik. Onda

$$dU(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}U(t)dt, U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \quad (29.4)$$

alınar. (29.4)-ü (29.1)-də yerinə qoysaq

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \psi(\vec{r}) \quad (29.5)$$

alarıq. Beləliklə, Şrödinger təmsilində

$$\psi_s(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \psi(\vec{r}) \quad (29.6)$$

əldə edərik. Bu Şrödinger təmsilindəki funksiyadır.

B) **Hesenberg təmsili.** Hal vektoru zamana bağlı deyilsə, operator zamandan asılıdırsa, unitar çevirmə vasitəsi ilə Hesenbergin hal vektoru

$$\psi_H(r) = U^{-1}(t) \psi_s(\vec{r}, t)$$

yazıla bilər. Həmmçinin Helsenberq təmsilində operator

$$\hat{Q}_H = U^{-1}(t) \hat{Q}_s U(t)$$

olur. Unitar çevirmə

$$U = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$$

olduğu üçün (28.6)-yə görə

$$\psi_H(\vec{r}) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$$

$$\hat{Q}_H = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{Q}_s e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \quad (29.7)$$

olar. Operatorun zamana görə dəyişməsi

$$\hat{Q}(t + \Delta t) = U^{-1}(\Delta t) \hat{Q}_H(t) U(\Delta t)$$

olduğundan

$$\hat{Q}(t + \Delta t) = \hat{Q}(t) + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}] \Delta t + \dots$$

yazılar və Hesenberg təmsilində hərəkət tənliyi

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{Q}, \hat{H}] \quad (29.8)$$

olur.

c) **Qarşılıqlı təsir təmsili.** Bir-birləri ilə qarşılıqlı təsirdə olan sistemlərdə sistemin halını öyrənmək üçün sistemin Hamilton operatorunu

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (29.9)$$

yazmaq əlverişlidir. Burada \hat{H}_0 -qarşılıqlı təsir olmayanda Hamilton operatorudur. \hat{H}' -isə qarşılıqlı təsir Hamiltonudur. Bu halda həm dalğa funksiyası və həm də operatorlar zamandan asılı ola bilər. Uнитар çevirməni

$$U(t) = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \quad (29.10)$$

kimi göstərsək, qarşılıqlı təsir təmsilində hal vektoru

$$\psi_q(\vec{r}, t) = U(t)\psi_q(\vec{r}, t) \quad (29.11)$$

olur. Srödinger tənliyindən

$$i\hbar \frac{\partial \psi_q(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{H}')\psi_q(\vec{r}, t) \quad (29.12)$$

yaza bilərik. (28.11)-i U^+ -yə vursaq

$$U^+(t)\psi_q(\vec{r}, t) = UU^+\psi_q(\vec{r}, t)$$

alırıq. $U^+U=1$ unitar olduğuna görə

$$\psi_q(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi_q(\vec{r}, t)$$

yazarıq. Bu ifadəni (28.12)-də yerinə yazıb

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi_q(\vec{r}, t) = (\hat{H}_0 + \hat{H}') e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi_q(\vec{r}, t)$$

$$e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \hat{H}_0 \psi_q(\vec{r}, t) + i\hbar e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \frac{\partial \psi_q(\vec{r}, t)}{\partial t} =$$

$$= \hat{H}_0 e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi_q(\vec{r}, t) + \hat{H}' e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi_q(\vec{r}, t)$$

Alınan ifadəni $e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}}$ -yə vursaq

$$i\hbar \frac{\partial \psi_q}{\partial t} = e^{\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{H}' e^{-\frac{i\hat{H}_0 t}{\hbar}} \psi_q$$

(29.13)

$$i\hbar \frac{\partial \psi_q}{\partial t} = \hat{H}_q \psi_q$$

alırıq. Deməli, qarşılıqlı təsir təmsilində Hamilton operatoru

$$\hat{H}_q = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \hat{H}' e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \quad (29.14)$$

olur. Bu təmsildə hərəkət tənliyi

$$\frac{d\hat{H}_q}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_q, \hat{H}_0] \quad (29.15)$$

şəklində olur.

§30. Osilyatorun enerji təsvirində yazılışı

Oşilyatorun dalğa funksiyaları Ermit polinomları ilə ifadə olunur və onun enerjisi diskret qiymətlər alır.

$$\psi_n = C_n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (30.1)$$

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}$$

$$\hat{H}\psi_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \psi_n$$

Bu təmsildə koordinatın matris elementi

$$X_{n'n} = \frac{\hbar}{m\omega} C_n C_n \int \psi_n^* x \psi_n dx$$

şəklindədir. $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ dəyişəni qəbul olduqda, matris elementləri

$$X_{n'n} = \frac{\hbar}{m\omega} C_n C_n \int e^{-\xi^2} \xi H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi \quad (30.2)$$

olur. Ermit polinomunun xassəsinə əsasən

$$H_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi) \quad (30.3)$$

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi)$$

olar və (30.2) ifadəsində (30.3) –ü nəzərə alsaq, matris elementləri üçün

$$X_{n'n} = \frac{\hbar}{m\omega} C_n C_n \int e^{-\xi^2} \left[n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \right] H_n(\xi) d\xi = \quad (30.4)$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega} C_n C_n \left\{ n \int e^{-\xi^2} H_n H_{n-1} d\xi + \frac{1}{2} \int e^{-\xi^2} H_n H_{n+1} d\xi \right\}$$

əldə edirik. Nəzərə alsaq ki,

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!, \quad \int e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} \quad (30.5)$$

düsturları mövcuddur, (30.4)-dəki inteqrallar

$$\int e^{-\xi^2} H_n H_{n-1} d\xi = 2^{n-1} (n-1)! \sqrt{\pi} \delta_{n',n-1}$$

$$\int e^{-\xi^2} H_n H_{n+1} d\xi = 2^{n+1} (n+1)! \sqrt{\pi} \delta_{n',n+1}$$

nəticəni verir. Bunları istifadə etsək

$$X_{n'n} = \frac{\hbar \sqrt{\pi}}{m\omega} C_n C_n \left\{ n 2^{n-1} (n-1) \delta_{n',n-1} + \frac{1}{2} 2^{n+1} (n+1) \delta_{n',n+1} \right\} = \quad (30.6)$$

$$= \frac{\hbar \sqrt{\pi}}{m\omega} \left\{ n 2^{n-1} (n-1) \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{\delta_{n',n-1}}{\sqrt{2^{n-1} (n-1) \sqrt{\pi}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} 2^{n+1} (n+1) \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{\delta_{n',n+1}}{\sqrt{2^{n+1} (n+1) \sqrt{\pi}}} \right\} =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left\{ \sqrt{\frac{n^2 (2^{n-1})^2 ((n-1))^2}{2^n n! 2^{n-1} (n-1)}} \delta_{n',n-1} + \sqrt{\frac{\frac{1}{4} (2^{n+1})^2 ((n+1))^2}{2^n n! (n+1)}} \delta_{n',n+1} \right\} =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left\{ \sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \right\}$$

alırıq. Yə'ni koordinatın matris elementləri

$$X_{n'n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left\{ \sqrt{n} \delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \right\} \quad (30.7)$$

olub, enerji təmsilində osilyatorun yazılışdır. (30.7) ifadəsində δ sinvoluna görə kvant ədədinin dəyişməsi ± 1 -dir. Yə'ni

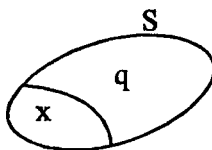
$$\Delta n = n' - n = \pm 1 \quad (30.8)$$

olur. (30.8) ifadəsi osilyator üçün seçmə qaydasıdır.

§31. Sistemin halının sıxlıq matrisi (statistik operator) ilə verilməsi

Verilmiş halın dalğa funksiyasını müəyyən etmək üçün dinamik dəyişənlərin (fiziki kəmiyyətin) tam çoxluğunun təyin olunması lazımdır. Bu çoxluğun operatorlarının məxsusi funksiyaları verilmiş halın dalğa funksiyasıdır. Dalğa funksiyalarla təyin olunan hallara təmiz hallar deyilir.

Lakin elə hallarda olur ki, onları heç bir dalğa funksiyası ilə xarakterizə etmək mümkün olmur. Məsələn, polarizə olunmuş foton dəstəsinə qarşı heç bir dalğa funksiyası qoymaq mümkün deyil, belə hala qarışıq hal deyilir. Şəkil 1.13-də göstərilən kimi



Şəkil 1.13. Qarışıq hal.

sistemi təsəvvür edək. S böyük sistemin halı təmiz haldır. Qapalı S sistemin halı təmiz hal olduğu üçün, $\psi(q, x)$ dalğa funksiyası ilə xarakterizə olunur. Burada q - sisteminin dalğa funksiyası yoxdur, fəqət x -altsisteminin isə dalğa funksiyası var. Yəni, x alt sisteminin halı təmiz haldır. Qapalı S sistemində orta qiymət:

$$\bar{F} = \int \psi^*(q, x) \hat{F} \psi(q, x) dq dx \quad (31.1)$$

təyin olunur. Fiziki kəmiyyətin orta qiymətinin təyin olunmasında təmiz halların $\psi^{(1)}, \psi^{(2)} \dots \psi^{(i)}$ hamsının iştirakı və bu təmiz halların hansı ehtimalla $w^{(1)}, w^{(2)}, \dots$ olması vacib sayılır. Yəni, təmiz halların hansı ehtimalla iştirakını tapmaq lüzumu ortaya çıxır.

$$\langle F^{(i)} \rangle = \int \psi^{*(i)} \hat{F} \psi^{(i)} w^{(i)} dV = F^{(i)} w^{(i)} \quad (31.2)$$

Buradakı $\psi^{(i)}$ -ləri superpozisiya prinsipinə görə hər hansı bir operatorun məxsusi funksiyaların cəmi şəklində göstərilə bilər:

$$\begin{aligned}\psi^{(i)} &= \sum_n a_n^{(i)} \psi_n \\ \psi^{*(i)} &= \sum_m a_m^{*(i)} \psi_m^*\end{aligned}\quad (31.3)$$

Onda

$$\langle F^{(i)} \rangle = \int \sum_m a_m^{*(i)} \psi_m^* \hat{F} \sum_n a_n^{(i)} \psi_n dV = \sum_m \sum_n a_m^{*(i)} a_n^{(i)} F_{mn} \quad (31.4)$$

(31.1)-də bunu nəzərə alsaq, statistik ortalamanı

$$\langle \bar{F} \rangle = \sum_i \sum_m \sum_n w^{(i)} a_m^{*(i)} a_n^{(i)} F_{mn} \quad (31.5)$$

yaza bilərik. Buradan

$$\rho_{mn} = \sum_i w^{(i)} a_m^{*(i)} a_n^{(i)} \quad (31.6)$$

ifadəsini qəbul etsək

$$\langle \bar{F} \rangle = \sum_m \sum_n \rho_{mn} F_{mn} \quad (31.7)$$

əldə edərik. Yəni

$$\langle \bar{F} \rangle = \sum_n (\rho F)_n \quad (31.8)$$

alarıq. Buradanda

$$\langle \bar{F} \rangle = \text{Tr} \rho F = \text{Tr}(F \rho) = \text{Sp} \rho F = \text{Iz} \rho F \quad (31.9)$$

olur. (31.9) ifadəsində «trace» və «spur» matrisin dioqonal elementlərinin cəmidir ki, bunada İz deyilir.

ρ -matrisinə sıxlıq matrisi və ya statistik operator deyilir. Sıxlıq matrisinin vasitəsilə istənilən fiziki kəmiyyətin orta qiymətini hesablamaq mümkündür. Məsələn, polarizasiya (qütübləşmə) hallarını hesablaya bilərik. Sistem qarışıq halda olanda sıxlıq matrisindən istifadə etmək olur. (31.9) ifadəsindən sıxlıq matrisinin tərifi kimidə istifadə oluna bilər. Hər hansı fiziki kəmiyyətin orta qiymətini qarışıq halda ölçməklə, verilmiş halda sıxlıq matrisini tapmaq mümkün olur. Yəni bu matrisin bütün elemanlarını əldə edərik. Onun sütun və sətir elemanlarının sayı asılı olmayan halları göstərir. Məsələn, protonun, neytronun polyazalanmış halı iki funksiya ilə xarakterizə olunur. Bu zaman qütübləşmə olmayanda sıxlıq matrisi dioqonallaşır və

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

olur. Orta qiymət həqiqi olduğuna görə

$$\rho_{mn} = \rho_{nm}^* \quad (31.10)$$

olmalıdır. Vahid operatorun orta qiyməti 1 olduğu üçün

$$\text{Tr} \rho = I z \rho = 1 \quad (31.11)$$

olar. Çünki (31.9)-da $F=1$ olursa, F_{mn} matrisini vahid matris olduğu aşkar olur.

$$F_{mn} = \delta_{mn}$$

(31.5)-ə görə

$$\langle \bar{F} \rangle = \langle F^{(i)} \rangle = \sum_m \sum_n F_{mn} a_m^{*(i)} a_n^{(i)}$$

olduğu üçün təmiz hallarda sıxlıq matrisi

$$\delta_{mn} = a_n^{*(i)} a_n^{(i)} \quad (31.12)$$

şəkində olar. $\sum |a_n|^2 = 1$ normalama şərtinə görə

$$(\rho^2)_{mn} = \rho_{mn} \quad \text{olacaq.} \quad (31.13)$$

Bu şərt təmiz hallar üçün kafi və zəruri şərtidir. Əgər sistem dalğa funksiyasına malikdirsə

$$\rho(x, x', t) = \psi(x, t) \psi^*(x', t)$$

qəbul oluna bilər. Onda Şchrödinger tənliyindən

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \hat{H} \rho$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= i\hbar \psi^*(x', t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + i\hbar \psi(x, t) \frac{\partial \psi^*(x', t)}{\partial t} = \\ &= \psi^*(x', t) \hat{H} \psi(x, t) - \psi(x, t) \hat{H}'^* \psi^*(x', t) \end{aligned}$$

yaza bilərik. Burada \hat{H} Hamilton operatoru x koordinatına təsir edir, \hat{H}' isə x' koordinatına təsir edir. Beləliklə

$$i\hbar \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = (\hat{H} - \hat{H}'^*) \rho(x, x', t) \quad (31.14)$$

tənliyini alırıq. Əgər ψ -lər stasionar halların dalğa funksiyasıdırsa, sıxlıq matrisi

$$\begin{aligned}\rho(x, x', t) &= \sum_m \sum_n a_{mn} \psi_m^*(x', t) \psi_n(x, t) = \\ &= \sum_m \sum_n a_{mn} \psi_m^*(x') \psi_n(x) e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t}\end{aligned}$$

yazılar və a_{mn} əmsalları

$$a_{mn} = a_{nm}^*$$

ermitlik şərtini ödəyən əmsallardır. Təmiz hallar üçün

$$a_{mn} = a_m^* a_n$$

Beləliklə təmiz halda

$$a_{mn} = a_m^* a_n \quad (31.15)$$

olar. F kəmiyyətinin orta qiyməti

$$\begin{aligned}\bar{F} &= \sum_m \sum_n a_{mn} \int \psi_m^*(x, t) \hat{F} \psi_n(x, t) dx = \\ &= \sum_m \sum_n a_{mn} F_{mn} e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t}\end{aligned}$$

kimi yazılar. Burada F_{mn} \hat{F} operatorunun matris elementidir və

$$F_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{F} \psi_n(x) dx$$

şəklindədir. Əgər x ilə q bir-birləri ilə əlaqədar deyilsə,

$$\psi(x, q) = \phi(q) \psi(x)$$

yazılar və

$$\psi(x, q) = \sum_i c_i \phi_i \sum_n a_n \psi_n = \sum_{n,i} c_i a_n \phi_i(q) \psi_n(x) \quad (31.16)$$

əldə edilər. $a_n^i = c_i a_n$ qəbul edilərsə

$$\rho_{n'n} = \sum_i a_n^{*i} a_n^i = a_n^* a_n \sum_i |c_i|^2 \quad (31.17)$$

olur. Bu zaman sıxlıq matrisi sadələşir və onun şəkili

$$\sum_i |c_i|^2 = 1, \rho_{n'n} = \sum_i a_n^* a_n \quad (31.18)$$

olar. Sıxlıq matrisinin bu xassələrindən spin effektlərinin araşdırılmasında, statistik fizikanın bir çox məsələlərdə istifadə olunur.

Fəsil III-ə aid çalışmalar

Çalışma III.1. \hat{F} operatoru ermitdirse, $U = e^{i\hat{F}}$ çevirməsinin unitar çevirmə olduğunu göstərin

Həll:

$$U = e^{i\hat{F}} = 1 + i\hat{F} + \dots$$

$$U^* = e^{-i\hat{F}^*} = 1 - i\hat{F} - \dots$$

$$\hat{F} = \hat{F}^*$$

Olduğu üçün

$$UU^* = (1 + i\hat{F} + \dots)(1 - i\hat{F} - \dots) = 1 + i(\hat{F} - \hat{F}) + O(\hat{F}^2) = 1$$

$$UU^* = U^*U = 1$$

alırıq.

Çalışma III.2. Yakobi eyniliyinin doğruluğunu göstərin.

Həll:

$$\begin{aligned} [\hat{A}[\hat{B}\hat{C}]] &= \hat{A}[\hat{B}\hat{C}] - [\hat{B}\hat{C}]\hat{A} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) - (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B})\hat{A} = \\ &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{B}[\hat{C}\hat{A}]] &= \hat{B}[\hat{C}\hat{A}] - [\hat{C}\hat{A}]\hat{B} = \hat{B}(\hat{C}\hat{A} - \hat{A}\hat{C}) - (\hat{C}\hat{A} - \hat{A}\hat{C})\hat{B} = \\ &= \hat{B}\hat{C}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{C}[\hat{A}\hat{B}]] &= \hat{C}[\hat{A}\hat{B}] - [\hat{A}\hat{B}]\hat{C} = \hat{C}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) - (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} = \\ &= \hat{C}\hat{A}\hat{B} - \hat{C}\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} \end{aligned}$$

Bu üç mütərizəni toplasaq

$$\begin{aligned} [\hat{A}[\hat{B}\hat{C}]] + [\hat{B}[\hat{C}\hat{A}]] + [\hat{C}[\hat{A}\hat{B}]] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} + \hat{C}\hat{B}\hat{A} + \\ &+ \hat{B}\hat{C}\hat{A} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{C}\hat{A}\hat{B} - \hat{C}\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}\hat{C} + \hat{B}\hat{A}\hat{C} = 0 \end{aligned}$$

$$[\hat{A}[\hat{B}\hat{C}]] + [\hat{B}[\hat{C}\hat{A}]] + [\hat{C}[\hat{A}\hat{B}]] = 0$$

Buna Yakobi eyniliyi deyilir.

Çalışma III.3. L^2 operatoruna \hat{L}_+ , \hat{L}_- və \hat{L}_z ifadə edin.

Həll:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 - i\hat{L}_x \hat{L}_y + i\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y^2 = \\ &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i[\hat{L}_x \hat{L}_y] = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i(-i\hbar \hat{L}_z) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

$$\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar \hat{L}_z$$

$$L^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

Olduğu üçün $L^2 = \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar \hat{L}_z + \hat{L}_z^2$ yazarıq.

Çalışma III.4.

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, L_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

matrislərindən istifadə edərək, $\frac{1}{\hbar} [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hat{L}_z$ münasibətini göstərin.

Həll:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_+, \hat{L}_-] &= \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hat{L}_- \hat{L}_+ = \hbar \left[\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} - \right. \\ &- \left. \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = \hbar \left[\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \right] = \\ &= 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = 2\hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

Onda $\frac{1}{\hbar} [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hat{L}_z$ olar.

Çalışma III.5. Sonsuz küçük unitar çevirmə ilə dalğa funksiyasına və opera-
tora təsir edin.

Həll: $U = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{F}}$

$$\psi' = U\psi = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{F} + \dots\right)\psi = \psi + \frac{i}{\hbar}\hat{F}\psi + \dots$$

$$\hat{Q}' = U\hat{Q}U^\dagger = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{F} + \dots\right)\hat{Q}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{F} + \dots\right) = \hat{Q} + \frac{i}{\hbar}[\hat{F}\hat{Q}] +$$

$$+ \frac{1}{2i}[\hat{F}[\hat{F}\hat{Q}]]$$

$$\hat{Q}' = \hat{Q} + \frac{i}{\hbar}[\hat{F}\hat{Q}] + \frac{1}{2i}[\hat{F}[\hat{F}\hat{Q}]]$$

Çalışma III.6. Unitar çevirməni sinus və kosinus vasitəsilə ifadə edin.

Həll: Unitar çevirməni

$$U = \frac{\hat{A} + i\hat{B}}{\hat{A} - i\hat{B}}$$

yazmaq olar. Belə ki,

$$e^{i\hat{F}} = e^{i\frac{\hat{F}}{2}}e^{i\frac{\hat{F}}{2}} = e^{i\hat{F}} \frac{1}{e^{-i\frac{\hat{F}}{2}}} = \frac{e^{i\frac{\hat{F}}{2}}}{e^{-i\frac{\hat{F}}{2}}} = \frac{\cos\frac{\hat{F}}{2} + i\sin\frac{\hat{F}}{2}}{\cos\frac{\hat{F}}{2} - i\sin\frac{\hat{F}}{2}} = \frac{\hat{A} + i\hat{B}}{\hat{A} - i\hat{B}}$$

yazmaqda

$$\hat{A} = \cos\frac{\hat{F}}{2}, \quad \hat{B} = \sin\frac{\hat{F}}{2}$$

alarıq.

Çalışma III.7. İxtiyari \vec{A} və \vec{B} vektorları üçün

$$(\vec{\sigma}\vec{A})(\vec{\sigma}\vec{B}) = \vec{A}\vec{B} + i\vec{\sigma}[\vec{A}\vec{B}]$$

olduğunu göstərin.

Həll:

$$\vec{A} = (A_x, A_y, A_z), \vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$$

$$\vec{\sigma}\vec{A} = \sigma_x A_x + \sigma_y A_y + \sigma_z A_z, \vec{\sigma}\vec{B} = \sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z$$

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma}\vec{A})(\vec{\sigma}\vec{B}) &= \sigma_x^2 A_x B_x + \sigma_x \sigma_y A_x B_y + \sigma_x \sigma_z A_x B_z + \sigma_y \sigma_x A_y B_x + \\ &+ \sigma_y^2 A_y B_y + \sigma_y \sigma_z A_y B_z + \sigma_z \sigma_x A_z B_x + \sigma_z \sigma_y A_z B_y + \sigma_z^2 A_z B_z \end{aligned}$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$$

Əgər

$$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z, \sigma_y \sigma_z = i \sigma_x, \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y \quad \text{olduğunu nəzərə}$$

alsaq

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma}\vec{A})(\vec{\sigma}\vec{B}) &= A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z + i \sigma_z A_x B_y - i \sigma_z A_y B_x - i \sigma_y A_x B_z + \\ &+ i \sigma_y A_z B_x + i \sigma_x A_y B_z - i \sigma_x A_z B_y = \vec{A}\vec{B} + i \sigma_z (A_x B_y - A_y B_x) + \\ &+ i \sigma_y (A_z B_x - A_x B_z) + i \sigma_x (A_y B_z - A_z B_y) = \vec{A}\vec{B} + i (\sigma_z [AB]_z + \sigma_y [AB]_y + \\ &+ \sigma_x [AB]_x) = \vec{A}\vec{B} + i (\vec{\sigma} [\vec{A}\vec{B}]) \end{aligned}$$

yaza bilərik. Deməli,

$$(\vec{\sigma}\vec{A})(\vec{\sigma}\vec{B}) = \vec{A}\vec{B} + i (\vec{\sigma} [\vec{A}\vec{B}])$$

Çalışma III.8. Əgər $\vec{S}_r = \vec{S} \frac{\vec{r}}{r}$ spinin \vec{r} koordinatı istiqamətində proeksiyasıdırsa

$$[\vec{S}\vec{S}_r] = -[\vec{L}\vec{S}_r] = i\hbar \left[\frac{\vec{r}}{r} \vec{S} \right] \quad \text{olmasını göstərin.}$$

Həll:

$$\begin{aligned} \left[S_x, S_x \frac{x}{r} \right] + \left[S_x, S_y \frac{y}{r} \right] + \left[S_x, S_z \frac{z}{r} \right] &= [S_x, S_x] \frac{x}{r} + [S_x, S_y] \frac{y}{r} + [S_x, S_z] \frac{z}{r} \\ [\hat{S}_x, \hat{S}_x] &= 0, [\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \hat{S}_z, [S_x, S_z] = -i\hbar \hat{S}_y \end{aligned}$$

olduğu üçün

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_r] = i\hbar \left(\hat{S}_z \frac{y}{r} - \hat{S}_y \frac{z}{r} \right) = i\hbar \left(\frac{y}{r} \hat{S}_z - \frac{z}{r} \hat{S}_y \right)$$

olar. Eyni ilə

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_r] = i\hbar \left(\frac{z}{r} \hat{S}_x - \frac{x}{r} \hat{S}_z \right), [\hat{S}_z, \hat{S}_r] = i\hbar \left(\frac{x}{r} \hat{S}_y - \frac{y}{r} \hat{S}_x \right)$$

yazarıq. Onda

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_r] = i\hbar \left[\frac{\vec{r}}{r} \vec{S} \right] \quad \text{almar.}$$

$$\left[\hat{P}_x, \frac{1}{r} \right] = -i\hbar \frac{x}{r^3}, \left[\hat{P}_y, \frac{1}{r} \right] = -i\hbar \frac{y}{r^3}, \left[\hat{P}_z, \frac{1}{r} \right] = -i\hbar \frac{z}{r^3}$$

olduğu asanlıqla əldə edildiyinə görə

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{S}_r] &= (y\hat{P}_z - z\hat{P}_y) \left(\hat{S}_x \frac{x}{r} + \hat{S}_y \frac{y}{r} + \hat{S}_z \frac{z}{r} \right) = \left[y\hat{P}_z, \hat{S}_x \frac{x}{r} \right] + \\ &+ \left[y\hat{P}_z, \hat{S}_y \frac{y}{r} \right] + \left[y\hat{P}_z, \hat{S}_z \frac{z}{r} \right] - \left[z\hat{P}_y, \hat{S}_x \frac{x}{r} \right] - \left[z\hat{P}_y, \hat{S}_y \frac{y}{r} \right] - \\ &- \left[z\hat{P}_y, \hat{S}_z \frac{z}{r} \right] = i\hbar \left(\frac{z}{r} \hat{S}_y - \frac{y}{r} \hat{S}_z \right) \end{aligned}$$

alarıq. Eyni ilə

$$[\hat{L}_y, \hat{S}_r] = i\hbar \left(\frac{x}{r} \hat{S}_z - \frac{z}{r} \hat{S}_x \right)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{S}_r] = i\hbar \left(\frac{y}{r} \hat{S}_x - \frac{x}{r} \hat{S}_y \right)$$

yaza bilərik. Ona görə

$$\left[\hat{L}, \hat{S}_r \right] = -i\hbar \left[\frac{\vec{r}}{r}, \hat{S} \right]$$

ifadəsini tapmış olarıq.

Çalışma III.9. $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} e^{i p_0 x} \left(-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \right)$ dalğa funksiyasını impuls təmsilində yazın.

Həll:

$$a_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \psi_p^* dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-\frac{i p x}{\hbar}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \int e^{i(p_0 - p)x} dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(P_0-P)x}}{i(P_0-P)} \left| \frac{a}{2} - \frac{a}{2} \right. = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \frac{2\hbar}{(P_0-P)} \frac{e^{\frac{i}{2\hbar}(P_0-P)a} - e^{-\frac{i}{2\hbar}(P_0-P)a}}{2i} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}} \frac{2\hbar}{(P_0-P)} \sin\left(\frac{(P_0-P)a}{2\hbar}\right) = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a}} \frac{\sin\left(\frac{(P_0-P)a}{2\hbar}\right)}{(P_0-P)} \\
a_p &= \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a}} \frac{\sin\left(\frac{(P_0-P)a}{2\hbar}\right)}{(P_0-P)}
\end{aligned}$$

Bu dalğa funksiyanın impuls təmsilində ifadəsi olar.

Çalışma III.10. $\psi(\varphi) = \frac{2}{\sqrt{3\pi}} \sin^2 \varphi$ ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$) funksiyanı impuls momenti təmsilində yazın və \bar{L}_x, \bar{L}^2 qiymətini tapın.

Həll:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

$$\psi(L_x) = \int_0^{2\pi} \psi(\varphi) \psi_m^*(\varphi) d\varphi = \frac{2}{\sqrt{6\pi^2}} \int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi e^{-im\varphi} d\varphi$$

$$\sin^2 \varphi = \frac{1 - \cos 2\varphi}{2}, \cos 2\varphi = \frac{1}{2}(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi})$$

olduğundan

$$\psi(L_x) = \frac{1}{\sqrt{6\pi^2}} \int_0^{2\pi} (1 - \cos 2\varphi) e^{-im\varphi} d\varphi = \frac{1}{\sqrt{6\pi^2}} \int_0^{2\pi} (e^{-im\varphi} - \cos 2\varphi e^{-im\varphi}) d\varphi =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6\pi^2}} \int_0^{2\pi} \left\{ e^{-im\varphi} - \frac{1}{2}(e^{2i\varphi} e^{-im\varphi} + e^{-2i\varphi} e^{-im\varphi}) \right\} d\varphi =$$

$$= \frac{1}{\pi\sqrt{6}} \left\{ \int_0^{2\pi} e^{i(0-m)\varphi} d\varphi - \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} e^{i(2-m)\varphi} d\varphi - \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} e^{i(-2-m)\varphi} d\varphi \right\} =$$

$$= \frac{1}{\pi\sqrt{6}} \left\{ 2\pi\delta_{m,0} - \frac{2\pi}{2}\delta_{m,2} - \frac{2\pi}{2}\delta_{m,-2} \right\}$$

$$\psi(L_z) = \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ \delta_{m,0} - \frac{1}{2}(\delta_{m,2} + \delta_{m,-2}) \right\}$$

olar.

Buradan

$$\bar{L}_z = \sum_m L_z |\psi(L_z)\rangle^2 = L_z(m=0)\frac{2}{3} + \frac{2}{3}\frac{1}{4}L_z(m=2) + \frac{1}{4}\frac{2}{3}L_z(m=-2) =$$

$$= 0\frac{2}{3} + \frac{1}{4}\frac{2}{3}2\hbar - \frac{1}{4}\frac{2}{3}2\hbar = 0$$

$$\bar{L}_z = 0$$

$$\bar{L}^2 = \sum_m L^2 |\psi(L_z)\rangle^2 = L^2(m=0)\frac{2}{3} + \frac{1}{4}\frac{2}{3}4\hbar^2 + \frac{1}{4}\frac{2}{3}4\hbar^2 = \frac{4}{3}\hbar^2$$

$$\bar{L}^2 = \frac{4}{3}\hbar^2$$

Çalışma III.11. Matrislerin toplamını , hasilini, komutatorunu ve izinin unitar çevirmeye göre invariant olmasını gösterin.

Höll:

$$A = B + C, A = BC, UU^+ = U^+U = 1$$

$$A' = UAU^+ = U(B + C)U^+ = UBU^+ + UCU^+ = B' + C'$$

$$A' = B' + C'$$

$$A' = UAU^+ = UBU^+UCU^+ = B'C' \quad A' = B'C'$$

Çalışma III.12. Cütlük operatorunun proeksiya operatoru olduğunu gösterin.

Höll: Cütlük operatoru σ_3 -matrisi ile

$$\hat{P}_+ = \frac{1}{2}(1 + \sigma_3), \hat{P}_- = \frac{1}{2}(1 - \sigma_3)$$

yazılar.

Buradan

$$\hat{P}_+ = \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_- = \frac{1}{2} \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

alarıq. Eyni qayda ilə

$$\hat{P}_+ \psi_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi_1$$

$$\hat{P}_- \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \psi_2$$

$$\hat{P}_+ \psi_2 = 0, \hat{P}_- \psi_1 = 0$$

$$\hat{P}_+ (\psi_1 + \psi_2) = \hat{P}_+ \psi_1 = \psi_1, \hat{P}_- (\psi_1 + \psi_2) = \hat{P}_- \psi_2 = \psi_2$$

tapılar.

Çalışma III.13. Ortonormalıq şərtini vahid matris ilə ifadə edin.

Həll: Diskret spektrin məxsusi funksiyaları ortonormaldır:

$$\int \psi_{k'}^* \psi_k dV = \delta_{k'k}$$

və ya

$$(\psi_{k'}, \psi_k) = \delta_{k'k}$$

yazarıq. $k' = k$ olanda $\delta_{k'k} = 1$, $k' \neq k$ olanda isə $\delta_{k'k} = 0$ olur. Yəni matris

$$\delta_{k,k} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

olar və bütün təmsillərdə bu vahid olaraq qalır. Dioqonal matrisi hər zaman

$$Q_{k'k} = F_k \delta_{k'k}$$

yaza bilərik. Onda operatoru diaqonal matrislə

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{11} & 0 & 0 \dots & 0 \dots \\ 0 & Q_{22} & 0 \dots & 0 \dots \\ \dots & \dots & \dots & Q_{nn} \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

şəkildə göstərilə bilər.

Çalışma III.14. İki matrisin hasilini tapın.

Həll:

$$C_{k'k} = \int \psi_{k'}^* \hat{A} \hat{B} \psi_k dv = \int \psi_{k'}^* \hat{A} (\hat{B} \psi_k) dv$$

$$\hat{B} \psi_k = \sum_m b_m \psi_m$$

$$b_m = \int \psi_m^* \hat{B} \psi_k dv \equiv B_{mk}$$

$$C_{k'k} = \int \psi_{k'}^* \hat{C} \psi_k dv = \int \psi_{k'}^* \hat{A} \sum_m B_{mk} \psi_m dv = \sum_m B_{mk} \int \psi_{k'}^* \hat{A} \psi_m dv =$$

$$= \sum_m A_{k'm} B_{mk}$$

$$C_{k'k} = \sum_m A_{k'm} B_{mk}$$

Çalışma III.15. Şödinger tənliyini enerji təmsilində yazın.

Həll: Şödinger tənliyi koordinat təmsilində

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

olur. Dalğa funksiyasını

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k \psi_k$$

enerjinin məxsusi funksiyasının ψ_k -nin superpozisiyası olaraq göstərsək, Şödinger tənliyini

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k a_k \psi_k = \hat{H} \sum_k a_k \psi_k; i\hbar \sum_k \frac{\partial a_k}{\partial t} \psi_k = \hat{H} \sum_k a_k \psi_k$$

yazarıq. Bu tənliyi $\psi_{k'}^*$ -ə vursaq və bütün fəza üzrə integrallasaq

$$i\hbar \sum_k \frac{\partial a_k}{\partial t} \int \psi_{k'}^* \psi_k dV = \sum_k a_k \int \psi_{k'}^* \hat{H} \psi_k dV$$

$$i\hbar \sum_k \frac{\partial a_k}{\partial t} \delta_{k'k} = \sum_k a_k H_{k'k}; i\hbar \frac{\partial a_k}{\partial t} = \sum_k a_k H_{k'k}$$

burada Hamilton operatoru

$$H_{k'k} = \int \psi_{k'}^* \hat{H} \psi_k dV = E_k \delta_{k'k}$$

enerji təmsilində olur. Onda enerji təmsilində Şödinger tənliyi

$$i\hbar \frac{da_{k'}}{dt} = E_k a_{k'}$$

olar və buradan

$$a_{k'}(t) = a_{k'}(0) e^{\frac{i}{\hbar} E_k t}$$

alarıq.

IV fəsil

Kvant mexanikasında istifadə olunan təqribi metodlar

Bir sıra fiziki hadisələrin anlaşılmasında və təcrübə ilə uzlaşan nəticələri şərh etmək üçün Şchrödinger tənliyini dəqiq həllini tapmaq mümkün olmadığından təqribi üsullara müraciət etməyin lüzumu meydana çıxır. Örnək olaraq, xarici elektrik və maqnit sahəsində olan atomların enerji səviyyələrinin dəyişməsi relyativistik effektlərin nəzərə alınması, çoxlu sayda elektron sisteminin spektrləri və s. araşdırılması üçün Şchrödinger tənliyini həll etmək məcburiyyətində qalırıq. Bu cürə hadisələrin fiziki qanunauyğunluğun müəyyən olunmasında təqribi metodlardan istifadə etmək lazım qəlibir. Təqribi metodların sayı çoxdur. Lakin bizim bu kitabda istifadə edəcəyimiz təqribi metodlardan klassikəbənzər (kvaziklassik) yaxınlaşma, Ritsin varyasiya üsulu, həyacanlaşma (tədirgəmə, perturbasyon) nəzəriyyəsi olacaqdır. Ona görə təqribi metodlarla tanış olaq.

§32. Ritsin varyasiya üsulu

Bu üsulun əsas xüsusiyyəti ondan ibarətdir ki, ixtiyari hal funksiyasının müəyyən parametrlərdən asılılığı belli olub, normalama şərtini ödəyir. Parametrlər α, β, \dots və s. olursa normalama

$$\int \psi^*(\alpha, \beta, \dots, q) \psi(\alpha, \beta, \dots, q) dq = 1 \quad (32.1)$$

şərtini yaza bilərik. Sistemin Hamilton operatoru bəllidirsə, onda

$$J(\alpha, \beta, \dots) = \int \psi^*(\alpha, \beta, \dots, q) \hat{H} \psi(\alpha, \beta, \dots, q) dq \quad (32.2)$$

inteqralından enerjinin orta qiymətini tapa bilərik. Bu inteqralın minimum qiymətindən dalğa funksiyasının və enerji səviyyəsinin təqribi ifadəsini tapmaq mümkündür.

$\psi(q)$ \hat{H} operatorunun məxsusi funksiyalarsa, ($\{\psi_n(q)\}$ -dirsə) ixtiyari $\psi(\alpha, \beta, \dots, q)$ funksiyasını $\psi_n(q)$ funksiyaların superpozi-siyası kimi yaza bilərik.

$$\psi(\alpha, \beta, \dots, q) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n(q) \quad (32.3)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 = 1$$

(32.2)-dən stasionar hallar üçün

$$\begin{aligned} \int \psi^*(\alpha, \beta, \dots, q) \hat{H} \psi(\alpha, \beta, \dots, q) dq &= \int \psi^*(\alpha, \beta, \dots, q) \hat{H} \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n(q) dq = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} C_n \int \psi^*(\alpha, \beta, \dots, q) \hat{H} \psi_n(q) dq = \sum_{n=0}^{\infty} C_n E_n \int \psi^*(\alpha, \beta, \dots, q) \psi_n(q) dq = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} C_n E_n \left(\sum_{m=0}^{\infty} C_m^* \int \psi_m^*(q) \psi_n(q) dq \right) = \sum_{n=0}^{\infty} |C_n(\alpha, \beta, \dots, q)|^2 E_n \end{aligned}$$

alırıq. Əsas halın enerjisi E_0 olursa, bütün E_n -lər üçün $E_0 > E_n$ ($n > 0$) olduğuna görə

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 E_n &\geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 = E_0 \\ \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 E_n &\geq E_n \end{aligned} \quad (32.5)$$

alınar. Yəni

$$E_b^o \geq E_0 \quad (32.6)$$

olar. Enerjiyə olan birinci tərtibdən əlavəni tapmaq üçün isə $\psi_1(\alpha, \beta, \dots, q)$ funksiyasından istifadə etmək lazımdır.

Birinci tərtibdən əlavə

$$E_b'(\alpha, \beta, \dots) = \int \psi_1^*(\alpha, \beta, \dots, q) \hat{H} \psi_1(\alpha, \beta, \dots, q) dq \quad (32.7)$$

olur.

Misal üçün harmonik osilyatorun enerjisi və dalğa funksiyasını hesablamadan ötürü sınaq funksiyasını a - parametrindən asılı funksiya olaraq

$$\psi(x, a) = A e^{-\frac{a}{2} x^2}$$

kimi seçərsə, normala şərtinə görə

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, a) \psi(x, a) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{a}} = 1$$

$$A = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4}$$

olur. Onda (32.7)-yə görə

$$J(a) = \int \psi^*(x, a) \hat{H} \psi(x, a) dx \quad (32.8)$$

olar. Osilyatorun Hamilton operatoru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

və sınaq funksiyası

$$\psi(x, a) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{a}{2}x^2}$$

olduqda (32.8)-dən

$$\begin{aligned} J(a) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{a}{2}x^2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right) \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{a}{2}x^2} dx = \\ &= \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} \left[\frac{\hbar^2 a}{2m} + \left(\frac{m\omega^2}{2} - \frac{\hbar^2 a^2}{2m}\right) x^2\right] dx = \\ &= \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/2} \left[\frac{\hbar^2 a}{2m} \sqrt{\frac{\pi}{2}} + \left(\frac{m\omega^2}{2} - \frac{\hbar^2 a^2}{2m}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{3/2}}\right] = \frac{\hbar^2 a}{2m} + \left(\frac{m\omega^2}{2} - \frac{\hbar^2 a^2}{2m}\right) \frac{1}{2a} = \\ &= \frac{\hbar^2 a}{4m} + \frac{m\omega^2}{4a} \end{aligned}$$

alırıq. Burada bəlli inteqral olan

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} a^{-3/2}$$

cavabından istifadə olunur. Beləliklə, $J(a)$ -nın

$$J(a) = \frac{\hbar^2 a}{4m} + \frac{m\omega^2}{4a} \quad (32.9)$$

dəyərini alırıq. Minimumluq şərtin görə

$$\frac{\partial J(a)}{\partial a} = 0$$

olduğu üçün

$$\frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m\omega^2}{4a^2} = 0$$

olur. Buradan

$$a_o^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}, a_o = \frac{m\omega}{\hbar} \quad (32.10)$$

alınar. Onda

$$J(a_o) = \frac{\hbar^2 \frac{m\omega}{\hbar}}{4m} + \frac{m\omega^2}{4 \frac{m\omega}{\hbar}} = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

əldə edirik. Deməli

$$E_{\min} = E_b^0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (32.11)$$

tapmış olur. Bu zaman bu halın hal funksiyası

$$\psi_o = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (32.12)$$

əldə edilir. Yəni (32.11) və (32.12)-yə görə variyasiya üsulu ilə osilyatorun sıfırıncı enerjisi və dalğa funksiyası dəqiq mə'lum qiymətləri alır. Birinci həyəcanlanmış halın sınaq funksiyasını

$$\psi_1(x, \beta) = Bxe^{\frac{\beta}{2}x^2}$$

kimi seçdikdə, ψ_o -yə ortoqonal olar və normalama şərtinə görə

$$\int \psi_1(x, \beta)\psi_o(x)dx = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x, \beta)\psi_1(x, \beta)dx = |B|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = |B|^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta^{3/2}} = 1$$

əldə edilir. Ona görə

$$B = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \beta^{3/4}$$

$$J_1(\beta) = E_b^{(1)} = \frac{3\hbar m\omega}{4m\hbar} + \frac{3m\omega^2\hbar}{4m\omega} = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (32.13)$$

birinci səviyyənin enerjisi və dalğa funksiyasını ifadəsini almış oluruq.

§33. Klassikəbənzər (kvaziklassik) yaxınlaşma

Mə'lumdur ki, kvaziklassik dalğa funksiyası (2.6) düsturu ilə ifadə olunur:

$$\psi_{KL} = ae^{iI(\vec{r}, t)} \quad (2.6)$$

burada a -dalğa funksiyasının amplitududur və onu $a=1$ qəbul edək, $I(\vec{r}, t)$ isə təsir inteqralıdır:

$$I(\vec{r}, t) = \int_0^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) d\vec{r}$$

və onu

$$I(\vec{r}, t) = \vec{\sigma}\vec{r} - Et$$

kimi yazı bilərik. Hamilton-Yakovi tənliyi

$$-\frac{\partial I}{\partial t} = \frac{(\vec{\nabla} I)^2}{2m} + U$$

şəklində olduğu üçün, klassikəbənzər tənlik (Hamilton-Yakovi tənliyi)

$$\frac{(\vec{\nabla}\sigma)^2}{2m} + U - E - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\sigma = 0 \quad (33.1)$$

şəklində yazılır. (33.1) tənliyini klassikəbənzər və ya buna VKB (Ventsel-Kramer-Burulyen metoduda deyilir) üsulu ilə həll edək. (2.6) ifadəsindəki $\vec{\sigma} - ni \hbar$ - in dərəcəsinə görə

$$\vec{\sigma} = \vec{\sigma}_0 + \frac{\hbar}{i}\vec{\sigma}_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\sigma_2 + \dots \quad (33.2)$$

sıra şəklində axtaraq. Bu sıranı (33.1) tənliyində yerinə yazsaq

$$\frac{1}{2m} \left\{ \vec{\nabla} \left(\sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \sigma_2 + \dots \right) \right\}^2 + U - E -$$

$$- \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \left(\sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \sigma_2 + \dots \right) = 0$$

$$\frac{1}{2m} \left[\vec{\nabla} \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \vec{\nabla} \sigma_2 + \dots \right]^2 + U(\vec{r}) - E -$$

$$- \frac{i\hbar}{2m} \left(\vec{\nabla} \sigma_0 + \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \sigma_1 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \vec{\nabla} \sigma_2 + \dots \right) = 0$$

alırıq. Buradan

$$\frac{1}{2m} (\vec{\nabla} \sigma_0)^2 + \frac{\hbar}{m} \vec{\nabla} \sigma_0 \cdot \vec{\nabla} \sigma_1 - \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla} \sigma_1)^2 + \frac{\hbar^4}{2m} (\vec{\nabla} \sigma_2)^2 -$$

$$- \frac{\hbar^2}{m} \vec{\nabla} \sigma_0 \cdot \vec{\nabla} \sigma_2 + U(\vec{r}) - E - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \sigma_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \sigma_1 - \frac{i\hbar^2}{2m} \nabla^2 \sigma_2 = 0$$

yazıb, \hbar - in eyni dərəcəsinə görə uyğun həddlərin sıfıra bərabər olması şərtini tapırıq:

$$(\vec{\nabla} \sigma_0)^2 + 2m(U - E) = 0$$

$$\vec{\nabla} \sigma_0 \cdot \vec{\nabla} \sigma_1 - \frac{1}{2} \nabla^2 \sigma_0 = 0 \quad (33.4)$$

$$(\vec{\nabla} \sigma_1)^2 - 2\vec{\nabla} \sigma_0 \cdot \vec{\nabla} \sigma_2 + \nabla^2 \sigma_1 = 0$$

(33.4)-ün bütün tənliklərini bir ölçülü yazırıqsa

$$(\sigma_0^1)^2 + 2m(U - E) = 0$$

$$\sigma_0' \sigma_1' - \frac{1}{2} \sigma_0'' = 0 \quad (33.5)$$

$$(\sigma_1')^2 - 2\sigma_0' \sigma_2' + \sigma_1'' = 0$$

... ..

alarıq. Burada ştrik birinci tərtib törəmə deməkdir. Yə'ni

$$\sigma'_o = \frac{d\sigma_o}{dx}, \sigma'_1 = \frac{d\sigma_1}{dx}, \sigma'_2 = \frac{d\sigma_2}{dx}, \sigma''_o = \frac{d\sigma''_o}{dx^2} \quad (33.6)$$

qəbul olunmuşdur. (33.5)-in birincisindən

$$\sigma'_o = \pm\sqrt{2m(U-E)} = \pm P(x) \quad (33.7)$$

yazarıq. Buradanda

$$\sigma_o = \pm \int_0^x P(x) dx \quad (33.8)$$

əldə edərik. Əgər (33.8)-i (33.5)-in ikincisində yerinə yazsaq

$$\begin{aligned} \sigma'_1 (\pm P(x)) - \frac{1}{2} P'(x) &= 0 \\ \sigma'_1 &= + \frac{1}{2} \frac{1}{\pm P(x)} \frac{dP(x)}{dx} = \pm \frac{1}{2} \frac{d}{dx} \ln P(x) \end{aligned} \quad (33.9)$$

$$\sigma_1 = \pm \frac{1}{2} \ln P(x) + C$$

alarıq. Onda dalğa funksiyası

$$\begin{aligned} \psi_{KL}(x) &= C_1 e^{\frac{i}{\hbar} \int P(x') dx' + \frac{1}{2} \ln P(x)} + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar} \int P(x') dx' - \frac{1}{2} \ln P(x)} = \\ &= \frac{C_1}{\sqrt{P(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int P(x') dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{P(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int P(x') dx'} \end{aligned} \quad (33.10)$$

şəklində yazıla bilər. Burada C_1 və C_2 ixtiyari sabitlərdi. Mə'lumdur ki, zərrəciyin x ilə $x+ax$ nöqtələri arasında olma ehtimalı

$|\psi|^2$ ilə müəyyən edilir və ona görə də bu ehtimal $\frac{1}{P}$ -ə bərabərdir.

(33.5)-in üçüncü tənliyinə görə

$$\begin{aligned} (\sigma'_1)^2 - 2\sigma'_o \sigma'_2 + \sigma''_o &= 0 \\ \sigma'_o \sigma'_2 - \frac{1}{2} (\sigma'_1)^2 - \frac{1}{2} \sigma''_1 &= 0 \end{aligned} \quad (33.11)$$

olur. (33.11)-də (33.7)-dən σ'_o və (33.9)-dan σ'_1 nəzərə alsaq, ikinci tərtibdə dalğa funksiyasına olan əlavəni

$$\sigma_2' = \frac{P'}{4P^2} - \frac{3P'^2}{8P^3} \quad (33.12)$$

$$\sigma_2 = \frac{P'}{4P^2} + \frac{1}{8} \int \frac{P'^2}{P^3} dx$$

tapırıq. Onda klassikəbənzər funksiya (33.12)-i nəzərə almaqla ikinci yaxınlaşmada (σ_2) dalğa funksiyası

$$\psi_{kl} = e^{i(\sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2)} = e^{i(\sigma_0 + \sigma_1)} (1 - i\hbar\sigma_2) \quad (33.13)$$

şəklində yazılar. Bu yaxınlaşmanı bir çox potensiallı sahələrdə hərəkət edən zərrəciyin dalğa funksiyasını tapmaq üçün istifadə olunur.

Harmonik osilyatorun enerjisinin klassikəbənzər yaxınlaşma metodu ilə tapırıqsa, onun enerjisinin

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

ifadəsi almasının şahidi oluruq.

Həyacanlaşma (tədirgəmə) nəzəriyyəsi

Müasir fizikada ən çox tətbiq olunan tətbiqi metodlardan birisi həyacanlaşma (perturbasiyon) nəzəriyyəsidir. Bu nəzəriyyə ilk dəfə göy mexanikasında istifadə olunmuşdur. Yer-Günəş, Ay-Yer və c. sistemlərin hərəkəti əsas hal kimi qəbul olunaraq başqa planetlərin bu sistemlərə təsiri əlavə kiçik bir təsir kimi qəbul olunur. Günəş ilə Yer planeti arasında təsir əsas qəbul olunaraq, başqa planetlərin təsiri və onların bir-biri ilə qarşılıqlı təsirləri zəif, az olaraq əlavə verir. Yəni, «həyacanlaşma (tədirgəmə, perturbasiyon) nəzəriyyəsinə» görə mümkün olan təsirlərdən əsas təsiri ayıraraq, tənliyi dəqiq həll edib, sonra isə həyacanlaşma qüvvəsinin təsirini nəzərə almaq lazımdır.

Cırılma (qətmərləşmə)olanda, diskret spektrli sistemlərin həyacanlaşması və zamandan asılı olan həyacanlaşmanın nəzəriyyəsi başqa-başqa şəkildə qurulur.

§ 34. Həyacanlaşma nəzəriyyəsinin əsas tənlikləri

Öncə Hamilton operatorunun zamandan asılı olmamasını fərz edək. Bu hal da \hat{H} -un

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} + \hat{V} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \quad (34.1)$$

şəklində təsvir edək. \hat{H}_0 operatoru həyacanlaşma olmayan zaman, əsas halın Hamilton operatorudur, \hat{H}' isə həyacanlaşmanı nəzərə alan qismidir. Burada $\hat{H}' \ll \hat{H}_0$ olmalıdır. Onda tədirgəmə enerjisi əsas halın enerjisindən çox-çox kiçik olar. Əgər \hat{H}' operatoru üçün α parametri daxil edərikse (məsələ, incəqurluş sabiti $\alpha = \frac{1}{137}$)

$$\hat{H} = \alpha \hat{V}, \alpha \ll 1 \quad (34.2)$$

$\hat{H}' \ll \hat{H}_0$ şərti tənzimlənir. Əgər $V=0$ olursa, əsas halın Şchrödinger tənliyin

$$\hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)} \quad (34.3)$$

həllindən $\psi^{(0)}$ və $E^{(0)}$ bəlli olur. Bu zaman $\psi^{(0)}$ və $E^{(0)}$ bilərək

$$(\hat{H}_0 + \alpha \hat{V}) \psi = E \psi \quad (34.4)$$

tənliyinin həllindən, ψ -ni və E -ni tapmaq tələb olunur. (34.4)-dən ψ və E -ni α -nın dərəcəsinə görə sıra kimi

$$\psi = \psi^{(0)} + \alpha \psi^{(1)} + \alpha^2 \psi^{(2)} + \dots \quad (34.5)$$

$$E = E^{(0)} + \alpha E^{(1)} + \alpha^2 E^{(2)} + \dots$$

yazırıq. Burada $\psi^{(1)}, E^{(1)}$ birinci mərtəbədən olan əlavə, $\psi^{(2)}, E^{(2)}$ isə ikinci tərtibdən olan əlavə və s. olur. Deməli $\psi^{(0)}, E^{(0)}$ parametrdən asılı olmur. $\psi^{(1)}, E^{(1)}$ α -nin birinci dərəcəsinə uyğun olan əlavə, $\psi^{(2)}, E^{(2)}$ isə α^2 uyğun olan əlavə və s. olurlar. (34.5)-i (34.4)-də yerinə yazsaq

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_0 + \alpha \hat{V}) (\psi^{(0)} + \alpha \psi^{(1)} + \alpha^2 \psi^{(2)} + \dots) = \\ & = (E^{(0)} + \alpha E^{(1)} + \alpha E^{(2)} + \dots) (\psi^{(0)} + \alpha \psi^{(1)} + \alpha^2 \psi^{(2)} + \dots) \end{aligned}$$

əldə edərik. Buradan

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_o - E^{(o)})\psi^{(o)} + \alpha \left[(\hat{H}_o - E^{(o)})\psi^{(1)} - E^{(1)}\psi^{(o)} + \hat{V}\psi^{(o)} \right] + \\ & + \alpha^2 \left[(\hat{H}_o - E^{(o)})\psi^{(2)} - E^{(1)}\psi^{(1)} + \hat{V}\psi^{(1)} - E^{(2)}\psi^{(o)} \right] + O(\alpha^3) = 0 \end{aligned}$$

alırıq. Beləliklə,

$$\begin{aligned} & (\hat{H}_o - E^{(o)})\psi^{(o)} = 0 \\ & (\hat{H}_o - E^{(o)})\psi^{(1)} + (\hat{V} - E^{(1)})\psi^{(o)} = 0 \\ & (\hat{H}_o - E^{(o)})\psi^{(2)} + (\hat{V} - E^{(1)})\psi^{(1)} - E^{(2)}\psi^{(o)} = 0 \\ & \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \end{aligned} \quad (34.6)$$

ardıcılıqla tənliklər sistemi alınır. Başlanğıqda sistem $n' = n$ halında olursa, $\psi_n^{(o)} = \psi_n^{(o)}$ və $E_n^{(o)} = E_n^{(o)}$ olar. İkinci tənlik üçün

$$(E_n^{(o)} - \hat{H}_o)\psi_n^{(o)} = -(E_n^{(1)} - \hat{V})\psi_n^{(o)} \quad (34.7)$$

yazırıq. İxtiyari funksiyanı tam ortoqonal və normallanan funksiyaların cəmi kimi yazıb bildiyimizdən

$$\psi_n' = \sum_n a_n \psi_n^{(o)}$$

(34.7) ifadəsində yerinə yazsaq

$$\sum_{n'} a_n (E_n^{(o)} - \hat{H}_o)\psi_n^{(o)} = -(E_n^{(1)} - \hat{V})\psi_n^{(o)}$$

alırıq. (34.6)-nın birinci tənliyini nəzərə alsaq

$$\sum_{n'} a_n (E_n^{(o)} - E_n^{(o)})\psi_n^{(o)} = -(E_n^{(1)} - \hat{V})\psi_n^{(o)} \quad (34.8)$$

tapırıq. Bu tənlikdən enerjiyə olan birinci tərtib əlavəni əldə etmək olur.

§35. Cırılşmamış (qətmərləşməmiş) halın həyacanlaşması

Əgər baxdığımız sistem cırılşmamışsa, yeni hər bir enerji $E_n^{(o)}$ qiymətinə qarşı yalnız bir məxsusi funksiya uyğun gələrsə, onda (34.8)-i soldan $\psi_n^{(o)}$ vurub, bütün fəza üzrə inteqrallasaq

$$\sum_{n'} a_n (E_n^{(o)} - E_n^{(o)}) \int \psi_n^{*(o)} \psi_n^{(o)} dV = - \int \psi_n^{*(o)} (E_n^{(1)} - \hat{V}) \psi_n^{(o)} dV$$

$$\sum_{n'} a_{n'} (E_n^{(o)} - E_{n'}^{(o)}) \delta_{nn'} = -\delta_{nn'} E_n^{(i)} + \int \psi_n^{*(o)} \hat{V} \psi_n^{(o)} dV \quad (35.1)$$

alırıq. Burada $n = n'$ olduqda, sol tərəf sıfır olar və ona görə də

$$E_n^{(i)} \int \psi_n^{*(o)} \hat{V} \psi_n^{(o)} dV = V_{nn} \quad (35.2)$$

əldə edərik. Yə'ni, həyacanlaşma varsa, enerjiyə olan birinci tərtibdən əlavə həyacanlaşma enerjisinin matris elamanına bərabər olması görünür. Özudə bu elaman həyacanlaşmanın orta qiymətidir. (35.1) ifadəsini yenidən (34.8) şəklində yazaraq

$$\sum_{n'} a_{n'} (E_n^{(o)} - E_{n'}^{(o)}) \psi_{n'}^{(o)} = -(E_n^{(i)} - \hat{V}) \psi_n^{(o)}$$

$n \neq n'$ olanda

$$a_{n'} = \frac{V_{nn'}}{E_n^{(o)} - E_{n'}^{(o)}}, n \neq n' \quad (35.3)$$

alırıq. Burada

$$V_{nn'} = \int \psi_n^{*(o)} \hat{V} \psi_{n'}^{(o)} dV$$

Beləliklə, dalğa funksiyasına olan birinci tərtib əlavəni

$$\psi_n' = \sum_{n \neq n'} \frac{V_{nn'}}{E_n^{(o)} - E_{n'}^{(o)}} \psi_{n'}^{(o)}, n \neq n' \quad (35.4)$$

kimi tapırıq. \sum -toplamında bir hədd yoxdur. Deməli, enerjinin və dalğa funksiyasının ifadəsi həyacanlaşma hesabına birinci tərtib əlavəni nəzərə almaqla, aşağıdakı şəkildə yazılar

$$E_n = E_n^{(o)} + \alpha \hat{V}_{nn}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(o)} + \alpha \sum_{n \neq n'} \frac{V_{nn'}}{E_n^{(o)} - E_{n'}^{(o)}} \psi_{n'}^{(o)}, n \neq n' \quad (35.5)$$

(35.3) ifadəsindən həyacanlaşma nəzəriyyəsinin tətbiq olunma kriteriyasını tapmaq mümkündür. Belə ki, əgər (35.3)-də

$$V_{nn'} \ll |E_n^{(o)} - E_{n'}^{(o)}| \quad (35.6)$$

olarsa, onda $\hat{H}' \ll H_o$ şərti fiziki mə'na daşıyır. Yə'ni, həyacanlaşmanın matris elemanı, həyacanlaşmamış halların enerji fərqi qədər çox-çox kiçik olduqda, həyacanlaşma nəzəriyyəsini tətbiq etmək

olar. Başqa sözlə, əsas halın enerjilər fərqi, həyacanlaşma enerjisinə görə çox böyük olarsa, bu nəzəriyyəni tətbiq edə bilərik.

Əgər spektrdə kəsilməz qisimdə varsa, dalğa funksiyası birinci tərtib əlavə ilə

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \alpha \sum_{n'} \frac{V_{nn'}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \psi_{n'}^{(0)} + \alpha \int \frac{V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_\nu} \psi_\nu^{(0)} dV \quad (35.7)$$

birlikdə bu şəkildə tapılır. Burada ν kəsilməz qiymətlər alır. Enerjiyə olan ikinci tərtib əlavə (34.6) düsturuna görə

$$E_n^{(2)} = \sum_m a_m^{(1)} V_{mn} = \sum_{n \neq m} \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (35.8)$$

alınar. Yəni

$$E_n^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} < 0 \quad (35.9)$$

olar. Buradan görünür ki, $|V_{nm}|^2$ vuruğu mütləq müsbətdir. Lakin məxrəcdə $E_m^{(0)} > E_n^{(0)}$ olduğu üçün məxrəc sıfırdan kiçik olur. Yəni, $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} < 0$ olar, ona görə də $E_n^{(2)}$ ikinci tərtib əlavə mənfi, sıfırdan kiçik olur. Cəm işarələrinin ştirik ilə göstərilməsi, belə cəmlərdə bir həddin, $n \neq m$ həddinin olmaması deməkdir.

Eyni qayda ilə (34.6)-da ikinci tərtib əlavəni dalğa funksiyasından nəzərə alsaq

$$\begin{aligned} \psi_n = & \psi_n^{(0)} + \alpha \sum_{n \neq n'} \frac{V_{nn'}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \psi_{n'}^{(0)} + \\ & + \alpha^2 \left\{ \sum_k \sum_m \frac{V_{kn} V_{mn}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} - \right. \\ & \left. - \sum_m \frac{V_{nn} V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_k^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_n^{(0)} \right\} \quad (35.10) \end{aligned}$$

tapmış oluruq. Yəni, kiçik parametir α -nin ikinci tərtib ilə mütənasib olan həyacanlaşmış halın dalğa funksiyasını əldə edirik.

§36. Cırılşma (qətmərləşmə) olan halın həyacanlaşması

Cırılşma olduqda hər bir məxsusi qiymətə bir neçə məxsusi funksiya uyğun gəldiyinə görə

$$\hat{H}_o \psi_{n\alpha}^{(o)} = E_n^{(o)} \psi_{n\alpha}^{(o)} \quad (36.1)$$

bu $\psi_{n\alpha}^{(o)}$ funksiyaların ümumi halda hansının ortonormal olmasını bilmək lazımdır. (36.1)-də α indeksi cırılşmanın tərtibini göstərir. Ümumi şəkildə $\{\psi_{n\alpha}^{(o)}\}$ funksiyaların xətti kombinasiyasında \hat{H}_o operatorunun məxsusi funksiyaları olur.

$$\psi_{nk}^{(o)} = \sum_{m=1}^{\infty} a_{km}^{(o)} \psi_{nm}^{(o)} \quad (36.2)$$

$\psi_{n\alpha}^{(o)}$ funksiyalarının ortonormal olması üçün a_{km} əmsallarının unitar olması lazımdır.

$$a_{km}^{(o)} a_{mk}^{*(o)} = 1 \quad (36.3)$$

(35.1) tənliyinin həlli bəllidirsə

$$(\hat{H}_o + \alpha \hat{V}) \psi = E \psi \quad (36.4)$$

tənliyinin həlli tələb olunur. Yenə də $E_{n\alpha}$ və $\psi_{n\alpha}$

$$\begin{aligned} \psi_{n\alpha} &= \psi_{n\alpha}^{(o)} + \alpha \psi_{n\alpha}^{(1)} + \dots \\ E_{n\alpha} &= E_{n\alpha}^{(o)} + \alpha E_{n\alpha}^{(1)} + \dots \end{aligned} \quad (36.5)$$

kimi axtaraq. (36.5)-i (36.4)-də yerinə yazsaq

$$(\hat{H}_o + \alpha \hat{V})(\psi_{n\alpha}^{(o)} + \alpha \psi_{n\alpha}^{(1)} + \dots) = (E_{n\alpha}^{(o)} + \alpha E_{n\alpha}^{(1)} + \dots)(\psi_{n\alpha}^{(o)} + \alpha \psi_{n\alpha}^{(1)} + \dots)$$

alınar və buradan

$$\begin{aligned} \hat{H}_o \psi_{nk}^{(o)} &= E_n^{(o)} \psi_{nk}^{(o)} \\ \hat{H}_o \psi_{nk}^{(1)} - E_n^{(o)} \psi_{nk}^{(1)} &= E_n^{(1)} \psi_{nk}^{(o)} - \hat{V} \psi_{nk}^{(1)} \\ \dots & \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \end{aligned} \quad (36.6)$$

sistem tənliklər alırıq. Birinci tənlik həmişə ödənilir. İkinci tənliyi $\psi_{nm}^{*(o)}$ -a vurub, fəza üzrə inteqralsaq

$$\int \psi_{nm}^{*(o)} (\hat{H}_o - E_n^{(o)}) \psi_{nk}^{(1)} dV = E_{nk}^{(1)} \int \psi_{nm}^{*(o)} \psi_{nk}^{(o)} dV - \int \psi_{nm}^{*(o)} \hat{V} \psi_{nk}^{(o)} dV$$

əldə edərək. Buradan

$$\int \psi_{nm}^{*(o)} (\hat{H}_o - E_n^{(o)}) \psi_{nk}^{(i)} dV = \int \psi_{nm}^{*(o)} (E_n^{(o)} - E_n^{(o)}) \psi_{nm}^{(o)} dV = 0$$

olduğu üçün

$$E_{nk}^{(i)} \int \psi_{nm}^{*(o)} \psi_{nk}^{(o)} dV - \int \psi_{nm}^{*(o)} \hat{V} \psi_{nk}^{(o)} dV \quad (36.7)$$

yaza bilərik. (36.2) ifadəsindən istifadə etsək

$$E_{nk}^{(i)} \int \psi_{nm}^{*(o)} \sum_m a_{km}^{(o)} \psi_m^{(o)} dV = \int \psi_{nm}^{*(o)} \hat{V} \sum_m a_{km}^{(o)} \psi_m^{(o)} dV \quad (36.8)$$

$$\sum_m V_{nm} a_{km}^{(o)} - \sum_m E_{nk}^{(i)} a_{km}^{(o)} \delta_{nm} = 0$$

alırıq. Burada

$$V_{nm} = \int \psi_{nm}^{*(o)} \hat{V} \psi_{nm}^{(o)} dV \quad (36.9)$$

$$\delta_{nm} = \int \psi_{nm}^{*(o)} \psi_{nm}^{(o)} dV$$

işarələri qəbul olunmuşdu. (36.8)-dən ümumi şəkildə

$$\sum_{k'} (V_{kk'} - E_{nk}^{(i)} \delta_{kk'}) a_{kk'}^{(o)} = 0 \quad (36.10)$$

kimi yaza bilərik. Bu tənliklər sisteminin həlli olması üçün

$$\det |V_{kk'} - E_{nk}^{(i)} \delta_{kk'}| = 0 \quad (36.11)$$

bu əsri (sekulyar) tənlik yazılmalıdır. Bu tənliyi həll edib, $E_{NK}^{(i)}$ -i tapırıq. Tapılan $E_{NK}^{(i)}$ -in qiymətini (36.10)-da yerinə yazıb $a_{kk'}^{(o)}$ -i əldə edə bilərik. $Y_{\alpha}^{(i)}$ -ni, enerjiyə olan birinci tərtib əlavəni və dalğa funksiyasına olan sıfırıncı tərtib əlaqəni tapa bilərik.

İkinci tərtib əlavəni tapmaq üçün

$$E_{nk}^{(2)} a_{k\beta}^{(o)} = \sum_{k'} V_{kk'} a_{k\beta}^{(i)} + \sum_{n'} V_{nn'} a_{kn'}^{(o)} \quad (36.12)$$

tənliyini yazırıq. Burada

$$a_{k\beta}^{(i)} = \sum_{n'} \frac{V_{\beta n'}}{E_n^{(o)} - E_{\beta}^{(o)}} a_{kn'}^{(o)} \quad (36.13)$$

Bu ifadəni (36.12)-də yerinə yazsaq

$$E_{n\alpha}^{(2)} a_{k\beta}^{(o)} = \sum_{n'} a_{kn'}^{(o)} \left(V_{\beta n'} + \sum_{k'} \frac{V_{\beta k'} V_{k'n}}{E_{\beta}^{(o)} - E_{k'}^{(o)}} \right) \quad (36.14)$$

alırıq. Əgər

$$H_{\beta n'} = V_{\beta n'} + \sum_{k'} \frac{V_{\beta k'} V_{k' n'}}{E_{\beta}^{(o)} - E_{k'}^{(o)}} \quad (36.15)$$

işarəsi qəbul etsək

$$E_{n\alpha}^{(2)} a_{k\beta}^{(o)} = \sum_{n'} a_{kn'}^{(o)} H_{\beta n'} \quad (36.16)$$

ikinci tərtib tənliyi yazmış oluruq və bu tənliyi həll edib, $E_{n\alpha}^{(2)}$ -ni əldə edirik.

(36.10)-dan və (36.14)-dən $E_{n\alpha}^{(1)}$ və $E_{n\alpha}^{(2)}$ enerji əlavələrini tapırıq. Buradan görünür ki, həyacanlaşma α cırışmanın aradan qalxmasına səbəb olur. Həyacanlaşma cırışmanı ya qismən, ya da ki, tamamilə aradan qaldırır.

§37. Stasionar olmayan həyacanlaşma və keçid ehtimalı

Zamandan asılı olan həyacanlaşma varsa, dalğa funksiyasına olan qatqını tapmaq mümkün olur və həyacanlaşma hesabına dalğa funksiyasının dəyişilməsi müəyyən ola bilər. Əgər həyacanlaşma operatoru zamandan asılı olursa:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_o + \hat{V}(t) \quad (37.1)$$

həyacanlaşmış halın \hat{H} operatoru zamanın funksiyası olur. Bu zaman Şchrödinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(t) \psi(\vec{r}, t) \quad (37.2)$$

kimi yazılır. Burada $\psi(\vec{r}, t)$ funksiyası həyacanlaşmış halın dalğa funksiyasıdır və onu həyacanlaşmamış halın dalğa funksiyasının superpozisiyası şəklində

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_k a_k(t) \psi_k^{(o)}(\vec{r}, t) \quad (37.3)$$

yaza bilərik. $\psi^{(o)}(\vec{r}, t)$ funksiyası həyacanlaşmamış halın Şchrödinger tənliyinin həllidir:

$$i\hbar \frac{\partial \psi^{(o)}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_o(t) \psi_k^{(o)}(\vec{r}, t) \quad (37.4)$$

və

$$\psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \psi_k^{(0)}(\vec{r}) = e^{-i\omega_k t} \psi_k^{(0)}(\vec{r}) \quad (37.5)$$

şəklindədir. (37.5)-i və (37.1)-i (37.2)-də yerinə yazırıqsa

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k a_k(t) \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) &= (\hat{H}_0 + \alpha V(t)) \sum_k a_k(t) \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) \\ i\hbar \sum_k \left(\frac{da_k}{dt} \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) + a_k(t) \frac{\partial \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right) &= \\ &= \sum_k a_k(t) \hat{H}_0 \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) + \alpha \sum_k \hat{V}(t) a_k(t) \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (37.6)$$

alınar. (37.6) ifadəsinin hər tərəfini $\psi_k^{*(0)}(\vec{r}, t)$ vurub, bütün fəza üzrə inteqrallasaq

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_k \frac{da_k(t)}{dt} \int \psi_k^{*(0)}(\vec{r}, t) \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) dV &= \\ &= \alpha \sum_k \int \psi_k^{*(0)}(\vec{r}, t) V \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) a_k(t) dV \end{aligned}$$

alınar və buradan da

$$i\hbar \frac{da_k(t)}{dt} = \alpha \sum_k V_{kk} a_k(t) \quad (37.7)$$

əldə edilər.

(37.7)-dəki V_{kk} -ni

$$V_{kk} = \int \psi_k^{*(0)}(\vec{r}, t) \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}(\vec{r}, t) dV$$

yazırıq ki, bu da həyəcanlaşma enerjisinin matris elemanı olur. (37.7) tənliyi enerji təmsilində Şrödinger tənliyidir. Buradakı a_k -ları $\alpha \ll 1$ kiçik parametrin dərəcəsinə görə sıraya ayırıq

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + \alpha a_k^{(1)}(t) + \dots \quad (37.8)$$

Bunu (37.7)-də yerinə yazıb,

$$i\hbar \frac{d}{dt} (a_k^{(0)}(t) + \alpha a_k^{(1)}(t) + \dots) = \alpha \sum_k V_{kk} (a_k^{(0)}(t) + \alpha a_k^{(1)}(t) + \dots)$$

ardıcıl olaraq

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{da_k^{(0)}(t)}{dt} &= 0 \\
 i\hbar \frac{da_{k'}^{(1)}(t)}{dt} &= \sum_k V_{kk'}(t) a_k^{(0)}(t) \\
 i\hbar \frac{da_{k'}^{(2)}(t)}{dt} &= \sum_k V_{kk'}(t) a_k^{(1)}(t) \\
 &\dots \\
 &\dots \\
 &\dots
 \end{aligned} \tag{37.9}$$

sistem tənliklər alarıq. (37.9) tənliklərini ardıcıl yaxınlaşma üsulu ilə həll edilir. (37.9)-in birincisindən

$$i\hbar \frac{da_{k'}^{(0)}}{dt} = 0$$

$$i\hbar da_{k'}^{(0)} = dt$$

$a_{k'}^{(0)}$ = sabit olur. Onda bu sabiti

$$a_{k'}^{(0)} = \delta_{k'n} = \begin{cases} 1 & k' = n \\ 0 & k' \neq n \end{cases} \tag{37.10}$$

olaraq seçə bilərik. İkinci tənlikdə (37.10)-i yerinə yazsaq

$$i\hbar \frac{da_{k'}^{(1)}}{dt} = \sum_k V_{kk'} \delta_{kn} \tag{37.11}$$

$$\frac{da_{k'}^{(1)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} V_{k'n}(t) = \frac{1}{i\hbar} V_{k'n} e^{i\omega_{k'n}t}$$

olarıq. Burada $\omega_{k'n} = \omega_{k'} - \omega_n = \frac{E_{k'}}{\hbar} - \frac{E_n}{\hbar}$ -dir və (36.11)-dən

$$a_{k'}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{k'n} e^{i\omega_{k'n}t} dt \tag{37.12}$$

əldə edilir.

$k' \neq n$ olduqda $a_{k'}^{(1)}$ əmsalının sağ tərəfi k' və n indeksinə bağlı olduğundan $a_{k'}$ -ə bir n indeksidə yazə bilərik:

$$a_{k'n}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{k'n} e^{i\omega_{k'n}t} dt \tag{37.13}$$

(37.9) –un üçüncüsündən ikinci tərtib əlavə isə

$$a_{k'n}^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_k \iint V_{k'k}(t') V_{kk}(t) dt' dt \quad (37.14)$$

olar.

Mə'lumdur ki, qarşılıqlı təsirin Fourier (Fürye) inteqralı yazılır və

$$V(t) = \int V(\omega) e^{i\omega t} dt \quad \text{olur. (37.15)}$$

$V(\omega)$ əmsalları keçid ehtimalı ilə əlaqədardır

$$a_{kn} \sim W(V(\omega))$$

(37.15) ifadəsini $e^{i\omega' t}$ vursaq və t üzrə inteqrallasaq

$$\int e^{i\omega' t} V(t) dt = \iint V(\omega) e^{i(\omega' - \omega)t} dt$$

Fourier əmsalı $V(\omega)$ -ni tapırıq. Beləki,

$$\int e^{i\omega' t} V(t) dt = 2\pi \int V(\omega) \delta(\omega' - \omega) d\omega = 2\pi V(\omega')$$

olur. Buradan

$$V(\omega') = \frac{1}{2\pi} \int V(t) e^{i\omega' t} dt$$

və ya

$$V_{kn}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} V(t) e^{i\omega t} dt \quad (37.16)$$

yazarıq. Bunu (37.13) ilə müqayisə etsək

$$a_{kn}^{(1)} = -\frac{2\pi i}{\hbar} V_{kn}(\omega_{kn}) \quad (37.17)$$

alarıq. Kvant mexanikasının 3-cü postulatına görə n halından k halına keçid ehtimalı (4.4) olduğu üçün

$$W_{kn} = |a_{kn}^{(1)}|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{kn}(\omega_{kn})|^2 \quad (37.18)$$

yaza bilərik. (37.18) ifadəsi $t=0$ anında n halında olan sistemin, $t \neq 0$ anında k halına keçmə ehtimalını göstərir. Sistemin halının həyacanlaşmasından alınan keçid ehtimalı (37.18) ifadəsi ilə təyin olunur. Əgər həyacanlaşma periodik olarsa, məsələn

$$V_{mk}(x, t) = ax_{mk} e^{i\omega_{mk} t} \cos \omega t \quad (37.19)$$

olursa,

$$\begin{aligned}
a_{mk}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int V_{mk}(x,t) dt = -\frac{i}{\hbar} x_{mk} \int_0^t e^{i\omega_{mk}t} \cos \omega t dt = \\
&= -\frac{ia}{2\hbar} x_{mk} \int_0^t e^{i\omega_{mk}t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) dt = -\frac{ia}{2\hbar} x_{mk} \left(\int_0^t e^{i(\omega_{mk} + \omega)t} dt + \right. \\
&+ \left. \int_0^t e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} dt = -\frac{ia}{2\hbar} x_{mk} \left(\frac{e^{i(\omega_{mk} + \omega)t} - 1}{i(\omega_{mk} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} - 1}{i(\omega_{mk} - \omega)} \right) = \right. \\
&= -\frac{a}{2\hbar} x_{mk} \left(\frac{e^{i(\omega_{mk} + \omega)t} - 1}{\omega_{mk} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} - 1}{\omega_{mk} - \omega} \right)
\end{aligned}$$

alınır. Deməli,

$$a_{mk}^{(1)} = -\frac{a}{2\hbar} x_{mk} \left(\frac{e^{i(\omega_{mk} + \omega)t} - 1}{\omega_{mk} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} - 1}{\omega_{mk} - \omega} \right) \quad (37.20)$$

haradaki

$$x_{mk} = \int \psi_m^{*(o)}(\vec{r}, t) x \psi_k^{(o)}(\vec{r}, t) dx$$

Udulma və şüalanma üçün

$$\left. \begin{aligned} E_k + \hbar\omega &= E_m \\ E_k - \hbar\omega &= E_m \end{aligned} \right\} \omega_{MK} = \frac{E_m - E_k}{\hbar}$$

olduğundan ω_{mk} -in kiçik qiymətləri keçiddə əsas rolu oynayır. Rezonans oblastında ($\omega_{mk} = \omega$) $E_k + \hbar\omega = E_m$ kiçik qiymətlər alar. Onda da (36.20)-in yerinə

$$a_{mk}^{(1)} = -\frac{a}{2\hbar} x_{mk} \frac{e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} - 1}{\omega_{mk} - \omega} \quad (37.21)$$

ifadəsini yazarıq. (37.18)-ə görə

$$\begin{aligned}
W_{mk} &= \frac{a^2}{4\hbar^2} x_{mk}^2 \frac{(e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} - 1)^2}{(\omega_{mk} - \omega)^2} = \frac{a^2}{4\hbar^2} |x_{mk}|^2 \frac{2[1 - \cos(\omega_{mk} - \omega)t]}{(\omega_{mk} - \omega)^2} = \\
&= \frac{a^2}{\hbar^2} |x_{mk}|^2 \frac{1}{2} \frac{[1 - \cos(\omega_{mk} - \omega)t]}{(\omega_{mk} - \omega)^2}
\end{aligned}$$

yaza bilərik. Buradan

$$W_{mk} = a^2 |x_{mk}|^2 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{mk} - \omega}{2} t}{\hbar^2 (\omega_{mk} - \omega)^2} \quad (37.22)$$

alarıq. Bu ifadəni

$$W_{mk} = a^2 |x_{mk}|^2 \frac{4 \sin^2 \frac{(\omega_{mk} - \omega) t}{2}}{\hbar^2 \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right)^2} \quad (37.23)$$

şəklində yazırıq, δ -funksiyasının tərifindən

$$\frac{4 \sin^2 \frac{(\omega_{mk} - \omega) t}{2}}{\hbar^2 \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right)^2} = t \pi \delta \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right) \quad (37.24)$$

olduğunu nəzərə alaraq (37.23)-dən

$$W_{mk} = a^2 |x_{mk}|^2 t \pi \frac{1}{\hbar^2} \delta \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right) \quad (37.25)$$

tapılar. Yəni δ -funksiyasının xassəsinə görə

$$\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x) \text{-dir və ona görə də}$$

$$\delta \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right) = 2 \delta(\omega_{mk} - \omega)$$

olur. Onda

$$W_{mk} = \frac{2\pi a}{\hbar^2} |x_{mk}|^2 \delta(\omega_{mk} - \omega) t \quad (37.26)$$

əldə edirik. Vahid zamanda keçidin ehtimalı aşağıdakı kimi yazıla bilər. ($a=1$ qəbul edək)

$$W = \frac{W_{mk}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |x_{mk}|^2 \delta(\omega_{mk} - \omega) \quad (37.27)$$

Bu keçid ehtimalı periodik sahədə sistemin k halından n halına keçmə ehtimalını təyin edir.

Fəsil IV-ə aid çalışmalar

Çalışma IV.1. Klassikəbənzər (kvaziklassik) osilyatorun enerjisini hesablayın.

Həll: Enerji səviyyələrini hesablamaq üçün

$$\int_a^b p dx = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n=0,1,2,3,\dots$$

münasibətindən istifadə edək. Osilyator üçün potensial enerji

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

Dönüm nöqtələrini hesablamaq üçün

$$E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} = 0; 2E - m\omega^2 x^2 = 0$$

$$x^2 = \frac{2E}{m\omega^2}, x = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

$$a = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}, b = +\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \quad \text{tapırıq.}$$

Onda

$$\begin{aligned} \int_a^b \sqrt{2m(E-U)} dx &= \int_a^b \sqrt{2m \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right)} dx = \frac{2}{\omega} \int_a^b \sqrt{E - y^2} dy = \\ &= \frac{2}{\omega} \left(\frac{y}{2} \sqrt{E - y^2} - \frac{E}{2} \arcsin \frac{y}{\sqrt{E}} \right)_a^b = \frac{2}{\omega} \left(\frac{E}{2} \arcsin \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} x \right)_a^b \quad \text{olur.} \end{aligned}$$

Bu halda

$$\int_a^b \sqrt{2m(E-U)} dx = \frac{E}{\omega} \pi \quad \text{alırıq.}$$

Beləcə

$$\frac{E}{\omega} = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{olduğu üçün}$$

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{alarıq.}$$

Yəni, klassikəbənzər osilyatorun enerjisi kvant halındakı enerji üzərinə düşür.

Çalışma IV.2. $V = \frac{\alpha x^2}{2}$ potensialı sahədə harmonik osilyatorun enerji səviyyələrinin dəyişməsinə tapın.

Həll: Həyacanlaşmaya görə

$$E_n^{(1)} = \int \psi_n^{*(o)} \hat{V} \psi_n^{(o)} dx = \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n^{(o)}|^2 x^2 dx = \frac{\alpha}{2} (x^2)_{nn}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{n \neq m} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} = \frac{\alpha^2}{4} \sum_{n \neq m} \frac{x_{nm}^2}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}}$$

$$x_{nm}^2 = \sum_k x_{nk} x_{km} \quad \text{yazarıq.}$$

Onda

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \frac{\alpha}{2} (x^2)_{nn} = \frac{\alpha}{2} (x_{n,n-1} x_{n-1,n} + x_{n,n+1} x_{n+1,n}) = \\ &= \frac{\alpha}{2} \left(\frac{na^2}{2} + \frac{a^2(n+1)}{2} \right) = \frac{\alpha}{4} a^2 (2n+1) = \frac{\alpha}{2m\omega^2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

olar. Burada $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ -dir.

Beləliklə, enerjiyə olan I tərtib əlavə

$$E_n^{(1)} = \hbar \omega \frac{\alpha}{2m\omega^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{olur.}$$

II tərtib əlavə

$$E_n^{(2)} = \frac{\alpha^2}{4} \sum_{n \neq m} \frac{x_{nm}^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad \text{olduğu üçün}$$

$$V_{mn} = \frac{\alpha}{2} \sum_k x_{nk} x_{km} - d \delta_{nm} \quad V_{n-2,n} = \frac{\alpha a^2}{4} \sqrt{n(n-1)}$$

$$V_{n+2,n} = \frac{\alpha a^2}{4} \sqrt{(n+1)(n+2)}$$

alarıq. Onda

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \frac{\alpha^2}{4} \frac{a^2}{4} \frac{n(n-1)}{2\hbar\omega} + \frac{\alpha^2}{4} \frac{a^2}{4} \frac{(n+1)(n+2)}{-2\hbar\omega} = \\ &= \frac{-\alpha^2 a^2}{16 \cdot 2\hbar\omega} 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) = -\frac{\alpha^2}{8m^2 \omega^2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad \text{tapırıq.}$$

Deməli, xarici $\frac{\alpha x^2}{2}$ sahəsində osilyatorun enerjisi

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(1 + \frac{\alpha}{2m\omega^2} + \frac{\alpha^2}{8m^2\omega^4} \right)$$

üçün ifadəsini almış oluruq.

Çalışma IV.3. İkiqat cırışmış halda enerjiyə olan birinci tərtib, dalğa funksiyasına olan II tərtibdən əlavələri tapın.

Həll: İkiqat cırışma olan zaman enerjiyə olan I tərtib əlavə

$$\left. \begin{aligned} (V_{11} - E^{(1)}) a_1^0 + V_{12} a_2^0 &= 0 \\ V_{21} a_1^0 + (V_{22} - E^{(1)}) a_2^0 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

tənlindən tapılar. Burada

$$V_{kk} = \int \psi_k^{*(0)} V \psi_k^{(0)} dV \quad \text{-dir}$$

Bu tənliklər sisteminin həlli determinant sıfır olanda

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

olar. Buradan

$$(V_{11} - E^{(1)})(V_{22} - E^{(1)}) - V_{12}V_{21} = 0$$

$$(E^{(1)})^2 - (V_{11} + V_{22})E^{(1)} + V_{11}V_{22} - V_{12}V_{21} = 0$$

$$E^{(1)} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{(V_{11} + V_{22})^2 + 4V_{11}V_{22} + 4|V_{12}|^2} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm A$$

$$A = \sqrt{(V_{11} + V_{22})^2 + 4V_{11}V_{22} + 4|V_{12}|^2}$$

yazarıq. Onda

$$E_1^{(1)} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} + A$$

$$E_2^{(1)} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} - A$$

olar. Yəni bu iki kökün olması cırışmanı aradan qaldırır. Bu kökləri sistem tənlikdə yerinə yazsaq və

$$\frac{a_1^{(o)}}{a_2^{(o)}} = \frac{V_{12}}{E^{(1)} - V_{11}}$$

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{2V_{12}}{V_{11} - V_{22}}$$

işarələri qəbul etsək

$$\left(\frac{a_1^{(o)}}{a_2^{(o)}} \right)_{E^{(1)}=E_1^{(1)}} = \operatorname{ctg} \frac{\beta}{2}$$

$$\left(\frac{a_1^{(o)}}{a_2^{(o)}} \right)_{E^{(1)}=E_2^{(1)}} = \operatorname{tg} \frac{\beta}{2}$$

alarıq. Beləliklə, $E_1^{(1)}$ və $E_2^{(1)}$ kökləri üçün normalaşmış dalğa funksiyaları

$$\psi_1 = \psi_1^{(o)} \cos \frac{\beta}{2} + \psi_2^{(o)} \sin \frac{\beta}{2}$$

$$\psi_2 = \psi_1^{(o)} \sin \frac{\beta}{2} + \psi_2^{(o)} \cos \frac{\beta}{2}$$

alınar.

V Fəsil

Həyacanlaşma nəzəriyyəsinin tətbiqləri

Müasir fizikanın bir çox problemlərinin həllində IV fəsilə araşdırılmış müxtəlif tətbiqi metodlardan istifadə olunur və onlardan ən çox tətbiq olunanı həyacanlaşma nəzəriyyəsidir.

§38. Yüklü xətti harmonik osilyatorun elektrik sahəsində hərəkəti

Xətti harmonik osilyator xarici elektrik sahəsində olanda onun enerjisi dəyişir. Bu dəyişməni tapmaq üçün fərz edək ki, bir ölçülü osilyatorla xarici elektrik sahəsi rəqsi istiqamətində yönəlmişdi. Onda elektrik sahəsi ilə osilyator

$$\hat{V} = -e\epsilon x \quad (38.1)$$

qarşılıqlı təsirdə olur. Burada e -elektronun yükü, ϵ -isə bircins xarici elektrik sahəsinin intensivliyidir. Xarici (38.1) təsiri olmayanda osilyatorun enerjisi və dalğa funksiyası

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (38.2)$$

kimidir. (bax.(20.14) və (20.25)-ə). Burada E_n -nin və ψ_n -nin sıfır üstləri osilyatorun əsas halını, həyacanlaşmamış halını göstərir. Osilyatorun əsas halı diskret və cırlaşmamış hal olduğuna görə (35.2) və (35.9)-dan

$$E_n^{(1)} = \int \psi_n^{*(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dx$$

$$E_n^{(2)} = \sum \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (38.3)$$

dalğa funksiyasına olan əlavələr

$$\begin{aligned}
 \psi_n^{(1)} &= \sum \frac{V_{nn'}}{E_n^{(o)} - E_{n'}^{(o)}} \psi_n^{(o)} \\
 \psi_n^{(2)} &= \sum_k \sum_m \frac{V_{km} V_{mn}}{(E_n^{(o)} - E_m^{(o)})(E_n^{(o)} - E_k^{(o)})} \psi_k^{(o)} - \\
 &\quad - \sum_k \frac{V_{nn} V_{kn}}{(E_n^{(o)} - E_k^{(o)})^2} \psi_k^{(o)} - \frac{1}{2} \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{(E_n^{(o)} - E_m^{(o)})^2} \psi_n^{(o)}
 \end{aligned} \tag{38.4}$$

hesablanır. (38.2)-nin birincisində (38.1)-i nəzərə alsaq

$$\begin{aligned}
 E_n^{(1)} &= -e\varepsilon \int \psi_n^{*(o)} x \psi_n^{(o)} dx = -e\varepsilon \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times \\
 &\quad \times \int x e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} H_n^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) dx
 \end{aligned}$$

olar. Burada inteqralaltı ifadə tək funksiya olduğu üçün onun cavabı sıfır olar. Yəni, bu halda $E_n^{(1)} = 0$ -dir, enerjii olan birinci tərtib əlavə sıfırdır. İkinci tərtib əlavəni (38.3)-dən hesablayaq. Həyacanlaşmanın matris elementini

$$V_{mn} = -e\varepsilon \int \psi_m^{*(o)} x \psi_n^{(o)} dx \text{ - dir} \tag{38.5}$$

Buradan (38.5) üçün

$$\begin{aligned}
 V_{mn} &= -e\varepsilon \left(2^m m! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(2^n n! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} * \\
 &\quad * \int x e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} H_m \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) dx
 \end{aligned} \tag{38.6}$$

alırıq. Ermit polinomları üçün rekurent düsturdən

$$H_{m+1}(\xi) + 2mH_{m-1}(\xi) = 2\xi H_m(\xi)$$

istifadə olunarsa

$$2x H_m \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) = H_{m+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) + 2m H_{m-1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$$

münasibətini qəbul edərək, (38.6)-nı

$$\begin{aligned}
 V_{mn} = & -e\varepsilon H_m \left(2^m m! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(2^n n! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{-\frac{1}{2}} * \\
 & * \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} m H_{m-1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} H_{m+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx \right\}
 \end{aligned} \tag{38.7}$$

şəklində yazırıq. Osilyator iki halda, $m = n \pm 1$ olanda sıfırdan fərqli matris elementinə sahib olduğu üçün $m = n + 1$ halında

$$\begin{aligned}
 V_{n+1,n} = & -e\varepsilon \left(2^{n+1} (n+1)! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(2^n n! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{-\frac{1}{2}} * \\
 & * \int_{-\infty}^{+\infty} (n+1) H_n^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = -e\varepsilon \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{n+1}{2}}
 \end{aligned}$$

olar. Yə'ni

$$V_{n+1,n} = -e\varepsilon \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \tag{38.8}$$

olur. Eyni yolla $m = n - 1$ halı üçün

$$\begin{aligned}
 V_{n-1,n} = & -e\varepsilon \left(2^{n-1} (n-1)! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(2^n n! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)^{-\frac{1}{2}} * \\
 & * \int_{-\infty}^{+\infty} (n-1)! H_n^2 \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = -e\varepsilon \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\frac{n}{2}}
 \end{aligned}$$

alırıq. Yə'ni, bu halın matris elemanı

$$V_{n-1,n} = -e\varepsilon \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\frac{n}{2}}$$

Onda bu ifadə ilə (38.8)-in cəmini

$$V_{n+1,n} + V_{n-1,n} = -e\varepsilon \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} + \sqrt{\frac{n}{2}} \right)$$

yaza bilərik. Bu hallar üçün enerjilər fərqi

$$E_n^{(o)} - E_{n+1}^{(o)} = \hbar\omega(n - n - 1) = -\hbar\omega$$

$$E_n^{(o)} - E_{n-1}^{(o)} = \hbar\omega(n - n + 1) = \hbar\omega \quad (38.9)$$

dəyəri alar. Belliklə, enerjiyə olan II tərtib əlavə (38.3)-ə görə

$$E_n^{(2)} = \sum_{m=n+1}^{n-1} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(o)} - E_m^{(o)}} = e^2 \varepsilon^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^2 \left\{ \frac{n+1}{-2\hbar\omega} + \frac{n}{2\hbar\omega} \right\} =$$

$$= e^2 \varepsilon^2 \frac{\hbar}{m\omega} \frac{1}{(-2\hbar\omega)} = -\frac{e^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

əldə edilir. Bircins elektrik sahəsi olanda osilyatorun enerjisində olan I tərtib əlavə sıfır olur, II tərtib əlavə sıfırdan fərqli olub, enerjiyə olan əlavə ilə birlikdə

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2} \quad (38.10)$$

olur. Yəni, ikinci tərtib əlavə mənfi olub, sahənin intensivliyi ilə ε -nin kvadratına mütənasibdir.

Osilyatorun dalğa funksiyası xarici elektrik sahəsində

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}} e^{\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) +$$

$$+ \frac{e\varepsilon \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}{\sqrt{2^{n+1} (n+1)! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}} \frac{\hbar}{m\omega} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \sqrt{\frac{n+1}{2}} H_{n+1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) +$$

$$+ \frac{e^2 \varepsilon^2}{4\hbar^2 \omega^2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right) \left\{ \sqrt{n(n+1)} \psi_{n-2}^{(o)} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2}^{(o)} - (2n+1) \psi_n^{(o)} \right\} -$$

$$- \frac{e\varepsilon \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}{\sqrt{2^{n-1} (n-1)! \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}} \frac{1}{\hbar\omega} e^{\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \sqrt{\frac{n}{2}} H_{n-1} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (38.11)$$

şəklindədir.

(38.10) və (38.11) ifadələrindən görüldüyü kimi bircins xarici elektrik sahəsində osilyatorun enerjisi, sahənin intensivliyinin kvadratı ilə, dalğa funksiyası isə intensivliyin birinci və ikinci dərəcəsi ilə mütənasib olaraq dəyişir.

§39. Anharmonik osilyator

Potensial enerjisi

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2} - \text{dən}$$

fərqli olduqda osilyator harmoniklikdən çıxar və onun rəqsləri qeyriharmonik olar. Bu zaman qeyriharmonik rəqs edən osilyatorun enerjisi və dalğa funksiyası dəyişir və bu cürə osilyatora anharmonik osilyator deyilir.

Sistemin potensial enerjisini fəzanın hər hansı nöqtəsində minimumluq şərtinə görə bu nöqtə ətrafında sıraya ayırısaq

$$U = U(0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right)_0 x^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial x^3} \right)_0 x^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\partial^4 U}{\partial x^4} \right)_0 x^4 + \dots =$$

$$= \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4$$

yaza bilərik. Potensial enerjisi

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4 \quad (39.1)$$

olan osilyator anharmonik rəqsi hərəkətdə olar. Bu potensialı

$$\hat{U} = U_0 + \hat{V} \quad (39.2)$$

şəklində yazırıq. U_0 və V üçün

$$U_0 = \frac{m\omega^2 x^2}{2}; V = \alpha x^3 + \beta x^4 \quad (39.3)$$

ifadələrini əldə edərək. Potensialı $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$ olan sistem harmonik

hərəkət edər və $V = \alpha x^3 + \beta x^4$ potensialı mövcudursa belə hərəkət qeyriharmonik hərəkət olar. $V = \alpha x^3 + \beta x^4$ həddini həyacanlaşma qəbul edərək, anharmonik osilyatorun enerjisini və dalğa fun-

ksiyasını tapaq. Burada cırlaşma olmayanda stasionar hal üçün həyacanlaşma nəzəriyyəsinə tətbiq edək. Bu zaman enerjiyə və dalğa funksiyasına olan əlavələr

$$E_n^{(1)} = \int \psi_n^{*(0)} \hat{V} \psi_n^{(0)} dV$$

$$E_n^{(2)} = \sum \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, n \neq m \quad (39.4)$$

şəklindədir.

$$\psi_n^{(1)} = \sum \frac{V_{mn'}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}$$

Osilyatorun əsas halının həyacanlaşmamış hal olması təqdirdə, onun enerjisi və dalğa funksiyası

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\psi_n^{(0)} = C e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (39.5)$$

olaraq, qəbul olunur. (39.4)-ün birincisini tapmaq üçün həyacanlaşmanın matris elementi

$$V_{mn} = (\alpha x^3 + \beta x^4)_{mn} = \alpha x_{mn}^3 + \beta x_{mn}^4 \quad (39.6)$$

yazaq. Burada olan x_{mn}^3 və x_{mn}^4 matris elementlərini (29.7)-yə görə

$$x_{mn}^3 = x_{m'n'} x_{n'm'} x_{m'n} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \left\{ \sqrt{n'} \delta_{m,n'-1} + \sqrt{n'+1} \delta_{m,n'+1} \right.$$

$$\left. \left\{ \sqrt{m'} \delta_{n',m'-1} + \sqrt{m'+1} \delta_{n',m'+1} \right\} \left\{ \sqrt{n} \delta_{m',n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{m',n+1} \right\} \right. \quad (39.7)$$

$$x_{mn}^3 = \sum_k x_{mk} x_{kn}^2 = x_{m,m-1} x_{m-1,m}^2 + x_{m,m+1} x_{m+1,m}^2$$

yaza bilərik. Bu matris elementi n-in bir neçə qiymətində sıfırdan fərqli olur:

a) $n=m-3$ olanda $x_{m,m-3}^3$ elementi sıfırdan fərqli olub

$$x_{m,m-3}^3 = \frac{a^3}{2\sqrt{2}} \sqrt{m(m-1)(m-2)}, a = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{1/2} \quad (39.8)$$

qiymətini alar.

b) $n=m-1$ olanda $x_{m,m-1}^3$ matris elemanı

$$x_{m,m-1}^3 = \frac{3a^3}{2\sqrt{2}} m\sqrt{m} \quad (39.9)$$

olur.

c) $n=m$ olanda

$$x_{m,m}^3 = 0 \quad (39.10)$$

qiymətini alar.

d) $n=m+1$ olanda da

$$x_{m,m+1}^3 = \frac{3a^3}{2\sqrt{2}} (m+1)\sqrt{m+1} \quad (39.11)$$

olar.

e) $n=m+3$ qiymətində

$$x_{m,m+3}^3 = \frac{a^3}{2\sqrt{2}} \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)} \quad (39.12)$$

olur.

f) $n=m-4$ olanda

$$x_{m,m-4}^4 = \frac{a^4}{4} \sqrt{m(m-1)(m-2)(m-3)} \quad (39.13)$$

qiymətini,

g) $n=m-2$ -də isə

$$x_{m,m-2}^4 = \frac{a^4}{2} (2m-1)\sqrt{m(m-1)} \quad \text{və} \quad (39.14)$$

h) $n=m$ üçün isə

$$x_{m,m}^4 = \frac{3a^4}{2} \left(m^2 + m + \frac{1}{2} \right) \quad (39.15)$$

qiymətlərini alırlar.

(39.10) və (39.15)-ə görə (39.4)-dən

$$E_m^{(1)} = \alpha x_{mm}^3 + \beta x_{m,m}^4 = \beta \frac{3a^4}{2} \left(m^2 + m + \frac{1}{2} \right) = \frac{3\beta}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left(m^2 + m + \frac{1}{2} \right)$$

alırıq. Yəni,

$$E_n^{(1)} = \frac{3\beta}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) \quad (39.16)$$

olur. (39.4)-ün ikincisinə görə

$$E_n^{(2)} = \frac{\alpha^2 a^6}{\hbar \omega} \left\{ \frac{1}{3 \cdot 8} n(n-1)(n-2) + \frac{81}{64} n^2(n+1) - \right. \\ \left. - \frac{1}{3 \cdot 8} (n+1)(n+2)(n+3) \right\}$$

olur. (burda βx^4 həddinin ikinci tərtib əlavəsi nəzərə alınmayıb)
Buradan

$$E_n^{(2)} = -\alpha^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^3 \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) \quad (39.17)$$

alınar. Beləliklə, anharmonik osilyatorun enerjisi (39.5), (39.16) və (39.17) ifadələrinə görə

$$E_n^A = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{3\beta}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) - \\ - \alpha^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^3 \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) \quad (39.18)$$

alınır. Burada olan ikinci və üçüncü həddlər osilyatorun qeyriharmonik rəqsləri nəticəsində harmonikliyin pozulması hesabına meydana gələn enerji dəyişimidir. (39.4) düsturların üçüncüsünə əsasən anharmonik asilyatorun dalğa funksiyası

$$\psi_n^A = \psi_n^{(0)} + \frac{\beta}{\hbar \omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right) \frac{1}{2 \cdot 8} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \psi_{n-4}^{(0)} + \\ + \frac{\alpha}{\hbar \omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot \sqrt{2}} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \psi_{n-4}^{(0)} + \\ + \frac{\beta}{\hbar \omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \frac{(2n-1)}{2 \cdot 2} \sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2}^{(0)} + \frac{\alpha}{\hbar \omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \frac{3}{2\sqrt{2}} n \sqrt{n} \psi_{n-1}^{(0)} - \\ - \frac{\alpha}{\hbar \omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \frac{3}{2\sqrt{2}} (n+1) \sqrt{n+1} \psi_{n+1}^{(0)} - \\ - \frac{\beta}{\hbar \omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 \frac{2n+3}{4} \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2}^{(0)} -$$

$$-\frac{\alpha}{3\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \psi_{n+3}^{(o)} -$$

$$-\frac{\beta}{\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2 \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \psi_{n+4}^{(o)}$$

(39.19)

ifadəsi ilə təmsil olunur.

(39.19) hal funksiyası anharmonik osilyatorun hal funksiyası olub, osilyatorun harmoniklikdən kənara çıxmasını göstərir.

§40. Stark effekti (xarici elektrik sahəsində atomun enerjisi)

Təcrübədən mə'lumdur ki, (1913 il) xarici elektrik sahəsində atomların enerji səviyyələri dəyişir. Bu dəyişmə elektrik sahəsinin zəif və ya güclü olmasından, sahənin bircinsliliyindən, elektrik sahəsinə hansı atomun salınmasından asılıdır. Zəif bircins elektrik sahəsinə hidrogen atomu saldıqda atomun enerji səviyyələrinin dəyişməsi sahənin intensivliyinin birinci dərəcəsi ilə, güclü sahədə isə sahənin kvadratı ilə mütənasib olaraq dəyişir. Digər atomlarda isə enerji xəttlərinin parçalanması ε^2 mütənasib olaraq dəyişmə baş verir. Beləliklə, xarici bircins elektrik sahəsində atomların enerji səviyyələri dəyişir və bu dəyişməyə STARK effekti deyilir. Əgər enerji dəyişməsi ε -ilə xarakterizə olursa, belə Stark effektinə xətti Stark effekti, ε -nın kvadratı ilə mütənasibdirsə belə effekte qeyri-xətti Stark effekti deyilir.

Stark effektinin meydana gəlməsinin səbəbini kvant mexanikası izah edir. Öncə xarici sahənin güclü və ya zəif sahə olmasını müəyyən etmək lazımdır. Aşkındır ki, atomunun daxilindəki elektrik sahəsinin intensivliyi

$$\varepsilon_d = \frac{e}{a_0^2}$$

şəklində olur. Burada a_0 -birinci Bohr orbitinin radiusudur ($a_0 = 0,5 \cdot 10^{-8} sm$) e-elektronun yüküdür. Bunları yerinə yazsaq $\varepsilon_d = 5,13 \cdot 10^9 v/sm$ alarıq. Onda xarici sahənin intensivliyi

$\varepsilon_x = 10^5 \nu/sm$ olduqda belə sahə ε_d -yə nisbətən zəif sahə olar.

Deməli, intensivliyi $10^5 \frac{V}{sm}$ və bundan kiçik olan sahələr zəif,

$10^5 \frac{V}{sm}$ -dən böyük sahələr güclü sahələrdi. Beləliklə, xarici sahənin

intensivliyi $10^5 \frac{V}{sm}$ -dən kiçik olan halda hidrogen atomunda xətti

Stark effekti, digər atomlar üçün qeyri xətti Stark effekti, güclü

($\varepsilon_x = 10^5 \frac{V}{sm}$) sahədə hidrogen atomu üçün kvadratik Stark effekti

alınır. Sahəni gücləndirdikdə spektral xəttlər itir və ionlaşma baş verir. Xarici elektrik sahəsində atom elektronunun potensial enerjisi

$$V = -\vec{d}\vec{\varepsilon}$$

şəklində olur. \vec{d} -atomun elektrik dipol momentidir. Əgər $\vec{\varepsilon}$ elektrik sahəsi z oxu boyunca yönəlmişə, onda bu enerji

$$V = -\vec{d}\vec{\varepsilon} = -ez\varepsilon \cos\theta \quad (40.1)$$

olur. $d=ez$ dipol momentinin orta qiymətidir. Hidrogenə bənzər atomların əsas halının enerjisi $E_{nl}^{(0)}$ və dalğa funksiyası

$$\psi_{nlm}^{(0)} = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \quad (40.2)$$

$E_{nl}^{(0)}$ enerjisini xarakterizə edən ümumi funksiya

$$\varphi = \sum_{m=-l}^{+l} a_m \psi_m^{(0)} = \sum a_m \psi_{nlm}^{(0)} \quad (40.3)$$

şəklində yazılır. Elektrik dipol momentinin orta qiyməti

$$\vec{d}_z = \int \varphi^* d_z \varphi dV = \int \sum_m \sum_{m'} a_m^* \psi_{nlm}^* d_z a_m \psi_{nlm}^{(0)} dV = \quad (40.4)$$

$$= \sum_m \sum_{m'} a_m^* a_m (d_z)_{m'm}$$

yazılır. Burada

$$(d_z)_{m'm} = \int \psi_{nlm}^{(0)*} d_z \psi_{nlm}^{(0)} dV \quad (40.5)$$

elektrik dipol momentinin matris elemanıdır. (40.1)-ə görə

$$V_{m'm} = -\vec{d}\vec{\varepsilon}_{m'm} = -d_{m'm}\varepsilon \quad (40.6)$$

olur. (40.2) ifadəsinə görə (40.5)-dən elektrik dipol momentinin matris elemanı

$$(d_z)_{m'm} = -e \int_{-\infty}^{+\infty} R_{nl} R_{n'l} r^3 dr \int_0^\pi P_l^{m'} P_l^m \cos\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{-im'\varphi} e^{im\varphi} d\varphi \quad (40.7)$$

kimi alınır. (40.7)-də $m' \neq m$ olarsa, inteqral

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi = 0$$

olur. Əgər $m = m'$ olursa,

$$\int_0^\pi P_l^m P_l^m \cos\theta \sin\theta d\theta = 0$$

olar. Yəni, hər iki halda ($m' \neq m, m = m'$) olduqda

$$(d_z)_{m'm} = 0 \quad (40.8)$$

olar.

Deməli, $E_{nl}^{(0)}$ enerjiyə uyğun olan halda elektrik dipol momentinin orta qiyməti sıfır olur. Onda (40.6) uyğun olaraq həyəcanlaşma enerjisi sıfır olur. Yə'ni, hidrogenəbənzər atomlarda xarici elektrik sahəsində, sahənin intensivliyi ilə mütənasib olaraq enerji səviyyələrinin parçalanması baş verər. Başka sözlə, xətti Stark effekti müşahidə olunmaz. Lakin sahənin intensivliyi ilə mütənasib olaraq qeyrixətti Stark effekti müşahidə olunur. Çünki, atomun deformasiyası ilə əlaqədar olaraq (başka elektronların sahəsinin mövcud olmasına uyğun) orta elektrik dipol momenti intensivlik ilə mütənasib olur:

$$\vec{d}_z = \alpha \varepsilon \quad (40.9)$$

və bu dipol momentinin yaranması, atomun xarici sahədə polyarlaşmasına (qütübləşməyə) gətirib, çıxarır. Onda potensial enerji

$$V = -\frac{\alpha}{2} \varepsilon^2 \quad (40.10)$$

şəklində olar və enerjinin dəyişməsi ε^2 ilə mütənasib olur.

§41. Hidrogen atomu üçün Stark effekti

Stark effektinin dürüst izahını yalnız kvant mexanikasında şərh edilir. Bu baxımdan hidrogen atomunun elektrik sahəsində enerji səviyyələrinin dəyişməsinə, yəni, xətti Stark effektini kvant mexanikasına görə araşdırmaq. Hidrogen atomunun $n=1$ halı cırılşmamış (qatmarlaşmamış) hal olduğu üçün bu hal parçalanmaya müruz qalmaz. Ona görə də $n=2$ halının xarici bircins elektrik sahəsində dəyişməsinə baxaq. Hidrogen atomunun təməl halının enerjisi

$$E_n^{(0)} = -\frac{\hbar R_r}{n^2}$$

$$(R_r = e^4 m / 2\hbar^3 \text{ Ridberq sabitidir})$$

və hal funksiyası

$$\psi_{nlm}^{(0)} = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \text{ -dir}$$

$n=2$ halı üçün

$$E_2^{(0)} = -\frac{\hbar R_r}{4} \quad (41.1)$$

$$\psi_{2lm}^{(0)} = R_{2l}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

olur. Bu hal dörd qat cırılşmış hal olduğuna görə

$n=2$ -nin biri $l=0, m=0$

$n=2$ -nin ikincisi $l=1, m=0$

$n=2$ -nin üçüncüsü $l=1, m=1$

$n=2$ -nin dördüncüsü isə $l=1, m=-1$

olar. Onda (41.1)-də cırılşmış halın funksiyaları bunlardı

$$\psi_1^{(0)} \equiv \psi_{200} = R_{20}(r)Y_0^0(\theta, \varphi)$$

$$\psi_2^{(0)} \equiv \psi_{210} = R_{21}(r)Y_1^0(\theta, \varphi)$$

$$\psi_3^{(0)} \equiv \psi_{211} = R_{21}(r)Y_1^1(\theta, \varphi)$$

$$\psi_4^{(0)} \equiv \psi_{21-1} = R_{21}(r)Y_1^{-1}(\theta, \varphi)$$

(41.2)

Əlavə D.12-dən sferik funksiyalar

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_1^0 = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \cos\theta,$$

$$Y_1^1 = \frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_1^{-1} = -\frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

şəkildədir. Laquerre polinomunun xassələrinə görə (41.2)-də radial funksiyalar

$$R_{20} = \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{2a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$
(41.4)

şəklində olurlar. $a_0 = \frac{\hbar^2}{mr_0^2}$ (r_0 – Borh orbitinin radiusudur).

(41.2)-də (41.4)-ü nəzərə alsaq, $n=2$ səviyyəsinin dalğa funksiyaları

$$\psi_1^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_2^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_3^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{2a_0}} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$\psi_4^{(0)} = -\frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{-i\varphi}$$
(41.5)

yazılar. Cırlaşma olanda həyacanlaşma nəzəriyyəsində alınan (36.10) tənliyinə görə

$$\sum_{k'} (V_{kk} - E^{(l)} \delta_{kk}) \mu_k^{(0)} = 0$$

istifadə etsək

$$\begin{aligned}
(V_{11} - E^{(1)})a_1^{(o)} + V_{12}a_2^{(o)} + V_{13}a_3^{(o)} + V_{14}a_4^{(o)} &= 0 \\
V_{21}a_1^{(o)} + (V_{22} - E^{(1)})a_2^{(o)} + V_{23}a_3^{(o)} + V_{24}a_4^{(o)} &= 0 \\
V_{31}a_1^{(o)} + V_{32}a_2^{(o)} + (V_{33} - E^{(1)})a_3^{(o)} + V_{34}a_4^{(o)} &= 0 \\
V_{41}a_1^{(o)} + V_{42}a_2^{(o)} + V_{43}a_3^{(o)} + (V_{44} - E^{(1)})a_4^{(o)} &= 0
\end{aligned} \tag{41.6}$$

tənliklərini alırıq. Burada

$$\begin{aligned}
V_{kk} &= \int \psi_k^{*(o)} \hat{V} \psi_k^{(o)} dV = \int \psi_k^{*(o)} e \mathcal{E} \cos \theta \psi_k^{(o)} dV = \\
&= \int \psi_i^{*(o)} e \mathcal{E} \cos \theta \psi_i^{(o)} dV
\end{aligned} \tag{41.7}$$

olur, haradək $\psi_i^{(o)}$ -lər $\psi_{200}^{(o)}, \psi_{210}^{(o)}, \psi_{211}^{(o)}, \psi_{21,-1}^{(o)}$ -dir, onda

$$V_{11} = e \mathcal{E} \int \psi_1^{*(o)} r \cos \theta \psi_1^{(o)} dV$$

$$V_{12} = e \mathcal{E} \int \psi_1^{*(o)} r \cos \theta \psi_2^{(o)} dV$$

$$V_{13} = e \mathcal{E} \int \psi_1^{*(o)} r \cos \theta \psi_3^{(o)} dV$$

$$V_{14} = e \mathcal{E} \int \psi_1^{*(o)} r \cos \theta \psi_4^{(o)} dV$$

və s. qarşılıqlı təsirlər olur. Buradan

$$V_{11} = e \mathcal{E} \int \psi_1^{*(o)} r \cos \theta \psi_1^{(o)} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi =$$

$$= \frac{e \mathcal{E}}{4\pi} \left(\frac{1}{2a_o} \right)^3 \int_0^\infty r^3 \left(2 - \frac{r}{a_o} \right)^2 e^{-\frac{r}{a_o}} dr \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = 0$$

olur. Eyni yolla V_{44} -də

$$V_{44} = e \mathcal{E} \int \psi_4^{*(o)} r \cos \theta \psi_4^{(o)} dv = \frac{1}{4} \frac{e \mathcal{E}}{a_o^2} \left(\frac{1}{2a_o} \right)^3 \int_0^\infty r^3 e^{-\frac{r}{a_o}} dr \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos \theta d\theta = 0$$

və s. olar. Beləliklə, V_{12} və V_{21} -dən başqa yerdə qalan matris elementləri sıfır olması aşkar olur. V_{12} matris elementini

$$\begin{aligned}
V_{12} &= e \mathcal{E} \int \psi_1^{*(o)} r^3 dr \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta r d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \psi_2^{(o)} = \\
&= \left(\frac{1}{2a_o} \right)^3 \frac{e \mathcal{E}}{2a_o} \int_0^\infty r^4 \left(2 - \frac{r}{a_o} \right) e^{-\frac{r}{a_o}} dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta
\end{aligned}$$

əldə edirik. Buradan inteqrallar üçün

$$\int_0^{\pi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \frac{2}{3}$$

$$\int_0^{\infty} r^4 \left(2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{a_0}} dr = -72a_0^5$$

cavabını alırıq. Beləcə, matris elementi

$$V_{12} = \frac{e\varepsilon}{16a_0^4} \frac{2}{3} (-72a_0^5) = -3e\varepsilon a_0$$

olar. Deməli,

$$V_{12} = V_{21} = -3e\varepsilon a_0 \quad (41.8)$$

olması müəyyən olunur. (41.6) ifadəsində (41.8)-i və sıfır matris elementlərini nəzərə alsaq (41.6) sistemi

$$\left. \begin{aligned} -E^{(1)} a_1^{(0)} - 3e\varepsilon a_0 a_2^{(0)} &= 0 \\ -3e\varepsilon a_0 a_1^{(0)} - E^{(1)} a_2^{(0)} &= 0 \\ -E^{(1)} a_3^{(0)} &= 0 \\ -E^{(1)} a_4^{(0)} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (41.9)$$

şəklində yazılar. (41.6) tənliklərinə əsasən, bu tənliklərin əmsallarından düzələn determinant sıfır olar

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & -3e\varepsilon a_0 & 0 & 0 \\ -3e\varepsilon a_0 & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

Buradan da

$$(E^{(1)})^4 + 3e\varepsilon a_0 \begin{vmatrix} -3e\varepsilon a_0 & 0 & 0 \\ 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = (E^{(1)})^4 - (3e\varepsilon a_0)^2 (E^{(1)})^2 = 0 \quad (41.10)$$

olur. Bu tənliyi həll etsək

$$\begin{aligned}
(E^{(i)})^2 \left((E^{(i)})^2 - (3e\epsilon\alpha_0)^2 \right) &= 0 \\
E_1^{(i)} &= 3e\epsilon\alpha_0 \\
E_2^{(i)} &= -3e\epsilon\alpha_0 \\
E_3^{(i)} &= E_4^{(i)} = 0
\end{aligned} \tag{41.11}$$

alarıq. (41.11) qiymətini nəzərə alsaq, xarici elektrik sahəsində Hidrojen atomunun enerjisi üç dəyər almış olur:

$$E_1(2) = -\frac{R_r \hbar}{4} + 3e\epsilon\alpha_0 \quad (\text{a}) \quad (41.12a)$$

$$E_2(2) = -\frac{R_r \hbar}{4} - 3e\epsilon\alpha_0 \quad (\text{b}) \quad (41.12b) \quad (41.12)$$

$$E_3(2) = E_4(2) = E^{(o)}(2) = \frac{R_r \hbar}{4} \quad (\text{c}) \quad (41.12c)$$

(41.9)-da (41.11) köklərini nəzərə alsaq əmsallar üçün

$$\begin{aligned}
1) \quad a_1^{(o)} &= a_2^{(o)} = a^{(o)} \\
a_3^{(o)} &= a_4^{(o)} = 0 \\
2) \quad a_1^{(o)} &= -a_2^{(o)} = a^{(o)} \\
a_3^{(o)} &= a_4^{(o)} = 0 \\
3) \quad a_1^{(o)} &= a_2^{(o)} = 0 \\
a_3^{(o)} &\neq 0, a_4^{(o)} \neq 0
\end{aligned} \tag{41.13}$$

təyin edərik.

Normalama şərtinə görə ψ -funksiyası

$$\psi = \sum_k a_k^{(o)} \psi_k^{(o)} = a_1^{(o)} \psi_{200}^{(o)} + a_2^{(o)} \psi_{210}^{(o)} + a_3^{(o)} \psi_3^{(o)} + a_4^{(o)} \psi_4^{(o)}$$

olduğu üçün $\int |\psi|^2 = 1$

şərtindən 1) və 2) hal da

$$|a^{(o)}|^2 \int |\psi_{200}^{(o)}|^2 dV + |a^{(o)}|^2 \int |\psi_{210}^{(o)}|^2 dV = 1$$

olar və

$$2|a^{(o)}|^2 = 1, a^{(o)} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

əldə edilir. 3) və 4) halında isə

$$|a_3^{(o)}|^2 \int |\psi_{211}^{(o)}|^2 dV + |a_4^{(o)}|^2 \int |\psi_{21,-1}^{(o)}|^2 dV = 1$$

yazırıq. Buradan da

$$|A^{(o)}|^2 = |a_3^{(o)}|^2 + |a_4^{(o)}|^2 = 1$$

təyin olunur. Beləliklə, atomun xarici sahədə dalğa funksiyası (41.12a) halı üçün

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}^{(o)} + \psi_{210}^{(o)}) \quad (41.13)$$

(41.12b) halı üçün

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}^{(o)} - \psi_{210}^{(o)}) \quad (41.14)$$

(41.12c) halı üçün isə

$$\psi_3 = a_3^{(o)} \psi_{211}^{(o)} + a_4^{(o)} \psi_{21,-1}^{(o)} \quad (41.15)$$

alınır. Burada ψ_3 funksiyası həm $E_3(2)$, həm də $E_4(2)$ enerji qiymətlərini xarakterizə edir. Göründüyü kimi xarici elektrik sahəsi olmayanda enerjinin bir qiymətinə ·

$$E^{(o)}(2) = -\frac{R_r \hbar}{4}$$

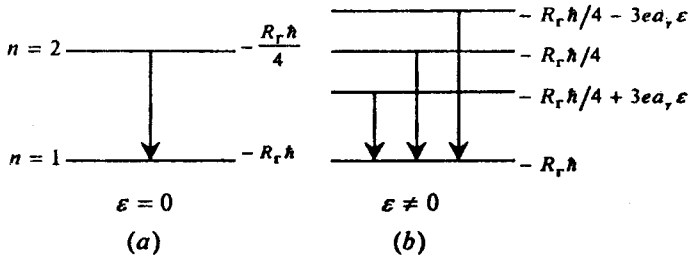
müvafiq olan dörd dənə $\psi_{200}^{(o)}, \psi_{210}^{(o)}, \psi_{211}^{(o)}, \psi_{21,-1}^{(o)}$ dalğa funksiyasına uyğun gəldikdə, xarici elektrik sahəsində üç enerji qiyməti (41.12a), (41.12b) və (41.12c) alınır və onlar (41.13), (41.14), (41.15) dalğa funksiyaları ilə xarakterizə olunurlar:

$$\begin{aligned} E_1(2) &= -\frac{R_r \hbar}{4} + 3e\epsilon a_o, \quad \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}^{(o)} + \psi_{210}^{(o)}) \\ E_2(2) &= -\frac{R_r \hbar}{4} - 3e\epsilon a_o, \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200}^{(o)} - \psi_{210}^{(o)}) \\ E_3(2) &= -\frac{R_r \hbar}{4}, \quad \psi_3 = a_3^{(o)} \psi_{211}^{(o)} + a_4^{(o)} \psi_{21,-1}^{(o)} \end{aligned} \quad (41.16)$$

Bu qiymətlərin alınması həyacanlaşmış halda sistemin mərkəzi sim-

metriyaya malik olmamasındadır. Hidrojen atomunda bunun nəti-cəsində sıfırdan fərqli elektrik dipol momenti yaranır və bu dipol momenti xarici elektrik sahəsi ilə qarşılıqlı təsirdə olur.

(41.16)-dan görüldüyü kimi xarici elektrik sahəsi cırılşmanı qismən aradan qaldırmış olur. Xarici sahə olmayanda dördqat cırılşmış hal sahə olanda üç enerji qiymətinə uyğun gəlir. Hidrojen atomu üçün Stark effekti şəkil II.14-də göstərilmişdi.



Şəkil II.14. Hidrojen atomunun $n=2$ səviyyəsi üçün Stark effekti: (a)-xarici sahə olmayanda, (b)-xarici sahə olanda.

Güclü sahələrdə hidrojen atomunda qeyrixətti Stark effekti alınır.(37.3)-ə görə II tərtib əlavə

$$E^{(2)} = \sum_{k'} \frac{|V_{kk'}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}$$

düsturundan hesablanır. Buradan da enerjiyə olan II tərtib əlavə üçün

$$E^{(2)} = -\frac{e^2 \epsilon^2}{16} n^4 (17n^2 - 9m^2 + 19) \quad (41.17)$$

alarıq. Burada m - maqnit kvant ədədidir. Deməli, kifayət qədər güclü sahələrdə maqnit kvant ədədinə görə də cırılşma aradan götürülür.

§42. Üçölçülü rotatorun xarici elektrik sahəsində hərəkəti

Rotatorun enerjisi m kvant halında orbital kvant ədədi l -dən asılı olub

$$E_l^{(0)} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2J} \quad (42.1)$$

Bu cürə enerjili rotatoru qarşılıqlı təsir potensialı

$$V = -ed \cos \theta \quad (42.2)$$

olan elektrik sahəsində (d-elektrik dipol momentidi) yerləşdirilir. E_1 enerjisinə sahib olan əlavələr bu sahənin hesabına

$$E^{(1)} = \int Y_l^{*m}(\theta, \varphi) \hat{V} Y_l^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$$

$$E^{(2)} = \sum_{k'} \frac{|V_{kk'}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \quad (42.3)$$

düsturlarından təyin edilir.

Rotatorun həyəcanlaşmamış əsas halı

$$\ell = 0, m = 0$$

$$\ell = 1, m = 0, +1, -1 \quad (42.4)$$

olarsa, V_{00} , V_{01} , V_{11} və $V_{1,-1}$ alınır. Çünki (41.4) halının dalğa funksiyaları

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_1^0 = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^1 = \frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_1^{-1} = -\frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

olduğu üçün

$$V_{kk} = -ed \int \int Y_{\ell=0;1}^{m=0;0\pm 1} \cos \theta Y_{\ell=0;1}^{m=0;0\pm 1} \sin \theta d\theta d\varphi \quad (42.5)$$

matris elementi sıfır olar. Belə ki, bu matris elementinə daxil olan inteqrallar bu hallarda ($\ell=0$, $m=0$, $\ell=1$, $m=0, \pm 1$)

$$\int_{-1}^{+1} x^3 dx; \int_{-1}^{+1} (1-x^2) x dx$$

şəklində olduğundan ∓ 1 intervalında onların qiyməti sifıra bərabər olar. Yəni,

$$V_{kk} = 0 \quad (42.6)$$

olar və buradanda enerjiyə olan əlavə üçün

$$E^{(1)} = V_{kk} = 0 \quad (42.7)$$

əldə edərik. İkinci tərtibdə enerjiyə olan əlavə isə (41.3)-ə görə

$$E^{(2)} = \sum_t \frac{|V_{ot}|^2}{E_o^{(o)} - E_t^{(o)}}$$

olduğu üçün

$$E_o^{(o)} - E_t^{(o)} = -\frac{\hbar^2}{3J}$$

alınar və enerjiyə olan əlavəni

$$E^{(2)} = -\frac{Jd^2 \varepsilon^2}{3\hbar^2}$$

tapmış oluruq. Onda xarici bircins elektrik sahəsində rotatorun enerjisi

$$E = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2J} + V_{kk} + \sum_t \frac{|V_{ot}|^2}{E_o^{(o)} - E_t^{(o)}} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2J} - \frac{Jd^2 \varepsilon^2}{3\hbar^2} \quad (42.9)$$

olur. (42.9) ifadəsindən görüldüyü kimi enerjiyə olan əlavə, mənfi qiymət alır və xarici sahənin kvadratı ilə mütənasibdir.

§43. Spinin varlığı. Məxsusi qiymət və məxsusi funksiyalar. Pauli matrisləri

Atomların xarici maqnit sahəsində s-halının iki yaxın səviyyələrə parçalanması və ya maqnit momentinin

$$\mu = -\mu_o m$$

olmasını, həm də

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -\frac{e}{2mc}$$

münasibətinin doğru olmasını müəyyən etmək təcrübədə Stern-Herlak və Eynşteyn-de Qaas tərəfindən müşahidə olunmuşdur. Stern-Herlak təcrübəsində hidrogen atomunun s-halında ($l=0$) səviyyəsi bircins olmayan maqnit sahəsində iki dəstəyə ayrılır. Belə ki, elektronun məxsusi maqnit momenti Stern Herlak təcrübəsindən Bohn maqnitonuna bərabər olub

$$\mu_z = \mp \frac{e\hbar}{2mc} = \mp \mu_0$$

qiymətini alır. Eynşteyn-de Qaas təcrübəsində maqnit momenti

$$\vec{\mu} = \frac{e}{mc} \vec{S}$$

olur ki, burada \vec{S} -spin momentidir. Bu spin momenti elektronun orbital hərəkəti ilə əlaqədar deyilir (orbital hərəkətlə bağlı olan

maqnit momenti $\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L}$ şəklindədir.)

Bu nəticələr həm klassik və həmdə Şchrödingerin kvant mexanikasının müddəalarına görə anlaşılmaz qalır. Ona görə də məxsusi momentin (spinin) varlığını nəzəriyyəyə daxil edək.

Bunun üçün fərz edək ki, dalğa funksiyası fəza koordinatlarından başqa bir dəyişən olan spin dəyişəni s-dən də asılı olsun.

$$\psi = \psi(\vec{r}, t, s)$$

Burada S- dəyişəni fəza ilə əlaqəsi olmayan, zərrəciyin daxili simmetriyasına bağlı bir dəyişəndir. Ona görə dalğa funksiyasını

$$\psi(\vec{r}, t, s) = \psi(\vec{r}, t)\varphi(s)$$

şəklində yazı bilərik. Bu funksiyaya unitar çevirmə ilə təsir etsək, yə'ni

$$U\psi(\vec{r}, t, s) = U\psi(\vec{r}, t)\varphi(s) = \psi(\vec{r}, t)U\varphi(s)$$

$$\varphi'(s) = U\varphi(s) = (1 + \delta U)\varphi(s)$$

yazarıq.

$U = 1 + \delta U$ çevirməsi sonsuz kiçik çevirmə olur.

$$\delta\psi = \delta U\varphi(s)$$

Unitar çevirmə

$$U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + i\beta & \gamma + i\delta \\ -\gamma + i\delta & \alpha - i\beta \end{pmatrix}; \quad \alpha \rightarrow 1$$

olarsa

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & -\beta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \gamma \\ -\gamma & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & \delta \\ \delta & 0 \end{pmatrix}$$

şəklində yazırıq. Buradan

$$\begin{aligned} U\varphi(s) &= \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \varphi(s) + i\beta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \varphi(s) + \gamma \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \varphi(s) + \\ &+ i\delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \varphi(s) = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \alpha + i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \beta + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \gamma + \right. \\ &\left. + i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \delta \right] \varphi(s) \end{aligned} \quad (43.1)$$

əldə edirik. (43.1) ifadəsini

$$U\varphi(s) = \varphi(s) + i \sum_{k=1}^3 \sigma_k \delta a_k \varphi(s) = \left(1 + i \sum_{k=1}^3 \sigma_k \delta a_k \right) \varphi(s)$$

kimidə yazı bilərik. Burada

$$\begin{aligned} \delta a_1 &= \alpha, & \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv \sigma_x, \\ \delta a_2 &= \gamma, & \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv \sigma_y, \\ \delta a_3 &= \beta, & \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv \sigma_z, \end{aligned} \quad (43.2)$$

işarələri qəbul etsək, σ_x, σ_y və σ_z spin matrisləri alınar ki, bunlara Pauli matrisləri deyilir. Bu matrislər

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z; & \sigma_z \sigma_x &= -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y; \\ \sigma_y \sigma_z &= -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x; & \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \end{aligned} \quad (43.3)$$

münasibətlərini ödəyən matrislər olurlar. Əgər bu matrislər vasitəsi ilə

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (43.4)$$

operatoru daxil etsək, üç dənə

$$\begin{aligned} \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \sigma_x \\ \hat{S}_y &= \frac{\hbar}{2} \sigma_y \\ \hat{S}_z &= \frac{\hbar}{2} \sigma_z \end{aligned} \quad (43.5)$$

spin operatorlarını alırıq. Unitarlığa görə $U^+U = 1$ olduğundan

$$\begin{aligned} U^+U &= UU^+ = \left(1 - i \sum \sigma_k^+ \delta a_k\right) \left(1 + i \sum \sigma_k \delta a_k\right) = \\ &= 1 + i \sum (\sigma_k - \sigma_k^+) \delta a_k - \dots = 1 \end{aligned}$$

olar. Buradan $\sigma_k = \sigma_k^+$ olar və buda Pauli matrislərinin ermit matrislər olması deməkdir. Pauli matrislərindən istifadə edərək \hat{S}^2 operatorunun məxsusi qiymətini tapırıq

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{\hbar^2}{4} 3$$

$$\hat{S}^2 \varphi(s) = \frac{3\hbar^2}{4} \varphi(s) = \hbar^2 s(s+1) \varphi(s)$$

Bu bərabərliyin ödənməsi üçün

$$\frac{3\hbar^2}{4} \varphi(s) = \hbar^2 s(s+1) \varphi(s)$$

münasibətlərindən

$$S = \frac{1}{2}$$

alırıq. Deməli, elektron, spin momentini $S = \frac{1}{2}$ olan zərrəcikdir

($\hbar = 1$ olanda). İndi isə S_x , S_y , S_z operatorlarının məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyasını araşdırırıq. Bunun üçün elektronun dalğa funksiyasını iki sütunlu matris şəklində təsvir edək (σ -lar iki sətir və sütunlu matrislər olduğuna görə)

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (43.6)$$

a) $\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x$ olduğu için

$$\hat{S}_x \psi_{s_x} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \psi_{s_x} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix} = S_x \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\hbar}{2} \psi_2 = S_x \psi_1 \\ \frac{\hbar}{2} \psi_1 = S_x \psi_2 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \frac{\hbar}{2} \frac{\hbar}{2 S_x} \psi_1 = S_x \psi_1 \\ \frac{\hbar^2}{4} \psi_1 = S_x^2 \psi_1 \end{array} \quad S_x = \pm \frac{\hbar}{2}$$

alınır. Eğer $S_x = \frac{\hbar}{2}$ olursa, $\psi_1 = \psi_2$ olur, $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ olduğunda ise $\psi_1 = -\psi_2$ olur. Hal fnksiyasının normallama şartına göre

$$|\psi_{1s_x}|^2 + |\psi_{1s_x}|^2 = 1$$

$\psi_{1s_x} = \psi_{2s_x} = \psi_{s_x}$ olduğu için $S_x = \frac{\hbar}{2}$ halinde $\psi_{s_x} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ alınır.

$S_x = -\frac{\hbar}{2}$ halinde ise $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \psi_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ olur. Onda $S_x = \frac{\hbar}{2}$ olanda

$$\psi_{s_x} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

olar, lakin $S_x = -\frac{\hbar}{2}$ olanda ise

$$\psi_{s_x} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

olar. Beləliklə, \hat{S}_x operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}, \psi_{S_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ S_x &= -\frac{\hbar}{2}, \psi_{S_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (43.7)$$

şəklində tapılır.

b) $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$ olduğu üçün

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -i\psi_2 \\ i\psi_1 \end{pmatrix} = S_y \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

yazılar. Buradan $S_y = \frac{\hbar}{2}$ halında

$$-i\psi_2 = \psi_1$$

$$i\psi_1 = \psi_2$$

olur, $S_y = -\frac{\hbar}{2}$ halında isə

$$i\psi_2 = \psi_1$$

$$i\psi_1 = -\psi_2$$

alınar. Onda $S_y = \frac{\hbar}{2}$ qiymətində

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ i\psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \psi_1$$

və $S_y = -\frac{\hbar}{2}$ qiymətində isə

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -i\psi_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \psi_1$$

alınar. Normalama şərtinə görə

$$|\psi_{1s_y}|^2 + |\psi_{2s_y}|^2 = 1$$

olur. Beləcə, $\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası

$$\begin{aligned} S_y &= \frac{\hbar}{2}, \quad \psi_{s_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ S_y &= -\frac{\hbar}{2}, \quad \psi_{s_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (43.8)$$

c) $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ olduqda

$$\hat{S}_z \psi_{s_z} = S_z \psi_{s_z}$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix} = S_z \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}; \quad \begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \psi_1 &= S_z \psi_1 \\ -\frac{\hbar}{2} \psi_2 &= S_z \psi_2 \end{aligned}$$

alınar. Buradan

$$S_z = \frac{\hbar}{2}$$

$$S_z = -\frac{\hbar}{2}$$

olar. Normallama şərtinə görə

$$|\psi_{1s_z}|^2 + |\psi_{2s_z}|^2 = 1$$

yazarıq. $S_z = \frac{\hbar}{2}$ olanda

$$\psi_{1s_z} = 1, \psi_{2s_z} = 0$$

olur. Lakin $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ olduqda isə

$$\psi_{1s_z} = 0, \psi_{2s_z} = 1$$

olar. Onda da

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

hal funksiyası $S_z = \frac{\hbar}{2}$ olanda

$$\psi_{S_z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$S_z = -\frac{\hbar}{2}$ olanda isə

$$\psi_{S_z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

olmalıdır. Beləliklə, $\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$ operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası

$$S_z = \frac{\hbar}{2}, \quad \psi_{S_z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$S_z = -\frac{\hbar}{2}, \quad \psi_{S_z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (43.9)$$

şəklində olur. \hat{S}_x, \hat{S}_y və \hat{S}_z operatorlarının arasında

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = \hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i\hbar \hat{S}_z$$

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = \hat{S}_y \hat{S}_z - \hat{S}_z \hat{S}_y = i\hbar \hat{S}_x \quad (43.10)$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = \hat{S}_z \hat{S}_x - \hat{S}_x \hat{S}_z = i\hbar \hat{S}_y$$

komutasiya münasibətləri mövcuddur. Bu münasibətlər orbital momentlər \hat{L}_x, \hat{L}_y və \hat{L}_z arasında olan (17.5) münasibətlərinin eyni olduğuna görə spinin moment xarakteri daşması aşkar olur. Ona görə spin momenti, məxsusi moment adlanır və bu momentin varlığı daxili simmetriya ilə əlaqədardır. Bu baxımdan spin momentinin varlığı zərrəciyin (elektronun) fərdi xassəsi olduğu meydana çıxır.

Deməli, moment xarakteri daşıyan \hat{S}_x, \hat{S}_y və \hat{S}_z operatorunun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası

$$\begin{aligned}
 S_x &= \frac{\hbar}{2}, \psi_{S_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 S_x &= -\frac{\hbar}{2}, \psi_{S_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\
 S_x &= -\frac{\hbar}{2}, \psi_{S_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\
 S_y &= \frac{1}{2}, \psi_{S_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ +i \end{pmatrix} \\
 S_y &= -\frac{1}{2}, \psi_{S_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \\
 S_z &= \frac{1}{2}, \psi_{S_z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
 S_z &= -\frac{1}{2}, \psi_{S_z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{43.11}$$

qiymətləri alır və həmçinin \hat{S}^2 ilə \hat{S}_z arasında münasibətlərin

$$\begin{aligned}
 \hat{S}^2 \hat{S}_z - \hat{S}_z \hat{S}^2 &= 0 \\
 \hat{S}^2 &= \frac{3}{4} \hbar^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \hat{S}^2 \psi &= \hbar^2 S(S+1) \psi \\
 \hat{S}_z \psi &= \hbar S_z \psi, S = \frac{1}{2}, S_z = \pm \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{43.12}$$

olması belli olur. Buradan alınır ki, elektronunun spini $\frac{1}{2}$ olar və

bu qiymət Stern-Herlak ilə Eynşteyin-de Gaas təcrübəsindəki nəticələri təsdiq edir.

§44. Spin funksiyası. Pauli tənliyi

Mə'lumdur ki, sistemin spin halı iki funksiya ilə xarakterizə olunur, Spin operatoru \hat{S}^2 və S_z -nin məxsusi qiymətləri $\pm \frac{\hbar}{2}$ olandakı hallara uyğun gəlir. Əgər spin $\frac{\hbar}{2}$ -dirsə, dalğa funksiyası

$$\psi_1 = \psi\left(\vec{r}, t, \frac{\hbar}{2}\right)$$

spini $-\frac{\hbar}{2}$ olanda isə dalğa funksiyası

$$\psi_2 = \psi\left(\vec{r}, t, -\frac{\hbar}{2}\right)$$

olur. Onda spini müəyyən edən $\varphi_s(S_z)$ funksiyası daxil edilsə, sistemin halı

$$\psi(\vec{r}, t, S_z) = \psi(\vec{r}, t) \varphi_s(S_z) \quad (44.1)$$

funksiyası ilə xarakterizə olunur. Onda $\psi_1\left(\vec{r}, t, \frac{\hbar}{2}\right)$ hal funksiyası

$S_z = \frac{\hbar}{2}$ halını

$$\psi(\vec{r}, t, S_z) = \psi_1\left(\vec{r}, t, \frac{\hbar}{2}\right)$$

funksiyası isə spininin z-oxu boyunca proeksiyasının $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ olmasını göstərir. Uyğun olaraq zərəcəyin spin hallarını müəyyən edən spin funksiyaları

$$\begin{aligned} \varphi_s(S_z) = \varphi_{\frac{\hbar}{2}}\left(\frac{\hbar}{2}\right) = 1, \varphi_s(S_z) = \varphi_{\frac{\hbar}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 0 \\ \varphi_s(S_z) = \varphi_{-\frac{\hbar}{2}}\left(\frac{\hbar}{2}\right) = 0, \varphi_s(S_z) = \varphi_{-\frac{\hbar}{2}}\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = 1 \end{aligned} \quad (44.2)$$

(44.2) şəklində yazılan funksiya, Spin S_z , başqa mexaniki kəmiyyət kimi dinamik dəyişən xarakteri daşıyır. Burada olan $\varphi_s(S_z)$ spin funksiyası (44.2)-ə görə ortonormallanan funksiya, yəni

$$\sum_{S_z} \varphi_s^* \varphi_s(S_z) = \delta_{s's} \quad (44.3)$$

olar. Əgər fəza və spin koordinatlarından asılı olan operatorlar varsa (məsələ \hat{p} və $\vec{\sigma}$ kimi) ki:

$$Q = \hat{Q}_p \hat{Q}_s$$

bu operatorların (44.1)-ə təsiri

$$\hat{Q} \psi(\vec{r}, t, S_z) = \hat{Q}_p \psi(\vec{r}, t) \hat{Q}_s \varphi_s(S_z)$$

şəklində yazılmalıdı, \hat{Q}_p operatoru dalğa funksiyasının fəza koordinatlarından asılı hissəsinə, \hat{Q}_s isə spin funksiyasına təsir edir.

Spin dəyişəni ilk dəfə Pauli tənliyi adlanan tənlikdə nəzərə alınmışdı. Bu tənliyi almaq üçün elektromaqnit sahəsində hərəkət edən zərrəciyin Hamilton operatoruna, xarici maqnit sahəsinin intensivliyi ilə məxsusi maqnit momentinin

$$\vec{\mu}_s = -\frac{e}{mc} \vec{S}$$

qarşılıqlı təsirini nəzərə alaraq, yəni

$$\Delta U = -\vec{\mu}_s \vec{B}$$

bu təsirin potensial enerjisi olar və Hamilton operatorunu

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - e\varphi + U + \Delta U$$

yazariq

$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ spin operatoru olduğunu nəzərə almaqla

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - e\varphi + U + \frac{e\hbar}{2mc} (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z)$$

yaza bilərik. Əgər dalğa funksiyasını

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

şəklində qəbul etsək, bu funksiya aşağıdakı tənliyi ödəyən funksiya olar:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m} \left(\hat{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - e\varphi \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + U \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + \frac{e\hbar}{2mc} (\vec{\sigma} \vec{B}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (44.4)$$

Bu tənliyə Pauli tənliyi deyilir. (44.4) tənliyində $\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ spin matrisləri (44.3) ifadəsindəki matrislərdi (43.3) tənliyini

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_o \psi + \mu_b (\vec{\sigma} \vec{B}) \psi \quad (44.5)$$

şəklində də yazı bilərik. Burada \hat{H}_o , operatoru $\vec{\sigma}$ matrisləri olmayan Hamilton operatorudur və

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 & 0 \\ \psi_2 & 0 \end{pmatrix}, \mu_b = \frac{e\hbar}{2mc}$$

Bu tənliyin öz-özünə qoşması

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^+}{\partial t} = \hat{H}_o^+ \psi^+ + \mu_b (\vec{\sigma} \vec{B})^+ \psi^+ \quad (44.6)$$

$$(\vec{\sigma} \vec{B})^+ \psi^+ = \psi^+ (\vec{\sigma} \vec{B})^+$$

olduğuna görə (44.6)-i soldan ψ^+ - (44.6)-ni isə sağdan ψ vurub tərəf-tərəfə çıxsaq

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^+ \psi) = \psi^+ (\hat{H}_o \psi) - (\hat{H}_o \psi)^+ \psi + (\psi^+ (\vec{\sigma} \vec{B}) \psi - \psi (\vec{\sigma} \vec{B})^+ \psi^+) \mu_b$$

alırıq. Buradan kəsilməzlik tənliyini

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (44.7)$$

əldə edərik. Bu ifadədəki W ehtimal sıxlığı və \vec{j} cərəyanın ehtimal sıxlığı

$$W = \psi^+ \psi = (\psi_1^* \psi_2^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (44.8)$$

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \vec{\nabla} \psi^+ - \psi^+ \vec{\nabla} \psi) + \frac{e}{mc} \vec{A} \psi^+ \psi \quad \psi^+ = (\psi_1^* \psi_2^*)$$

Pauli tənliyində ehtimal sıxlığı və cərəyanın ehtimal sıxlığı olurlar. Xüsusi halda maqnit sahəsini z - oxu boyunca yönəltəndə Pauli tənliyini stasionar halda

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (44.9)$$

$$\hat{H}_o = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r)$$

yazırıq (H^2 olan həddi emal etsək) onda tənlik

$$\hat{H}_o \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + \hbar \sigma_z) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

olduğuna görə burada iki tənlik

$$\hat{H}_o \psi_1 + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + \hbar) \psi_1 = e \psi_1$$

$$\hat{H}_o \psi_2 + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z - \hbar) \psi_2 = e \psi_2$$

$$\begin{pmatrix} E - \mu_o B m - \mu_o B - \frac{p^2}{2m} \end{pmatrix} \psi_1 = 0$$

$$\begin{pmatrix} E - \mu_o B m + \mu_o B - \frac{p^2}{2m} \end{pmatrix} \psi_2 = 0 \quad (44.10)$$

şəklində yazılar. Birinci tənlik və ψ_1 , spini $S_z = \frac{\hbar}{2}$ olan halını, ikinci

ci tənlik və ψ_2 spini $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ halını təyin edən tənliklər olurlar.

Beləliklə, zərrəciyin spin halını maqnit sahəsində araşdırmaq üçün Pauli tənliyinin özəlliklərini müəyyən etmək olur.

$\mu_0 mB$ və $\pm \mu_0 B$ enerjiləri uyğun olaraq orbital və spin momentlərin maqnit sahəsilə qarşılıqlı təsirini xarakterizə etmiş olur.

§45. Simmetrik və antisimmetrik hal funksiyaları. Pauli prinsipi.

Eyni zərrəciklərdən təşkil olunmuş sistemin kvant mexanik xassələrini müəyyən qanunauyğunluqla aşkar olur. Kütləsi $-m$, yükü $-e$, spini s və s eyni olan və hər hansı xarici təsirdə eyni cürə özünü aparan zərrəciklər eyni zərrəciklər adlanır. Onların özəlliyi müxtəlif zərrəciklərin xassələrindən fərqli olur. Eyni zərrəciklər sisteminin Hamilton operatoru

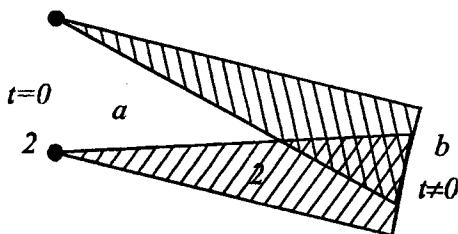
$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \sum_{k=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 + U(q_k, t) \right] + \sum_{k \pm j=1}^N W(q_k, q_j) \quad (45.1)$$

şəklində olar. Burada U potensialı və W qarşılıqlı təsiri eyni kütlə, yük, spin və s eyni cürə qəbul olunur. Göründüyü kimi « k » ilə « j » zərrəciklərin yerini dəyişdikdə H dəyişmir.

$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, N, t) \quad (45.2)$$

Yəni eyni zərrəciklər sisteminin Hamilton operatoru zərrəciklərin yerdəyişiminə görə invariant olur, istənilən zərrəcik cütünün yerini dəyişdikdə Hamilton operatoru dəyişməz qalır. Bu invariantlıq göstərir ki, eyni zərrəciklər sistemində elə hallar realizə olur ki, zərrəciklərin yerini dəyişdikdə sistemin hali dəyişmir. Yəni, ölçü zamanı hər hansı fiziki kəmiyyətin qiyməti eyni zərrəciklərin yerini dəyişəndə dəyişməz qalır. Buna kvant mexanikasında eynilik prinsipi deyilir.

Fərz edək ki, iki zərrəcikli sistemimiz var və $t=0$ anında 1-ci və 2-ci zərrəcik a halında olarsa, $t \neq 0$ anında şəkil II.16 A-da olduğu kimi simvolik olaraq göstərmək olar. $t \neq 0$ anında « b » vəziyyətində həm 1-ci, həm də 2-ci zərrəcik olar, hansı zərrəciyin bu halda olmasını söyləmək mümkün deyildi. Eynilik prinsipinə görə



Şəkil II.15. İki zərrəciyin halı

«b» halında eyni zamanda 1 və 2 zərrəciyin olması ehtimalı yararır. Əgər zərrəciklərin yerdəyişmə operatorunu \hat{Q}_{kj} ilə işarə etsək, bunu

$$\hat{Q}_{kj}\psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \psi'(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) \quad (45.3)$$

kimi yazarıq. Bu operatorun məxsusi qiymətini tapmaq üçün $\psi'(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) = k\psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ yazaq və

$$\hat{Q}_{kj}\psi = k\psi \quad (45.4)$$

(ψ çoxlu sayda zərrəciklərin koordinatından q_1, q_2, \dots, q_N, t asılıdır.) tənliyindən, onun məxsusi qiymətini aşkar edə bilərik. k ədədi məxsusi qiymətdir. (45.4) ifadəsinin hər iki tərəfini soldan \hat{Q}_{kj} operatoruna vursaq

$$\hat{Q}_{kj}^2\psi = k\hat{Q}_{kj}\psi = k\psi' = k^2\psi \quad (45.5)$$

alırıq. Bu ifadəni

$$\hat{Q}_{kj}^2\psi = \hat{Q}_{kj}\psi' = \psi \quad (45.6)$$

kimi yazı bilərik. (45.5) ilə (45.6)-nı müqayisə etsək

$$\psi = k^2\psi$$

olduğu aşkar olar və buradan

$$k^2 = 1, k = \pm 1 \quad (45.7)$$

taparıq. Yəni, yerdəyişmə operatorunun təsiri

$$\hat{Q}_{kj}\psi = \psi \quad (45.8)$$

$$\hat{Q}_{kj}\psi = -\psi$$

verir. Əgər $\hat{Q}_{ij}\psi = \psi$ olursa, ψ funksiya simmetrik funksiya adlanır.

$$\hat{Q}_{ij}\psi = \psi_s \quad (45.9)$$

Əgər $\hat{Q}_{ij}\psi = -\psi$ olursa, ψ funksiya antisimmetrik funksiya adlanır.

$$\hat{Q}_{ij}\psi = -\psi = \psi_a \quad (45.10)$$

Simmetrik dalğa funksiya ilə xarakterizə olunan zərrəciklərə bozonlar deyilir və onların spini \hbar vahidlərində tam dəyərlər alır:

$$0 \hbar, 1 \hbar, 2 \hbar, \dots \text{ (foton, pionlar və s.)}$$

Antisimmetrik dalğa funksiya ilə xarakterizə olunan zərrəciklərə fermionlar deyilir və onların spini \hbar vahidlərində kəsir dəyərlər alır:

$$1/2 \hbar, 3/2 \hbar, 5/2 \hbar, \dots \text{ (elektron, proton və s.)}$$

Bozonlar Boze-Eynşteyn, fermionlar isə Fermi-Dirak statistikasına tabe olan zərrəciklərdi. Fermionlar üçün Pauli prinsipi adlanan bir prinsip mövcuddur. Bu prinsipə görə hər hansı kvant halında birdən çox zərrəcik ola bilməz. Superpozisiya prinsipindəki əmsalları üçün

$$a(k_1, k_2) = \int \psi_{k_1}^*(1) \psi_{k_2}(1) dV_1$$

$$a(k_2, k_2) = \int \psi_{k_1}^*(2) \psi_{k_2}(2) dV_2$$

inteqralları olduğuna görə

$$\psi(1,2,t) = \sum_{k_1} \sum_{k_2} a(k_1, k_2, t) \psi_{k_1}(1) \psi_{k_2}(2) \quad (45.11)$$

ifadəsindən

$$a(k_1, k_2, t) = \int \int \psi_{k_1}^*(1) \psi_{k_2}(2) \psi(1,2,t) dV_1 dV_2$$

yaza bilərik. Kvant mexanikasının III postulatına görə

$$W(k_1, k_2, t) = |a(k_1, k_2, t)|^2 \quad (45.12)$$

olduğu üçün 1-ci zərrəciklə 2-ci zərrəciyin yerini dəyişsək

$$\psi(2,1,t) = \sum_{k_2} \sum_{k_1} a(k_1, k_2, t) \psi_{k_1}(2) \psi_{k_2}(1) \quad (45.13)$$

syazarıq. Fermionlar üçün (45.12) və (45.13) əks işarə ilə bir-birinə bərabər olar, onda da

$$\psi(1,2,t) = -\psi(2,1,t)$$

$$\sum_{k_2} \sum_{k_1} a(k_1, k_2, t) \psi_{k_1}(2) \psi_{k_2}(1) = - \sum_{k_2} \sum_{k_1} a(k_1, k_2, t) \psi_{k_1}(1) \psi_{k_2}(2)$$

yaza bilərik. k_1 ilə k_2 -nin yerini dəyişsək

$$\sum \sum a(k_2, k_1, t) \psi_{k_2}(2) \psi_{k_1}(1) = - \sum \sum a(k_1, k_2, t) \psi_{k_1}(1) \psi_{k_2}(2)$$

Buradan

$$a(k_2, k_1, t) = a(k_1, k_2, t)$$

alınar. Burada əgər $k_1 = k_2 = k$ eyni hal olursa

$$a(k, k, t) = a(k, k, t) = 0 \quad (45.15)$$

əldə edərik. Yəni, iki zərrəciyin eyni halda olma ehtimalını təyin edən $a(k, k, t)$ əmsali sıfır olacaqdır

$$W = |a(k, k, t)|^2 = 0 \quad (45.16)$$

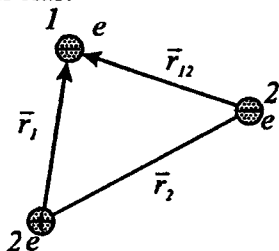
Beləliklə, iki zərrəciyin eyni halda olma ehtimalı sıfır olur. Bu Pauli prinsipi olub, bütün fermionlar üçün yararlı bir prinsipdir. (elektron, proton, neytron və s. belə zərrəciklərdi)

Fermionların sayı ikidən çox olarsa, yenə də eyni bir halda olma ehtimalı sıfır olar.

§46. Helium atomunun enerji səviyyələri.

Para, ortohelium halları

Hidrojen atomundan sonra nüvə ətrafında hərəkət edən iki elektronlu sistem olaraq, helium He atomunu göstərmək olar. Bu atomun xassələrinin araşdırılmasında mühüm rolunu elektronların spin halları oynayır. Helium atomunu sxematik olaraq şəkil 1.16-dəki kimi təsvir etmək olar.



Şəkil I.16. Helium atomunun sxemi.

Helium atomu üçün Schrödinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}, t) \quad (46.1)$$

şəklində yazıla bilər. Burada

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}, t)$$

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} + W \quad (46.2)$$

$$r_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}, r_2 = \sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2}, r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$$

W potensiyalı mümkün olan bütün qarşılıqlı təsirlərin potensiyal enerjisidir. Burada yalnız, Kulon təsirini nəzərə aldığımız üçün $W=0$ götürək. Yəni tənliyi

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, S_{1z}, S_{2z}) \quad (46.3)$$

yazarıq, burada \vec{r}_1, S_{1z} , 1-ci elektronun, \vec{r}_2, S_{2z} isə ikinci elektronun dəyişənləridir. Əgər

$$\hat{H}(1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1}$$

$$\hat{H}(2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} \quad (46.4)$$

$$V(1,2) = \frac{e^2}{r_{12}}, (\vec{r}_1, S_{1z}) \equiv 1, (\vec{r}_2, S_{2z}) \equiv 2$$

işarələri qəbul etsək,

$$[\hat{H}(1) + \hat{H}(2) + V(1,2)] \psi(1,2) = E \psi(1,2) \quad (46.5)$$

tənliyini yazı bilərik. Elektronlar arasında Coulomb təsirini nəzərə almasaq $V(1,2)=0$ olar, onda (46.4) tənliyinin həlli

$$\psi(1,2) = \psi_k(1) \psi_{k'}(2) \quad (46.5^1)$$

yaza bilərik. Burada $\psi_k(1)$

$$\hat{H}(1) \psi_k(1) = E_k \psi_k(1)$$

tənliyinin həllidir. $\psi_k(2)$ isə

$$\hat{H}(2)\psi_k(2) = E_k\psi_k(2)$$

tənliyinin həllidir. Onda bu halda heliumunun enerjisi

$$E_{He}^o = E_k + E_{k'} = -\frac{2me^4}{\hbar^2} \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{k'^2} \right) = -4R_r\hbar \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{k'^2} \right) \quad (46.6)$$

olar. Eyni zamanda $\psi(2,1) = \psi_{k'}(1)\psi_k(2)$ funksiyasında (46.6) enerji qiymətini xarakterizə edər. Yəni bu hal ikiqat cırlaşmış hal olar.

Lakin $V(1,2) = \frac{e^2}{r_{12}}$ -ni nəzərə alsaq, bu cırlaşma aradan qalxar. Fəza koordinatları ilə spin koordinatları bir-birindən asılı olmadığına

görə $V(1,2) = \frac{e^2}{r_{12}}$ olduqda iki elektronlu dalğa funksiyasını

$$\psi(\vec{r}_1\vec{r}_2S_{1z}S_{2z}) = \phi(\vec{r}_1\vec{r}_2)\varphi(S_{1z}S_{2z}) \quad (46.7)$$

fəza və spin funksiyalarının hasili kimi yaza bilərik. Elektronlar Pauli prinsipinə tabe olan zərrəciklər olduğuna görə (46.7) funksiyası antisimmetrik funksiya olmalıdır. Bunun üçün iki hal mümkündür. Bu zaman ya fəza funksiyası $\phi(r_1r_2)$ simmetrik, spin funksiyası $\varphi(S_{1z}S_{2z})$ antisimmetrik, ya da $\phi(r_1r_2)$ funksiyası antisimmetrik, $\varphi(S_{1z}S_{2z})$ isə simmetrik olmalıdır. Onda He atomunun mümkün olan halını iki funksiya ilə göstərmək olar

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \phi_s(\vec{r}_1\vec{r}_2)\varphi_a(S_{1z}S_{2z}) \\ \psi_2 &= \phi_a(r_1r_2)\varphi_s(S_{1z}S_{2z}) \end{aligned} \quad (46.8)$$

burada «s» indeksi simmetrikliyi, «a» isə antisimmetrikliyi göstərir. $\psi_k(\vec{r}_1)\psi_{k'}(\vec{r}_2)$ funksiyalarından üç dənə simmetrik və bir dənə də antisimmetrik funksiya təşkil etmək olar:

$$\begin{aligned} \phi_s(\vec{r}_1\vec{r}_2) &= \psi_k(\vec{r}_1)\psi_{k'}(\vec{r}_2) \\ \phi_s(\vec{r}_1\vec{r}_2) &= \psi_{k'}(\vec{r}_1)\psi_k(\vec{r}_2) \end{aligned} \quad (46.9)$$

$$\phi_s(\vec{r}_1\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1)\psi_{k'}(\vec{r}_2) + \psi_{k'}(\vec{r}_1)\psi_k(\vec{r}_2)]$$

$$\phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1)\psi_k(\vec{r}_2) - \psi_k(\vec{r}_1)\psi_k(\vec{r}_2)]$$

Eyni qayda ilə spin funksiyası $\varphi(S_{1z}, S_{2z})$ üçün də üç dənə simmetrik, bir dənə də antisimmetrik funksiya quraşdırmaq olar:

$$\varphi_{sim}(S_{1z}, S_{2z}) = \varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{1/2}(S_{2z}),$$

$$\varphi_{sim}(S_{1z}, S_{2z}) = \varphi_{-1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}),$$

$$\varphi_{sim}(S_{1z}, S_{2z}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}) + \varphi_{-1/2}(S_{2z})\varphi_{1/2}(S_{2z})] \quad (46.10)$$

$$\varphi_{ansim}(S_{1z}, S_{2z}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}) - \varphi_{-1/2}(S_{2z})\varphi_{1/2}(S_{2z})]$$

Bu spin funksiyaları $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$ və \hat{S}^2 operatorlarının məxsusi funksiyalar olub, \hbar , 0 , \hbar və $2\hbar^2$, $2\hbar^2$, $2\hbar^2$ məxsusi qiymətləri xarakterizə edirlər. Simmetrik spin funksiyaları iki elektronun spini $S=1$ halını müəyyən edir. Burada üç hal ola bilər: hər iki elektronun spini OZ oxuna paralel ($S_z=1$), antiparalel ($S_z=-1$) və OZ oxuna perpendikulyardır ($S_z=0$). Yə'ni, bu hallar üçlük halı ($S=1$ triplet halı) və birlik halı ($S=0$ singlet halı) adlanır.

Deməli, toplam spin vahid olanda, spin funksiyası simmetrik funksiya olub, triplet (üçlük) halı, spini sıfır olanda isə spin funksiyası, antisimmetrik funksiya olub, singlet (təklilik) halı göstərir.

Helium atomunun triplet halı ortohelium, singlet halı isə parahelium adlanır. Orthohelium atomu, simmetrik spin funksiyası ilə (φ_{sim}), parahelium atomu isə antisimmetrik spin funksiyası ilə (φ_{ans}) xarakterizə olunur. Orthohelium atomunun spin funksiyası (46.10)-a görə

$$\varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{1/2}(S_{2z})$$

$$\varphi_{-1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z})$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}) + \varphi_{-1/2}(S_{1z})\varphi_{1/2}(S_{2z})]$$

üç funksiya, parahelium atomunun spin funksiyasına isə bir dənə

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}) - \varphi_{-1/2}(S_{1z})\varphi_{1/2}(S_{2z})]$$

funksiyası uyğun gəlir.

İndi isə fəza fəzadına bağlı fəza funksiyasını araşdıraraq. Əgər (46.7) funksiyasının fəzadan asılı hissəsi (46.9) kimi simmetrik $\phi_s(r_1 r_2)$ və antisimmetrik funksiyadan oluşan funksiyalar olduğu üçün (46.9) funksiyalar Schrödinger tənliyinin həlli olacaqdır. Bellidir ki, bu tənlik

$$\left[\hat{H}_o(r_1 r_2) + \frac{e^2}{r_{12}} \right] \phi_s(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = E \phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2) \quad (46.11)$$

şəklində olur. Burada

$$\hat{H}_o(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} \quad (46.12)$$

Təməl hal kimi $V(1,2)=0$ olan halı qəbul etsək

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_2} \right] \phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = E^o \phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2) \quad (46.13)$$

tənliyinin həlli

$$\psi^{(o)} = \psi_k(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2)$$

və ya

$$\psi^{(o)} = \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2)$$

olurlar. Bu həllərin uyğun olaraq enerjisi

$$E^{(o)} = E_k^o + E_{k'}^o \quad (46.14)$$

Həyacanlaşma nəzəriyyəsinə görə He atomunun halı ikiqat cırlaşmış hal olar. Buna görə də dalğa funksiyasını

$$\phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = \sum_{i=1}^2 b_i \psi_i^{(o)} = b_1 \psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) + b_2 \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2) \quad (46.15)$$

cırlaşmış halın dalğa funksiyalarının toplama kimi götürək. Cırlaşma olanda həyacanlaşma nəzəriyyəsində enerjiyə olan birinci tərtib əlavə və dalğa funksiyasına olan sıfırıncı tərtib əlavə

$$\sum_k (V_{kk'} - E^{(1)} \delta_{kk'}) b_k = 0 \quad (46.16)$$

tənliyindən tapılır. (46.16) tənliyində iki tənlik var:

$$\left. \begin{aligned} (V_{11} - E^{(1)})b_1 + V_{12}b_2 &= 0 \\ V_{21}b_1 + (V_{22} - E^{(1)})b_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (46.17)$$

Burada

$$\begin{aligned} V_{11} &= e^2 \iint \psi_k^*(\vec{r}_1) \psi_{k'}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \\ V_{22} &= e^2 \iint \psi_{k'}^*(\vec{r}_1) \psi_k^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \\ V_{12} &= e^2 \iint \psi_k^*(\vec{r}_1) \psi_{k'}^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \\ V_{21} &= e^2 \iint \psi_{k'}^*(\vec{r}_1) \psi_k^*(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) dV_1 dV_2 \end{aligned} \quad (46.18)$$

qarşılıqlı təsir inteqrallarıdır. Bunları uyğun olaraq

$$\begin{aligned} V_{11} = V_{22} &\equiv K = e^2 \iint |\psi_k(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{k'}(\vec{r}_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{r_{12}} = \\ &e^2 \iint |\psi_{k'}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_k(\vec{r}_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{r_{12}} \\ V_{12} = V_{21} &= e^2 \iint |\psi_{kk'}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{kk'}(\vec{r}_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{r_{12}} = \\ &e^2 \iint |\psi_{kk}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{kk'}(\vec{r}_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{r_{12}} \equiv A \end{aligned} \quad (46.19)$$

$$r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$$

işarələri ilə göstərmək olar. K-ya Kulon təsir enerjisi, A-ya mübadilə enerjisi deyilir. K inteqralında 1-ci elektron k halında, 2-ci elektron isə k' halında və ya 1-ci elektron k' halında, 2-ci elektron k halında olur. Lakin A inteqralında 1-ci elektron eyni anda həm k və həm də k' halında, 2-ci elektron da eyni anda həm k' , həm də k halında olur. Yəni, 1-ci və 2-ci elektron k ilə k' halları arasında mübadilə edir. Əgər

$$\begin{aligned}
e|\psi_k(1)|^2 &= \rho_{1k}, e|\psi_{k'}(1)|^2 = \rho_{1k'} \\
e|\psi_{k'}(2)|^2 &= \rho_{2k'}, e|\psi_k(2)|^2 = \rho_{2k} \\
e|\psi_{kk'}(1)|^2 &= \rho_{1kk'}, e|\psi_{kk'}(2)|^2 = \rho_{2kk'}
\end{aligned} \tag{46.20}$$

işarələri qəbul etsək, ρ_{1k} 1-ci elektronun yükünün k halında sıxlığını, $\rho_{2k'}$ 2-ci elektronun k' halında sıxlığını, $\rho_{1k'}$ 1-ci elektronun k' halında yük sıxlığını, ψ_{2k}^2 2-ci elektronun k halında yük sıxlığını, $\rho_{1kk'}^{(i)}$ 1-ci elektronun eyni andakı k və k' halında yük sıxlığını göstərir.

Deməli, 1 və 2-ci elektronun k , k' və k' k hallarında yükünün sıxlığı Coulomb və mübadilə enerjilərini təyin edir. (46.19)-dan

$$\begin{aligned}
K &= \iint \frac{\rho_{1k}^{(1)} \rho_{2k'}^{(2)}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_1 dV_2 = \iint \frac{\rho_{1k'}^{(1)} \rho_{2k}^{(2)}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_1 dV_2 \\
A &= \iint \frac{\rho_{1kk'}^{(1)} \rho_{2kk'}^{(2)}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_1 dV_2 = \iint \frac{\rho_{1k'k}^{(1)} \rho_{2kk'}^{(2)}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dV_1 dV_2
\end{aligned} \tag{46.21}$$

K və A -nı yaza bilərik. (46.21)-i nəzərə alsaq, (46.17) sistemi

$$\left. \begin{aligned}
(K - E^{(1)})b_1 + Ab_2 &= 0 \\
Ab_1 + (K - E^{(1)})b_2 &= 0
\end{aligned} \right\} \tag{46.22}$$

yazılar. (46.22) tənliklər sistemin birgə həlli olması üçün əmsallardan qurulan determinant sıfır olmalıdır:

$$\left\| \begin{array}{cc}
K - E^{(1)} & A \\
A & K - E^{(1)}
\end{array} \right\| = 0 \tag{46.23}$$

buradan

$$(K - E^{(1)})^2 - A^2 = 0$$

olar və

$$E_1^{(1)} = K + A, E_2^{(1)} = K - A \tag{46.24}$$

$E^{(1)}$ -lər üçün iki qiymət almış olarıq. Onda He atomunun enerjisi də (46.14) ilə birlikdə (46.24)-dəki enerji qiymətləri nəzərə alınmalıdır.

Buradan He atomunun enerjisi iki qiymət alar və bular yalnız mübadilə enerjisi ilə fərqlənir.

$$\begin{aligned} E_1 &= E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K + A \\ E_2 &= E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K - A \end{aligned} \quad (46.25)$$

Mübadilə enerjisinin mə'nasını anlamaq üçün k və k' hallarına fiksə olunmuş hallar kimi baxaq. Simmetrik və antisimmetrik fəza funksiyaları stasionar halda

$$\begin{aligned} \phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) + \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2)] e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K + A)t} \\ \phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) - \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2)] e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K - A)t} \end{aligned}$$

şəklində olar. Əgər

$$\omega_o = \frac{E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K}{\hbar}, \delta = \frac{A}{\hbar}$$

əvəzləmələri qəbul etsək, eyni anda He atomunun orto və para helium hallarında dalğa funksiyası (45.25)-ə görə

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + \phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)] = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \{ [\psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) + \\ &+ \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2)] e^{-i\omega_o t} e^{-i\delta t} + [\psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) - \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2)] e^{-i\omega_o t} e^{i\delta t} \} = \\ &= e^{-i\omega_o t} \frac{1}{2} \left[\psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) (e^{i\delta t} + e^{-i\delta t}) + \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2) \frac{e^{i\delta t} - e^{-i\delta t}}{i} \right] \end{aligned}$$

yazılar və ya

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = C_1(t) \psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) + C_2(t) \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2) \quad (46.26)$$

şəklində təsvir edə bilərik. Burada

$$\begin{aligned} C_1(t) &= e^{-i\omega_o t} \cos \delta t \\ C_2(t) &= i e^{-i\omega_o t} \sin \delta t \end{aligned} \quad (46.27)$$

Buradan $|C_1(t)|^2$ 1-ci elektronun k , 2-ci elektronun k' halında olma ehtimalını, $|C_2(t)|^2$ isə 1-ci elektronun k' halında, 2-ci elektronun k halında olma ehtimalını göstərir

$$|C_1(t)|^2 = \cos^2 \delta t \quad (46.28)$$

$$|C_2(t)|^2 = \sin^2 \delta t$$

(46.28)-ə görə $t=0$ olanda 1-ci elektron k' halında, 2-ci elektronun k' halında olmasını göstərir. $\tau = \frac{\pi}{2\delta}$ zamanı keçdikdən sonra

$$|C_1(t)|^2 = 0, |C_2(t)|^2 = 1$$

olur. Yəni, 1-ci elektron k' halında, 2-ci elektronun k halında olar τ zamanı $|C_1(t)|^2 = 0, |C_2(t)|^2 = 1$ olduğu üçün

$$\tau = \frac{\pi \hbar}{2A} \quad (46.29)$$

mübadilə zamanı mübadilə enerjisinin tərs qiyməti ilə mütənəsib olur. Əgər k və k' halları fəzanın müxtəlif yerlərində olursa, mübadilə enerjisi azalır və $\rho_{kk'}$ ehtimal sıxlığı çox az olar. Bu halda mübadilə enerjisi sifıra yaxınlaşır.

(46.29) ifadəsinə mübadilə zamanı deyilir.

(46.22)-də $E_1^{(1)} = K + A$ nəzərə alsaq

$$b_1 = b_2 \quad (46.30)$$

olur. Əgər $E_2^{(1)} = K - A$ nəzərə alsaq

$$b_1 = -b_2 \quad (46.31)$$

olar. Normalama şərtinə görə

$$|b_1|^2 + |b_2|^2 = 1$$

olduğu üçün (46.25) və (46.27)-yə görə

$$|b_1| = |b_2| = b$$

olar ki, $|b_1|^2 + |b_2|^2 = 1$ olmasından asılı olaraq

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (46.32)$$

alınar. (46.30) nəzərə alsaq, (46.15)-ə görə

$$\phi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1) \psi_{k'}(\vec{r}_2) + \psi_{k'}(\vec{r}_1) \psi_k(\vec{r}_2)] \quad (46.33)$$

alınar və enerji dəyəri isə

$$E_s = E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K + A$$

olar (46.31)-i nəzərə alsaq, (46.15)-ə görə

$$\phi_a(\vec{r}_1\vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1)\psi_{k'}(\vec{r}_2) - \psi_{k'}(\vec{r}_1)\psi_k(\vec{r}_2)] \quad (46.34)$$

alınar və enerji dəyəri isə

$$E_A = E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K - A$$

olar. Fəza funksiyası simmetrik olduğu üçün spin funksiyası antisimmetrik olub, (46.10)-nün dördüncüsü olar. Yəni, helium atomunun parahelium halı olar ($S = 0$)

$$\begin{aligned} \phi_s(\vec{r}_1\vec{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1)\psi_{k'}(\vec{r}_2) + \psi_{k'}(\vec{r}_1)\psi_k(\vec{r}_2)] \\ \varphi_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}) - \varphi_{-1/2}(S_{1z})\varphi_{1/2}(S_{2z})] \end{aligned} \quad (46.35)$$

Bu halın enerjisi

$$E_s = E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K + A$$

Fəza funksiyası antisimmetrik olduğu zaman, spin funksiyası simmetrik olub, (46.10)-un birinci üç funksiyası olar. Yəni, helium atomunun ortohelium halı ($S=1$)

$$\begin{aligned} \phi_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_k(\vec{r}_1)\psi_{k'}(\vec{r}_2) - \psi_{k'}(\vec{r}_1)\psi_k(\vec{r}_2)] \\ \varphi_s &= \varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{1/2}(S_{2z}) \\ \varphi_s &= \varphi_{-1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}) \\ \varphi_s &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{1/2}(S_{1z})\varphi_{-1/2}(S_{2z}) + \varphi_{-1/2}(S_{1z})\varphi_{1/2}(S_{2z})] \end{aligned} \quad (46.36)$$

Bu halın enerjisi

$$E_s = E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K - A$$

Beləliklə, paraheliumun enerjisi və dalğa funksiyası

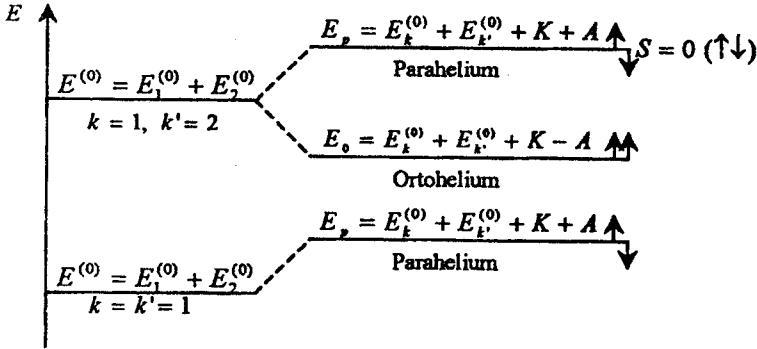
$$\begin{aligned} E_s &= E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K + A \\ \psi(\vec{r}_1\vec{r}_2 S_{1z} S_{2z}) &= \phi_s(\vec{r}_1\vec{r}_2) \varphi_a(S_{1z} S_{2z}) \end{aligned} \quad (46.37)$$

ortoheliumun enerjisi və dalğa funksiyası

$$E_a = E_k^{(o)} + E_{k'}^{(o)} + K - A \quad (46.38)$$

$$\psi(\vec{r}_1 \vec{r}_2 S_{1z} S_{2z}) = \phi_a(\vec{r}_1 \vec{r}_2) \varphi_s(S_{1z} S_{2z})$$

olur. Parahelium və ortohelium halları şəkil I.17-də göstərilən kimi enerji dioqramında göstərmək olar.



Şəkil I.17. Parahelium və ortohelium atomunun sxemi.

Göründüyü kimi helium atomunun ən aşağı səviyyəsi parahelium atomudur, yəni, helium atomunda elektronların spinlərə antiparalel olurlar və bu hal paralelinin halıdır.

§47. Elementlərin periodik sistemi

Elementlərin periodik qanunauyğunluğu elektron sisteminin nüvənin Kulon sahəsində hərəkəti ilə bağlıdır. Pauli prinsipinə əsaslanaraq elektronun mərkəzi qüvvə sahəsində hərəkətinin nəzəriyyəsi elektronların atomlarda paylanması və buna uyğun olaraq kimyəvi xassələrin periodikliyi təyin etmək olar. Elektronların elementlərdə paylanması belə qayda üzrə olur ki, hər bir yeni gələn element əvvəlki elementdən bir protonla fərqlənir. Məsələn, hidrogen atomunda bir proton, heliumda iki proton, litiumda üç proton və s. olur. Atom nüvəsində Z sayda proton, N sayda neytron olur, ona görə də atomdakı elektronların sayı da Z qədər olur. Yəni, hər bir kimyəvi elementdən sonra gələn elementin elektronların sayı bir artıq olur.

$$\text{Atom}(Z) \rightarrow \text{Atom}(Z+1)$$

Elektronlar arasında qarşılıqlı təsiri nəzərə almasaq, elektronlarla Ze nüvəsi arasında Kulon sahəsi nəticəsində

$$V = -\frac{Ze^2}{r}$$

Kulon potensialı mövcuddur. Protonların sayı Z, neytronların sayı N, elektronların sayı Z olduğu üçün atomu ${}_Z^AX$ kimi təsvir edə bilərik. Atomların valentliyi atomun spininin ikiye vurulması ilə alınır: $V=2S$. Yeni atomun valentliyi =2 spin olduğu üçün, misal olaraq bezi elementlərin valentliyi belədir:

Element	H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
Spin	1/2	0	1/2	0	1/2	1/2	3/2	1	1/2	0
Valentlik	1	0	1	0	1	2	3	2	1	0

Bu atomların enerjisi

$$E_z = \sum_{k=1}^z \left(-\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n_k^2} \right), n_k = 1, 2, 3, \dots \quad (47.1)$$

olur və ən aşağı enerji səviyyəsi $n_1=n_2=\dots=n_z=1$ qiymətinə uyğun gələn səviyyədir. Normalaşan məxsusi funksiyası

$$\psi_z = \frac{1}{\sqrt{\pi} \sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}, a_0 = \frac{\hbar^2}{mZe^2} \quad (47.2)$$

şəklində ola bilər.

Bütün elementlərin fiziki və kimyəvi xassələri Z sıra nömrəsindən asılı olaraq, periodik dəyişir. Elementlərin periodik cədvəlində sol sütunda olan elementlərdə qələvi metallar olur, onlar az ionlaşma enerjisinə sahib olan hidrogen atomunun spektrinə bənzər spektrdə olurlar. Ondan sonra sağa doğru gələn sütunda böyük valentliyi olan metallar, sonra isə yarım metallar və daha sonra metal olmayan elementlər yerləşir. Ən sağ sütunda neytral elementlər yerləşir. Elementlərin təkrar xassələrinin periodu 2,8,8,18,18,32 olduqda təkrarlanması biruzə çıxır.

Sistemin enerjisi verilmiş n ədədi üçün $l=0, 1, \dots, n-1$, $m = -1, \dots, +1$, $S_z = \pm \frac{1}{2}$ qiymətlər aldıqda

$$E = \sum_{k=1}^z E_{n_k} \ell_k \quad (47.3)$$

olur. Bu sistemin dalğa funksiyası üçün

$$\psi_{nlmS_z} = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi)\varphi_s(S_z) \quad (47.4)$$

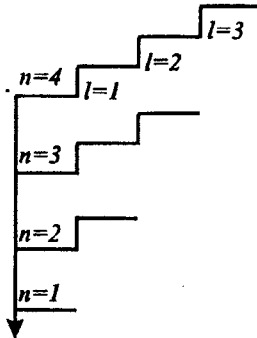
yazılmalıdır. Yəni, verilmiş Y_{nlmS_z} funksiyası üçün n halında

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} 2(2\ell + 1) = 2n^2 \quad (47.5)$$

elektronun halı uyğun gəlir. (46.5)-də $n=1,2,3,4$ yazırıqsa, 2,8,18,32 rəqəmləri alınır ki, bu da təcrübədə müəyyən edilmiş periodlardır. Əgər elektronlar arasında Coulomb təsirini nəzərə alsaq, çox elektronlu sistemin potensiyalı

$$V = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{Z(r)e^2}{r^2} \quad (46.6)$$

olaraq göstərilir. Burada $Z(r)(0 < Z(r) < Z-1)$ ekranlaşdırılmış (pərdələnmiş) elektronların sayıdır. $Z(r)$ -dəki r nüvədən elektrona qədər olan məsafədir. Böyük momentə malik olan məxsusi funksiyaların ekranlaşması (pərdəənməsi) çox olar, ona görə də atomların enerjisi n -lə birlikdə l -dən də asılı olar. Bu atomların enerjisi səviyyələri şəkil I.18-də göstərilmişdi.



Şəkil I.18. Böyük Z -li atomların səviyyəsi

Periodlar aşağıdakı kimi yaranırlar:

Birinci period. Ümumiyyətlə atomlar (n, l) kvant ədədləri ilə xarakterizə olunur. $(1, 0)$ halında ya bir və ya antiparalel spinli iki elektron ola bilər. Yəni, atom hidrogen və helium halında olur və helium atomunda bu period tamamlanır.

İkinci period. Litium atomunun üç elektrondan biri $n=2$ halında olur. İki elektronla təbəqə qapanır, $n=2$ səviyyəsində olan bir elektron litium atomunun fiziki və kimyəvi xassələrinin müəyyən edir. Onun üstündə olan hidrogen atomunun xassələrini daşıyır. Onun bir kənar elektronu çox asanlıqla atomdan xaricə çıxır. Litiumdan sonra gələn atomların təbəqələri tədricən dolur. Bundan sonra gələn atomlarda tədricən ikinci təbəqə dolur. Berilium atomunda 2 elektron $n=1$, $l=0$ halında 2 elektronda $n=2$, $l=0$ halında olar. Bor atomunda bir elektron $n=2$, $l=1$ halında olar. Sonra karbon atomunda 2, azot atomunda 3, oksigen atomunda 4, ftor atomunda 5 elektron qapanmamış təbəqədə olar və neon atomunda 6 elektron son təbəqədə olanda, təbəqə qapanar.

Üçüncü period. Bu periodda $n=3$ olan halda təbəqə qapanır. Təbəqələr natriumla dolmağa başlar. Özünü litium kimi aparır (qapanmış təbəqədə əlavə bir elektron olur). Sonrakı elementlərdə (3.1) səviyyəsi dolmağa başlar və bu arqon atomunda tamamlanar.

Dördüncü period. (3,2) səviyyəsi $l=2$ olduğu üçün (4,0) səviyyəsindən yuxarıda yerləşir. Ona görə (3,1) səviyyəsi dolandan sonra dördüncü ($n=4$) səviyyəsi dolmağa başlayır. Kalium atomu qələvi metal atomu olaraq özünü litium və natirium atomları kimi aparır. (4,0) səviyyəsi dolmağa başlayır və (3,2) səviyyəsi sonra dolar. Qeyd edək ki, dolmamış (3,2) səviyyəsində olan dəmir atomunda dörd elektron spini $s=+1/2$ və spini $s=-1/2$ olan halda olar. Bununlada dəmirin maqnit xassələri meydana çıxır. (3,2) səviyyəsi dolandan sonra (4,1) səviyyəsi dolmağa başlayır.

Beşinci period. (5,0) səviyyəsi dolduqdan sonra (4,2) və (5,1) səviyyələri dolmağa başlayır. Atom sırası 46 olan elementin beşinci elektron səviyyəsindən elektron (4,2) səviyyəsinə keçər. Bununlada dolmamış elektron təbəqəsi meydana gəlir və spini $+1/2$ və $-1/2$ olan antiparalel spinlər cüt-cüt quruplaşırlar. Gümüş atomunun xassələri beşinci təbəqədə olan yalnız elektronla müəyyən olunurlar. Beşinci period (5,1) səviyyəsinin dolması ilə bitir. (4,3) səviyyəsi isə boş qalır.

Altınca period. Bu periodda ($n=6$) 57-dən 71-i yerdə olan atomlara qədər atomların daxili səviyyələri (4,3) olanları dolur. (4,3) dolduq-

ca beş və altıncı təbəqələrin konfuquryası dəyişmişdir. Bu elementlərin kimyəvi xassələri dəyişmişdir, onları bir-birindən ayırmaq çətin olur. Burada (6,1) təbəqəsi dolmağa başlayır.

Yeddinci period. Bu təbəqə fransium elementi ilə başlanır ($n=7$) və daxili təbəqələrdən (5,3) təbəqəsi boş olduğu üçün dolmağa başlar (5,3) təbəqəsində olan elementlərin xassələri bir-birinə bənzər. Yeddinci period elementlərinə transuran elementləri daxildir. Atom sayları 100-dən çox olan elementlərdə bu perioda daxil olurlar.

Beləliklə elementlərin periodik sistemi və elektron təbəqələrin qapanması, hansı səviyyədə nə qədər elektronun olmasını göstərən cədvəl A-da verilmişdi.

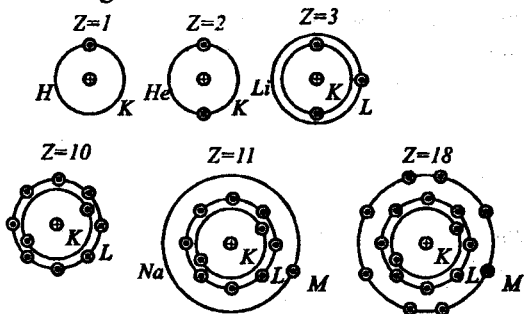
Cədvəl A.
Elementlərin periodikliyi

n	1	2	3	4	5	6	7
1	0	01	012	0123	01234	012345	1
	1S	2S	2P3S3P3d	4S4P4d4f	5S5P5d5f5e	6S6P6d6f6e6g	7P
1)	$^2S_{1/2}H$	1					
2)	1S_0He	2					
3)	$^2S_{1/2}Li$	2	1				
4)	1S_0Be	2	2				
5)	$^2P_{1/2}B$	2	2	1			
6)	3P_0C	2	2	2			
7)	$^4S_{3/2}N$	2	2	3			
8)	3P_2O	2	2	4			
9)	$^3P_{3/2}F$	2	2	5			
10)	1S_0Ne	2	2	6			
11)	$^2S_{1/2}Na$	2	2	6	1		
12)	1S_0Mg	2	2	6	2		
13)	$^2P_{1/2}Al$	2	2	6	2	1	
14)	3P_0Si	2	2	6	2	2	

15)	${}^4S_{3/2}P$	2	2	6	2	3					
16)	2P_2S	2	2	6	2	4					
17)	${}^2P_{3/2}Cl$	2	2	6	2	5					
18)	2S_0Ar	2	2	6	2	6					
19)	${}^2S_{1/2}K$	2	2	6	2	6	1	1			
20)	2S_0Ca	2	2	6	2	6	1	2			
21)	${}^2D_{3/2}Sc$	2	2	6	2	6	1	2			
22)	3F_2Ti	2	2	6	2	6	2	2			
23)	${}^4F_{3/2}V$	2	2	6	2	6	3	2			
24)	7F_3Cr	2	2	6	2	6	4	2			
25)	${}^6S_{3/2}Mn$	2	2	6	2	6	5	2			
26)	5D_4Fe	2	2	6	2	6	6	2			
27)	${}^4F_{1/2}Co$	2	2	6	2	6	7	2			
28)	3F_4Ni	2	2	6	2	6	8	2			
29)	${}^2S_{1/2}Cu$	2	2	6	2	6	10	2			
30)	1S_0Zn	2	2	6	2	6	10	2	1		
31)	${}^2P_{1/2}Ga$	2	2	6	2	6	10	2	2		
32)	3P_0Ge	2	2	6	2	6	10	2	2		
33)	${}^4S_{3/2}As$	2	2	6	2	6	10	2	2		
34)	3P_2Se	2	2	6	2	6	10	2	2		
35)	${}^2P_{3/2}Br$	2	2	6	2	6	10	2	2		
36)	1S_0Kr	2	2	6	2	2	10	2	6		
37)	${}^2S_{1/2}Rb$	2	2	6	2	6	10	2	6	1	
38)	1S_0Sr	2	2	6	2	6	10	2	6	2	
39)	${}^2D_{3/2}Y$	2	2	6	2	6	10	2	6	1	2
40)	3F_2Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2	2

41)	${}^6D_{1/2}Nb$	2	2	6	2	6	10	2	6	3	1
42)	7S_3Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5	1
43)	${}^6S_{5/2}Tc$	2	2	6	2	6	10	2	6	7	1
44)	5F_3Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	8	1
45)	1S_0Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1
46)	${}^4F_{9/2}Pd$	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1
47)	${}^2S_{1/2}Ag$	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2
48)	1S_0Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2
49)	${}^2P_{1/2}Jn$	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2
50)	3P_0Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2
51)	${}^4S_{3/2}Sb$	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2
52)	3P_2Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2
53)	${}^2P_{3/2}J$	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2
54)	1S_0Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2

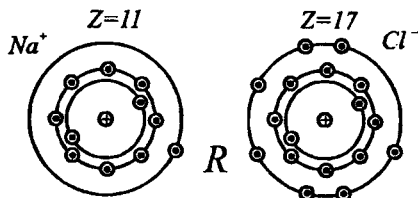
Hal-hazırda 110-dan çox kimyəvi element təbiətdə, tapılmışdı. Elementlərin periodik sisteminin izahı kvant mexanikasının ən mühüm nəhəyətlərindən birisidir. Kvant mexanikası yaranandan sonra, kimya elmi sahəsində çox vacib nəticələr əldə edilmiş və kimyəvi problemlərin çoxu özünün fiziki əsaslarını tapmışdı. Atomda, elektronlar nüvə ətrafında bəlli bir təbəqəni tuturlar. Bunu əyani olaraq şəkil I.19-da göstərilən kimi təsvir edə bilərik.



Şəkil I.19. Atomlarda elektron təbəqələri.

§48. Molekulların yaranması. Hidrogen molekulu

Maddə qurluşunun kimyəvi və optik xassələri əsasən atomlarda olan nüvə ətrafındakı ən uzaq orbitdəki elektronlarla təyin olunur. Fəqət nüvəyə yaxın orbitdəki elektronlar nüvə ilə sıx əlaqədə olduğu üçün, onlar kimyəvi proseslərdə rol oynamırlar. Ona görə kimyəvi reaksiyalarda ayrılan enerji, daxili elektronların enerjisindən çox azdır. Bununla əlaqədar olaraq kimyəvi rabitə iki əsas şəkildə ola bilər: ion (heteropolyar) və atom (homopolyar) rabitəli molekular. Heteropolyar molekullarda bir elektron atomda artıq olub, başqa bir atomda isə bir elektron çatışmadığı üçün belə atomlar rastlaşanda çatışmayan elektronlu atom, artıq elektronlu atomun elektronunu qəbul edib, dayanıqlı bir sistem yaradırlar ki, bununlada molekul yaranması olur. Məsələn, NaCl (xörək duzu) molekulu belə bir rabitənin nəticəsidir. Bunu əyani olaraq şəkil I.20-də göstərək.



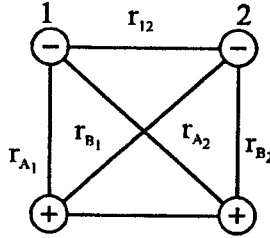
Şəkil I.20. Xörək duzu molekulu.

Na atomunda qapanmış təbəqədən əlavə kənar təbəqədə bir elektron olur, lakin Cl atomunda kənar təbəqədə isə bir elektron çatmır. Cl atomu Na atomunun elektronunu alaraq təbəqəni doldürür və beləliklə, molekul yaranıb, xörək duzu alınır.

Heteropolyar rabitəli molekulların nəzəriyyəsi bəsitdir və ona görə homopolyar (atomlu) rabitəli molekulların yaranmasına baxaq. Belə molekullara misal olaraq hidrogen molekulu H_2 , (oksigen, azot) O_2 , N_2 və s. göstərmək olar. İki hidrogen atomu birləşərək H_2 molekulu yaradır və bu molekul daha başqa hidrogen atomları ilə dayanıqlı sistem yarada bilmir. Bu isə kimyəvi proseslərin doyma xassəsi daşmasını göstərir. Hidrogen atomunun kvant mexanikasına görə araşdıraq.

İki hidrogen atomunun nüvəsi arasındakı məsafə R olsun və fərz edək ki R adabatik olaraq dəyişir. Yə'ni, R elə tədricən dəyişir

ki, Şchrödinger tənliyinin həlli zamanı onu sabit qəbul etmək olar. A nüvəsi B nüvəsindən R məsafəsində yerləşir. A hidrogen atomunun elektronu 1 (r_1, S_{1z}), B atomunun elektronu 2 (r_2, S_{2z}) olsun (Şəkil I.21).



Şəkil I.21. Hidrogen molekulunun sxemi.

Bu sistemin Şchrödinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r_1, r_2, S_{1z}, S_{2z}) = \hat{H} \psi(r_1, r_2, S_{1z}, S_{2z}, t) \quad (48.1)$$

Əgər spin-orbital qarşılıqlı təsiri göz önünə almarıqsa, bu sistemin Hamilton operatoru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + e^2 \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{A1}} - \frac{1}{r_{B2}} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}} \right) \quad (48.2)$$

şəklində yazılar. Burada e^2/R A və B nüvələri arasındakı Coulumb qarşılıqlı təsiri, e^2/r_{A1} 1-ci elektronla A nüvəsi arasındakı təsir, e^2/r_{B2} 2-ci elektronla B nüvəsi arasındakı təsir, e^2/r_{B1} 1-ci elektronla B nüvəsi arasındakı təsir, e^2/r_{A2} 2-ci elektronla A nüvəsi arasındakı təsir və e^2/r_{12} 1-ci elektronla 2-ci elektron arasındakı qarşılıqlı Coulumb təsiri. ∇_1^2 və ∇_2^2 1-ci və 2-ci elektronun Laplas operatorudur. Əgər Coulumb təsirini nəzərə almasaq, hidrogen molekulunun enerjisi iki hidrogen atomunun enerjilərinin cəminə bərabər olur:

$$E_M = 2 \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = 2E_H \quad (48.3)$$

Yəni, bir-birindən uzaqda olan H atomları üçün R , r_{B1} , r_{A2} və r_{12} həddləri emal olunduqda (47.2) enerjisi alınır.

Onda həyəcanlaşma nəzəriyyəsinə görə sıfırıncı yaxınlaşmada dalğa funksiyasını $\psi_A(1)\psi_B(2)$ və $\psi_A(2)\psi_B(1)$ – nı superpozisiyası

$$\phi_1 = c_1\psi_A(1)\psi_B(2) + c_2\psi_A(2)\psi_B(1) \quad (48.4)$$

şəkində yazıla bilər. Həyacanlaşmış halın dalğa funksiyası

$$\phi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = c_1\psi_A(1)\psi_B(2) + c_2\psi_A(2)\psi_B(1) + \psi' \quad (48.5)$$

kimi yazılır. Burada ψ' hidrogen atomlarının təsiri nəticəsində dalğa funksiyasına olan əlavədir. (47.5) ifadəsini stasionar Şchrödinger tənliyində yerinə yazsaq

$$\begin{aligned} \hat{H}C_1\psi_A(1)\psi_B(2) + \hat{H}C_2\psi_A(2)\psi_B(1) + \hat{H}\psi' = \\ = C_1E\psi_A(1)\psi_B(2) + C_2E\psi_A(2)\psi_B(1) + E\psi' \end{aligned} \quad (48.6)$$

alırıq. H_2 molekulunun enerjisini

$$E = 2E_H + \varepsilon(R) \quad (48.6')$$

tapırıq. $\varepsilon(R)$ atomların qarşılıqlı təsiri nəticəsində enerjiyə olan əlavədir. Potensial enerjini

$$V(1,2) = e^2 \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{r_{A2}} - \frac{1}{r_{B1}} + \frac{1}{r_{12}} \right) \quad (48.7)$$

$$V(2,1) = e^2 \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{r_{A1}} - \frac{1}{r_{B2}} + \frac{1}{r_{12}} \right)$$

olduğunu nəzərə alsaq, (47.6)-nı aşağıdakı şəkildə yazırıq:

$$\begin{aligned} C_1 [\hat{H}_A(1) + \hat{H}_B(2) + V(1,2)] \psi_A(1)\psi_B(2) + \\ + C_2 [\hat{H}_A(2) + \hat{H}_B(1) + V(2,1)] \psi_A(2)\psi_B(1) + [\hat{H}_A(1) + \hat{H}_B(2)] \psi' + \\ + V(1,2)\psi' + [\hat{H}_A(2) + \hat{H}_B(1)] \psi' + V(2,1)\psi' = 2E_H [C_1\psi_A(1)\psi_B(2) + \\ + C_2\psi_A(2)\psi_B(1)] + \varepsilon(R) [C_1\psi_A(1)\psi_B(2) + C_2\psi_A(2)\psi_B(1)] + \\ + [2E_H + \varepsilon(R)] \psi' \end{aligned}$$

Burada $V(1,2)\psi'$, $V(2,1)\psi'$ və $\varepsilon(R)\psi'$ həddləri, o birisi hədlərə nisbətən kiçik olduğu üçün, onları nəzərə almaya bilərik və tənliyi

$$\begin{aligned} [\hat{H}_A(1) + \hat{H}_B(2)] \psi' - 2E_H \psi' = [\varepsilon(R) - V(1,2)] C_1 \psi_A(1)\psi_B(2) + \\ + [\varepsilon(R) - V(2,1)] C_2 \psi_A(2)\psi_B(1) \\ [\hat{H}_A(2) + \hat{H}_B(1)] \psi' - 2E_H \psi' = [\varepsilon(R) - V(1,2)] C_1 \psi_A(1)\psi_B(2) + \\ + [\varepsilon(R) - V(2,1)] C_2 \psi_A(2)\psi_B(1) \end{aligned} \quad (48.8)$$

əldə edərik. (48.8)-də

$$\begin{aligned}\hat{H}_A(1) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{A1}}, \hat{H}_B(2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{B2}} \\ \hat{H}_A(2) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{A2}}, \hat{H}_B(1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{B1}}\end{aligned}\quad (48.9)$$

Riyaziyyatdan mə'lumdur ki, (48.8) tənliklərinin sağ tərəfi bircis tənliyin həllinə ortoqonaldır.

$$\begin{aligned}& \iint [\{\varepsilon(R) - V(1,2)\}C_1\psi_A(1)\psi_B(2) + \\ & + \{\varepsilon(R) - V(2,1)\}C_2\psi_A(2)\psi_B(1)]^* \psi_A(1)\psi_B(2) dV_1 dV_2 \\ & \iint [\{\varepsilon(R) - V(1,2)\}C_1\psi_A(1)\psi_B(2) + \\ & + \{\varepsilon(R) - V(2,1)\}C_2\psi_A(2)\psi_B(1)]^* \psi_A(2)\psi_B(1) dV_1 dV_2\end{aligned}\quad (48.10)$$

Əgər

$$\begin{aligned}I^2 &= \iint \psi_A^*(1)\psi_B^*(2)\psi_A(2)\psi_B(1) dV_1 dV_2 = \iint \psi_A^*(2)\psi_B^*(1)\psi_A(1)\psi_B(2) dV_1 dV_2 \\ A &= \iint \psi_A^*(2)\psi_B^*(1)V(2,1)\psi_A(1)\psi_B(2) dV_1 dV_2 = \\ &= \iint \psi_A^*(1)\psi_B^*(2)V(1,2)\psi_A(2)\psi_B(1) dV_1 dV_2 \\ K &= \iint \psi_A^*(1)\psi_B^*(2)V(1,2)\psi_A(1)\psi_B(2) dV_1 dV_2 = \\ &= \iint \psi_A^*(2)\psi_B^*(1)V(2,1)\psi_A(2)\psi_B(1) dV_1 dV_2\end{aligned}\quad (48.11)$$

işarələri qə'bul etsək, (48.10)-dan

$$\begin{aligned}[\varepsilon(R) - K]C_1 + [\varepsilon(R)I^2 - A]C_2 &= 0 \\ [\varepsilon(R)I^2 - A]C_1 + [\varepsilon(R) - K]C_2 &= 0\end{aligned}\quad (48.12)$$

tənliklərini əldə edərik.

(48.11) ifadəsində K-Kulon, A-mübadilə enerjisi, I^2 isə örtmə inteqralı adlanır. $R \rightarrow \infty$ yaxınlaşdıqda A atomu B atomundan uzaq olur və onlar az kəşisirlər. Onda da $I \rightarrow 0$ yaxınlaşmış olur. $R \rightarrow 0$ olduqda isə A atomu ilə B atomu üst-üstə düşür və $R \rightarrow 0$ olanda $I \rightarrow 1$ yaxınlaşır. Yəni I inteqralı sıfır ilə vahid arasında qiymətlər almış olur:

$$0 \leq I \leq 1$$

K iki yükün Kulon qarşılıqlı təsirini xarakterizə edir. Yük sıxlığı

$$\rho_A = -e|\psi_A|^2, \rho_B = -e|\psi_B|^2$$

daxil edəriksə, K enerjisini

$$K = \frac{e^2}{R} + e \int \frac{\rho_A(1)}{r_{B1}} dV_1 + e \int \frac{\rho_B(2)}{r_{A2}} dV_2 + \iint \frac{\rho_A(1)\rho_B(2)}{r_{12}} dV_1 dV_2$$

yaza bilərik. Burada ψ_A, ψ_B , A və B hidrogen atomunun normallaşmış dalğa funksiyalarıdır. Mübadilə enerjisi isə

$$A(R) = \frac{e^2}{R} + e \int \frac{\rho_{AB}(1)}{r_{A1}} dV_1 + e \int \frac{\rho_{AB}(2)}{r_{B2}} dV_2 + \iint \frac{\rho_{AB}(1)\rho_{AB}(2)}{r_{12}} dV_1 dV_2$$

kimi yazılar.

Göründüyü kimi həm $K(R)$ və həm də $A(R)$ müsbət və mənfi qiymətlər alır və bu atom nüvələri arasındakı məsafə ilə əlaqədar idi.

(48.12) tənliklər sisteminin birgə həlli olması üçün C_1 və C_2 əmsallarından düzəldilən determinant sıfır olmalıdır:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon(R) - K & \varepsilon(R)I^2 - A \\ \varepsilon(R)I^2 - A & \varepsilon(R) - K \end{vmatrix} = 0$$

Buradan .

$$[\varepsilon(R) - K]^2 - [\varepsilon(R)I^2 - A]^2 = 0$$

olar. Yə'ni

$$\varepsilon^2(R) - 2K\varepsilon(R) + K^2 - \varepsilon^2(R)I^2 + 2I^2A\varepsilon(R) - A^2 = 0$$

$$(1 - I^2)\varepsilon^2(R) - 2(K - I^2A)\varepsilon(R) + (K^2 - A^2) = 0$$

alırıq. Beləliklə, $\varepsilon(R)$ -in kökləri

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{2(K - I^2A) \pm \sqrt{4(K - I^2A)^2 - 4(1 - I^2)(K^2 - A^2)}}{2(1 - I^4)} =$$

$$= \frac{(K + I^2A) \pm (K - I^2A)}{(1 - I^2)(1 + I^2)}$$

tapılar. Onda $\varepsilon(R)$ -in iki kökü

$$\varepsilon_1 = \frac{K - I^2 A + KI^2 - A}{(1 - I^2)(1 + I^2)} = \frac{(1 + I^2)K - (1 + I^2)A}{(1 - I^2)(1 + I^2)} = \frac{K - A}{1 - I^2} \quad (48.13)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{K + AI^2 - (I^2 K - A)}{(1 - I^2)(1 + I^2)} = \frac{K + A}{1 + I^2} \quad (48.14)$$

olar. (48.13) və (48.14) hidrogen atomunun enerjisine Coulumb təsirlərini nəzərə aldıqda olan əlavələrdi. Bu əlavələr də mübadilə enerjisi və örtmə inteqralının işarəsilə fərqlənilir:

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{K \mp A}{1 \mp I^2}$$

(48.13) kökünü $\varepsilon_1 = \frac{K - A}{1 - I^2}$ (48.12)-də yerinə yazsaq

$$\begin{aligned} \left(\frac{K - A}{1 - I^2} - K \right) C_1 + \left(\frac{K - A}{1 - I^2} - A \right) C_2 &= 0 \\ \left(\frac{K - A}{1 - I^2} I^2 - A \right) C_1 + \left(\frac{K - A}{1 - I^2} - K \right) C_2 &= 0 \\ \left. \begin{aligned} (KI^2 - A)C_1 + (KI^2 - A)C_2 &= 0 \\ (KI^2 - A)C_1 + (KI^2 - A)C_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

alarıq. Buradan

$$C_1 = -C_2 = C_{(-)} \quad (48.15)$$

olar. Əgər $\varepsilon_2 = \frac{K + A}{1 + I^2}$ qiymətini (48.12)-də yerinə yazmış olarıqsa

$$C_1 = C_2 = C_{(+)} \quad (48.16)$$

əldə edirik. (48.4)-ə görə

$$\phi_{1a} = C_{(-)} [\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_A(2)\psi_B(1)] \quad (48.17)$$

$$\phi_{1s} = C_{(+)} [\psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1)] \quad (48.18)$$

fəza funksiyaları üçün iki (48.17) və (48.18) ifadələrini almış oluruq. Buradan görünür ki, (48.17) halında antisimmetrik funksiya, (48.18) halında isə simmetrik funksiya alırıq. $C_{(-)}$ və $C_{(+)}$ əmsalları ϕ_{1a} və ϕ_{1s} funksiyalarında normalama şərtlərindən tapılır.

$$\int \phi_{1a}^* \phi_{1a} dV_1 dV_2 = 1$$

$$\int \phi_{1s}^* \phi_{1s} dV_1 dV_2 = 1$$
(48.19)

Normallama şərtinə görə

$$|C_{(-)}|^2 \iint \{ \psi_A^*(1) \psi_B^*(2) \psi_A(1) \psi_B(2) - \psi_A^*(2) \psi_B^*(1) \psi_A(1) \psi_B(2) -$$

$$- \psi_A^*(1) \psi_B^*(2) \psi_A(2) \psi_B(1) + \psi_A^*(2) \psi_B^*(1) \psi_A(2) \psi_B(1) \} dV_1 dV_2 = 1$$

$$|C_{(+)}|^2 \iint \{ \psi_A^*(1) \psi_B^*(2) \psi_A(1) \psi_B(2) + \psi_A^*(2) \psi_B^*(1) \psi_A(1) \psi_B(2) +$$

$$+ \psi_A^*(1) \psi_B^*(2) \psi_A(2) \psi_B(1) + \psi_A^*(2) \psi_B^*(1) \psi_A(2) \psi_B(1) \} dV_1 dV_2 = 1$$

$$|C_{(-)}|^2 (2 - 2I^2) = 1, C_{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2 - 2I^2}}$$

$$|C_{(+)}|^2 (2 + 2I^2) = 1, C_{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2 + 2I^2}}$$
(48.20)

alınır. (48.20)-ni, (48.17)-i və (48.18)-də, (48.13) və (48.14) ilə (48.6)-da yerinə yazsaq:

$$E_1 = 2E_H + \frac{K - A}{1 - I^2}; \phi_a = \frac{1}{\sqrt{2 - 2I^2}} [\psi_A(1) \psi_B(2) - \psi_A(2) \psi_B(1)] \quad (48.21)$$

$$E_2 = 2E_H + \frac{K + A}{1 + I^2}; \phi_s = \frac{1}{\sqrt{2 + 2I^2}} [\psi_A(1) \psi_B(2) + \psi_A(2) \psi_B(1)]$$

əldə edirik.

H_2 molekulu üçün iki enerji qiyməti və iki antisimmetrik və simmetrik dalğa funksiyası alırıq. Dalğa funksiyasının simmetrik və antisimmetriklili hidrijen atomlarının elektronlarının yerdəyişiminə görə olur. Fəza funksiyası (48.21), yeni yerdəyişməyə görə antisimmetrik olduqda, fermion sistemi (iki elektronlu sistem) Pauli prinsipini ödədiyi üçün, spin funksiyası simmetrik olmalıdır. Fəza funksiyası (48.22) olduqda isə spin funksiyası antisimmetrik olmalıdır. Yə'ni, simmetrik spin funksiyası

$$\begin{aligned}\varphi_s &= \varphi_{\frac{1}{2}}(S_{1z})\varphi_{\frac{1}{2}}(S_{2z}), \\ \varphi_s &= \varphi_{-\frac{1}{2}}(S_{1z})\varphi_{-\frac{1}{2}}(S_{2z}),\end{aligned}\quad (48.23)$$

$$\varphi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_{\frac{1}{2}}(S_{1z})\varphi_{-\frac{1}{2}}(S_{2z}) + \varphi_{-\frac{1}{2}}(S_{1z})\varphi_{\frac{1}{2}}(S_{2z}) \right]$$

və antisimmetrik spin funksiyası isə

$$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\varphi_{\frac{1}{2}}(S_{1z})\varphi_{-\frac{1}{2}}(S_{2z}) - \varphi_{-\frac{1}{2}}(S_{1z})\varphi_{\frac{1}{2}}(S_{2z}) \right] \quad (48.24)$$

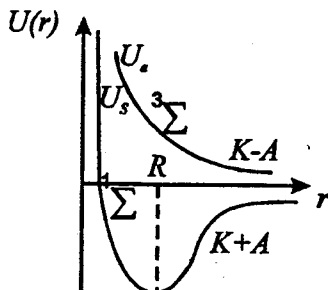
olurlar. Beləliklə, iki atomlu bir sistemin (H_2 molekulu) enerjisinə iki funksiyaya uyğun gəlir.

$$E^{(1)} = 2E_H + \frac{K+A}{1+I^2}; \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2+2I^2}} [\psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1)] \quad (48.25)$$

$$E^{(3)} = 2E_H + \frac{K-A}{1-I^2}; \varphi_3 = \frac{1}{\sqrt{2-2I^2}} [\psi_A(1)\psi_B(2) - \psi_A(2)\psi_B(1)] \quad (48.26)$$

(48.25) ifadəsində bir spin halı olur, ona görə bu hala sinqlet hal ($^1\Sigma$), (48.26) halına isə üç spin halı uyğun gəlir ki, ona görə də bu hal triplet hal ($^3\Sigma$) adlanır.

Potensial enerjinin nüvələr arasındakı məsafədən asılılığının qrafikini qursaq, şəkil I.22. qrafiki almış olarıq.



Şəkil I.22. Kulon və mübadilə enerjisinin H_2 molekulu nüvəsinin arasındakı məsafədən asılılığı

Mübadilə enerjisinin A qiyməti R-in böyük olmayan dəyərlərində mənfi olur və onun mütləq qiyməti Kulon enerjisindən böyük olur. Bu onunla əlaqədardır ki, spinləri paralel olan iki hidrogen atomunu bir-birinə yaxınlaşdıqda onların enerjisi artır. Lakin iki antiparalel spinli atomları yaxınlaşdıqda mübadilə enerjisi, ümumi enerjini azaldır. Sinqlet halında hidrogen atomları bir-birinə cəzblənir, bu zaman onlar yaxınlaşdıqca, enerji ayrılır, enerjisi qərarlaşan sistem olan hidrogen molekulu yaranır. Sinqlet halında iki hidrogen atomunun nüvəsi arasındakı məsafə təxminən 1,5 Borh radiusuna bərabər olur. Bu məsafədə hidrogen molekulu dissoasiya (parçalanması) enerjisi $D=2E_H-E^{(1)}$ -ə bərabər olar. Buradan da hesablamalar

$$D_n = 4,37ev$$

$$R_n = 0,735 \cdot 10^{-8} sm$$

qiymətlərini verir, lakin təcrübədə D və R üçün $D_n = 4,38ev$; $R_n = 0,753 \cdot 10^{-8} sm$ -dir. Göründüyü kimi nəticələr çox yaxşı uzlaşır.

Müşahidələr göstərir ki, hidrogen molekulu spinli və maqnit momenti əsas halda sıfırdır. Yəni, bu molekul özünü diamaqnit kimi aparır. Beləliklə, spinin istiqaməti paralel olan hidrogen atomları arasında dəf qüvvələri mövcuddur və onlar molekulu yarada bilmirlər.

Deməli, neytral atomlardan molekulu yaranmasına səbəb antiparalel spinli atomların mübadilə enerjisinin mövcud olmasıdır.

Təcrübədə iki cür hidrogen molekulu müşahidə olunmuşdu. Bu molekullar elektronların spinli ilə əlaqədar olmayıb, nüvələrin spinlərin istiqaməti ilə bağlıdır. Belə molekullar parahidrogen və ortohidrogen molekulu deyilir. Parahidrogen molekulu iki hidrogen atomunun nüvəsi iki protondan ibarət olduğuna görə (protonlar fermion olub, spinli 1/2-dir) antiparalel spinli molekullar olur. Ortohidrogen molekulu isə atom nüvəsindəki protonların spinli paralel olur. İki protonlu sistemdə paralel spinli hal üç dəfə (üç simmetrik hal funksiyası olduğu üçün) antiparalel spin halından çox olduğuna görə adi şəraitdə hidrogen molekulu 25%-iparahidrogen, 75% isə ortohidrogen olur. Temperatur aşağı düşdükcə parahidrogenin miqdarı çoxalır, 0°K temperaturunda onun miqdarı 100% olur və sistem uzun müddət bu halda qala bilər.

Tə'sirsiz qaz atomlarının elektron təbəqələrində elektronların hamısı iki-iki antiparalel spinə malik olurlar. Ona görə onları başqa atomlarla mübadilə enerjisi cəzblənməyə gətirib, çıxarmır. Pauli prinsipinə görə bu halda olma qadağan olunur. Bu səbəbdən təsirsiz qazların atomları molekulları yaratmırlar. H_2 molekulu ilə hidrogen atomunun sistem təşkil etməsi zamanı, əgər H atomunun spinini yuxarıdırsa, H_2 molekulu spinlər antiparalel olduğu üçün spinini yuxarı olan elektronu, H atomu mübadilədə dəf edər. Əgər H atomunun elektronu spin aşağı olan H_2 molekulu elektronu ilə mübadilə etmiş olsaydı, spinlər yuxarı olan iki elektronlu sistem əmələ gəlmiş olur. Belə sistemdə molekulu parçalanmasına (dissosiasiya) gətirib, çıxarır. Beləliklə, adi şəraitdə üç hidrogen atomlu dayanacaq sistem molekulu yaranmaz.

Başqa bir sistemə baxaq. Oksigen atomu maqnit momenti sıfırdan fərqli olan paramaqnit atomdur. Təcrübədə oksigen atomunun spinini vahid alınır. Onun iki elektronu kompensasiya (təzminat) olunmamış qalır. Əgər oksigen atomu spinləri aşağı olan iki hidrogen atomunun, ikisi ilə mübadilə edərsə, spinləri antiparalel olar. Yəni, hər iki hidrogen atomu oksigen atomuna cəzblənir və nəticədə H_2O (iki hidrogen və bir oksigen atomlu sistem) molekulu yaranır. Beləliklə, kvant mexanikası atomlardan mürəkkəb dayanıqlı sistemlər yaranma səbəblərini izah edir.

§49. Şüalanmanın kvant nəzəriyyəsi, məcburi və özbaşına (spontan) keçid ehtimalları

Cisimlərin şüa udma və buraxması, atomlarda elektron keçidləri ilə əlaqədardır. Keçid ehtimallarının tapılmasında və ona uyğun olaraq şüa udub, buraxmasını araşdırmaq üçün həyacanlaşma nəzəriyyəsindən istifadə olunur. Aşkardır ki, xarici elektromaqnit sahəsində Hamilton operatoru

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + U + e\varphi + \frac{e}{mc} \vec{A} \hat{P} - \frac{ie\hbar}{2mc} \vec{\nabla} \vec{A} + \frac{e^2}{m^2 c^2} \vec{A}^2 \quad (49.1)$$

yazılır. \vec{A} və φ -ni elə seçək ki $\vec{\nabla} \vec{A} = 0$ olsun. A^2 -ni çox kiçik qəbul etsək Hamilton operatoru (49.1)

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + U + \frac{e}{mc} \vec{A} \hat{P} \quad (49.2)$$

şəkində yazırıq. \vec{A} vektoru potensialı \vec{E} elektrik sahəsini xarakterizə edir

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (49.3)$$

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ potensialının Fourier inteqralı

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int \vec{A}_0(\omega) e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} d\omega \quad (49.4)$$

şəkində verilir. Bunu

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \int \vec{A}_0(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (49.5)$$

kimi də yazı bilərik. Onda (49.3)-ə görə

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{i}{c} \omega \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (49.6)$$

olar. (49.6)-nın iki tərəfini $e^{i\omega t}$ -yə vurub, t üzrə inteqrallasaq

$$\int e^{i\omega t} \vec{E}(\vec{r}, t) dt = -\frac{i\omega}{c} \int e^{i\omega t} \vec{A}(\vec{r}, t) dt$$

yazırıq. Digər tərəfdən \vec{E} -nin və \vec{A} -nın Fourier obrazı

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \int \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int \vec{A}_0(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

olduğuna görə, Fourier əmsalları üçün

$$2\pi \vec{E}(\omega) = -\frac{i\omega}{c} 2\pi \vec{A}_0(\omega) \quad (49.7)$$

əldə edərik. Buradan

$$\vec{A}_0(\omega) = +\frac{ic}{\omega} \vec{E}(\omega) \quad (49.8)$$

alırıq və ya

$$\vec{A}_0(\omega) = \frac{ic}{\omega} \vec{E}(\omega) \vec{n} \quad (49.9)$$

yaza bilərik. Burada \vec{n} vektoru \vec{E} sahəsinə paralel vahid vektordur. Potensialın Fourier-obrazı isə

$$V(\omega) = \frac{e}{mc} e^{i\vec{k}\vec{r}} \int \vec{A}_0(\omega) e^{-i\omega t} \hat{P} d\omega \quad (49.10)$$

olur. Buradan

$$V(\omega) = \frac{ie}{mc} \bar{\varepsilon}(\omega) \bar{n} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{P} \quad (49.11)$$

yazsaq, matris elemanı

$$V_{kk}(\omega_{kk}) = \frac{ie}{mc} \bar{\varepsilon}(\omega_{kk}) \bar{n} \int \psi_k^{*(o)}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{P} \psi_k^{(o)}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (49.12)$$

olar. Keçid ehtimalının (36.18) ifadəsindən

$$\begin{aligned} W_{kk} &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{kk}(\omega_{kk})|^2 = \\ &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\bar{\varepsilon}(\omega_{kk})|^2 \frac{e^2}{m^2 \omega_{kk}^2} \left| \bar{n} \int \psi_k^{*(o)}(r) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{P} \psi_k^{(o)}(r) d\vec{r} \right|^2 \end{aligned} \quad (49.13)$$

alarıq. Bu ifadədə

$$P = \int \psi_k^{*(o)}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{P} \psi_k^{(o)}(\vec{r}) d\vec{r}$$

əvəzləməsi etsək, (49.13)-ü

$$W_{kk} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\bar{\varepsilon}(\omega_{kk})|^2 \frac{e^2}{m^2 \omega_{kk}^2} (\bar{n} \bar{P})_{kk} \quad (49.14)$$

şəklində yazarıq. $|\varepsilon(\omega)|^2$ t anında enerjinin qiymətini göstərir.

Onda vahid səthdən keçən elektromaqnit sahəsinin enerjisi

$$E = \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon^2(t) dt \quad (49.15)$$

Bunu bir qədər dəyişsək

$$\begin{aligned} E &= \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon^2(t) dt = \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon^*(\omega') e^{i\omega' t} d\omega' dt = \\ &= \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega d\omega' 2\pi \delta(\omega' - \omega) \varepsilon(\omega) \varepsilon^*(\omega') \end{aligned}$$

yazarıq və buradan

$$E = \frac{c}{2} \int \varepsilon(\omega) \varepsilon^*(\omega) d\omega = \frac{c}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varepsilon(\omega)|^2 d\omega = c \int_0^{\infty} |\varepsilon(\omega)|^2 d\omega \quad (49.16)$$

taparıq. Digər tərəfdən $d\omega$ tezlikli enerjinin miqdarını $E(\omega)$ ilə işa-

rə edəriksə, tam enerjini

$$E = \int E(\omega) d\omega$$

şəklində yazarıq. Bunu (49.15)-lə müqayisə edəriksə

$$E = c|\varepsilon(\omega)|^2 \quad (49.17)$$

alarıq. Digər tərəfdən enerjinin miqdarı, spektral sıxlıq, işıq sürəti və zamanın hasilinə bərabər olur:

$$E(\omega) = \rho(\omega) \cdot c \cdot t$$

$\rho(\omega) = c|\varepsilon(\omega)|^2$ olduğu üçün vahid zamanda keçid ehtimalını

$$W_{kk} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left| \frac{e}{m\omega_{kk}} (\bar{n}\bar{P}_{kk}) \right|^2 \rho(\omega_{kk}) \quad (49.18)$$

düsturu ilə və ya

$$\begin{aligned} W_{kk} &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left| \frac{e}{m\omega_{kk}} \bar{P}_{kk} \right|^2 \cos^2 \theta_{kk} \rho(\omega_{kk}) = \\ &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\bar{D}_{kk}|^2 \cos^2 \theta_{kk} \rho(\omega_{kk}) \end{aligned} \quad (49.19)$$

ilə təyin olunur. Burada

$$\bar{D}_{kk} = -\frac{ie}{m\omega_{kk}} \bar{P}_{kk} \quad (49.20)$$

Klassik fizikadan mə'lumdur ki, udulma və şüalanmanı müəyyən edən məcburi və özbaşına (spontan) keçidlərin ehtimalı Eynşteyn əmsalları ilə təyin olunur. Yə'ni,

$$W^{\text{m} \leftrightarrow \text{c}} = B_{kk} \rho(\omega) \quad (49.21)$$

$$W^{\text{sp}} = A_{kk}$$

Burada

$$B_{kk} = \int b_{kk} d\Omega$$

Bu əməllər arasında

$$B_{kk} = \frac{4\pi^2 c^3}{\hbar \omega^3} A_{kk}$$

əlaqə mövcuddur. Onlar məcburi B_{kk} və spontan A_{kk} keçidləri xa-

rakterizə edir. Bu münasibəti kvant mexanikasında yazmış olarıqsa, $\omega \rightarrow \omega_{k'k}$ əvəz etmək gərəkdir.

$$B_{k'k} = \frac{4\pi^2 c^3}{\hbar \omega_{k'k}^3} A_{k'k} \quad (49.22)$$

$B_{k'k}$ -ni $W_{k'k}$ ilə tutuşdursaq

$$b_{k'k} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\bar{D}_{k'k}|^2 \cos^2 \theta_{k'k}$$

olarıq. Buradan isə $B_{k'k}$ əmsalını

$$\begin{aligned} B_{k'k} &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\bar{D}_{k'k}|^2 \int \cos^2 \theta_{k'k} d\Omega_{k'k} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\bar{D}_{k'k}|^2 \iint \cos^2 \theta_{k'k} \sin \theta_{k'k} d\theta_{k'k} d\varphi = \\ &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |\bar{D}_{k'k}|^2 \frac{4\pi}{3} = \frac{16\pi^3}{3\hbar^2} |\bar{D}_{k'k}|^2 \end{aligned}$$

almış oluruq. Böyləcə

$$B_{k'k} = \frac{16\pi^3}{3\hbar^2} |\bar{D}_{k'k}|^2 \quad (49.23)$$

əmsalı məcburi keçidin ehtimalını xarakterizə edərək, dipol momentinin $\bar{D} = e\vec{r}$ matris elementi ilə təyin olunur. (49.22) ifadəsindən

$$\frac{16\pi^3}{3\hbar^2} |\bar{D}_{k'k}|^2 = \frac{4\pi^2 c^3}{\hbar \omega_{k'k}^3} A_{k'k}$$

yazarıq. Buradan da spontan keçidin ehtimalı

$$A_{k'k} = \frac{4\pi \omega_{k'k}^3}{3\hbar c^3} |\bar{D}_{k'k}|^2 \quad (49.24)$$

olar. Burada dipol momentinin matris elemanı

$$\bar{D}_{k'k} = -\frac{ie}{m\omega_{k'k}} \int \psi_{k'}^{*(o)}(r) e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p} \psi_k^{(o)}(r) dV$$

olar.

Yə'ni, atomun həyacanlaşmış halda olma müddəti $A_{k'k}$ ilə təyin olunur. (49.23) və (49.24) ifadələrindən lazer şüalanmasında istifadə olunur. İndi (49.18)-dən istifadə edərək, dipol və multipol şüalanmanın intensivliyini tapaq. (49.18)-ə görə

$$W_{k\kappa} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left| \frac{e}{m\omega_{k\kappa}} (\vec{n}\vec{D}_{k\kappa}) \right|^2 \rho(\omega_{k\kappa})$$

keçid ehtimalıdır və burada

$$\vec{D}_{k\kappa} = -\frac{ie}{m\omega_{k\kappa}} \int \psi_k^{*(o)}(r) e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{\vec{p}} \psi_k^{(o)}(r) dV \quad (49.25)$$

düsturunu almışdıq. İntegral altındakı $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ vuruğunu sıraya ayırısaq

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 1 + i\vec{k}\vec{r} + \dots \quad (49.26)$$

(49.25) matris elemanını

$$\begin{aligned} \vec{D}_{k\kappa} &= -\frac{ie}{m\omega_{k\kappa}} \int \psi_k^{*(o)}(r) [1 + i\vec{k}\vec{r} + \dots] \hat{\vec{p}} \psi_k^{(o)}(r) dV = \\ &= -\frac{ie}{m\omega_{k\kappa}} \left\{ \int \psi_k^{*(o)}(r) \hat{\vec{p}} \psi_k^{(o)}(r) dV + i \int \psi_k^{*(o)}(r) (\vec{k}\vec{r}) \hat{\vec{p}} \psi_k^{(o)}(r) dV + \dots \right\} = \\ &= -\frac{ie}{\omega_{k\kappa}} \left\{ \int \psi_k^{*(o)}(r) \frac{\hat{\vec{p}}}{m} \psi_k^{(o)}(r) dV + i \int \psi_k^{*(o)}(r) (\vec{k}\vec{r}) \psi_k^{(o)}(r) dV + \dots \right\} = \\ &= -\frac{ie}{\omega_{k\kappa}} \frac{\vec{P}_{k\kappa}}{m} - \frac{ie}{\omega_{k\kappa}} \frac{1}{m} \left\{ (\vec{k}\vec{r}) \hat{\vec{p}} \right\}_{k\kappa} \end{aligned} \quad (49.27)$$

yazarıq. (49.27) ifadəsində birinci hədd elektrik dipol momentini və ikinci hədd isə maqnit dipol və kvadrupol momentə müvafiq olur. Erenfest teoreminə görə

$$\frac{\vec{P}_{k\kappa}}{m} = \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)_{k\kappa} = \frac{d\vec{r}_{k\kappa}(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \vec{r}_{k\kappa} e^{i\omega_{k\kappa}t} = i\omega_{k\kappa} \vec{r}_{k\kappa} \quad (49.28)$$

olduğundan

$$\vec{D}_{k\kappa}^{(1)} = \frac{e}{\omega_{k\kappa}} \omega_{k\kappa} \vec{r}_{k\kappa} = e\vec{r}_{k\kappa} = e \int \psi_k^{*(o)}(\vec{r}) \vec{r} \psi_k^{(o)}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (49.29)$$

elektrik dipol momentinin matris elemanı

$$\begin{aligned} \vec{D}_{k\kappa}^{(2)} &= -\frac{ie}{\omega_{k\kappa}} \frac{1}{m} \left\{ (\vec{k}\vec{r}) \hat{\vec{p}} \right\}_{k\kappa} = -\frac{ie}{\omega_{k\kappa}} \left\{ (\vec{k}\vec{r}) \frac{d\vec{r}}{dt} \right\}_{k\kappa} = \\ &= -\frac{ie}{\omega_{k\kappa}} \left\{ \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left((\vec{k}\vec{r}) \vec{r} \right)_{k\kappa} + \frac{1}{2} \left[\vec{k} \left[\vec{r} \frac{d\vec{r}}{dt} \right] \right]_{k\kappa} \right\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{ie}{2\omega_{k\kappa}} \left\{ i\omega_{k\kappa} \left((\vec{k}\vec{r}) \vec{F} \right)_{k\kappa} + \frac{1}{m} [\vec{k}\vec{L}]_{k\kappa} \right\} = \\
&= \frac{e}{2} \left((\vec{k}\vec{r}) \vec{F} \right)_{k\kappa} - \frac{ie}{2\omega_{k\kappa} m} [\vec{k}\vec{L}]_{k\kappa}
\end{aligned} \tag{49.30}$$

elektrik kvadrupol və maqnit dipol momentinin matris elementləri alınır. $\frac{\vec{k}}{\omega_{k\kappa}} = \frac{\vec{\theta}}{c}$ ($\vec{\theta}$ -şüalanma yönündə olan vahid vektordu) və

$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \vec{L}$ maqnit momentini nəzərə alsaq (49.30)-u

$$\vec{D}_{k\kappa}^{(2)} = \frac{e}{2} \left((\vec{k}\vec{r}) \vec{F} \right)_{k\kappa} + i[\vec{\theta} \quad \vec{\mu}]_{k\kappa} \tag{49.31}$$

kimi yazarıq. Beləliklə, \vec{D} -matris element

$$\vec{D}_{k\kappa} = \vec{D}_{k\kappa}^{(1)} + \vec{D}_{k\kappa}^{(2)}$$

olur. Burada

$$\begin{aligned}
\vec{D}_{k\kappa}^{(1)} &= e\vec{r}_{k\kappa} \\
\vec{D}_{k\kappa}^{(2)} &= \vec{k}Q_{k\kappa} + i[\vec{\theta} \quad \vec{\mu}]
\end{aligned} \tag{49.32}$$

$$Q = \frac{e}{2} \begin{vmatrix} x^2 & xy & xz \\ yx & y^2 & yz \\ zx & zy & z^2 \end{vmatrix}$$

olduğu üçün

$$\vec{D}_{k\kappa} = -e\vec{r}_{k\kappa} - \vec{k}Q_{k\kappa} + i[\vec{\theta} \quad \vec{\mu}]_{k\kappa} \tag{49.33}$$

elektrik dipol, elektrik kvadrupol və maqnit dipol momentlərinə uyğun gəlir. Bu həddlərin hesabına olan şüalanma elektrik dipol (E1), elektrik kvadrupol (Q2) maqnit dipol (M1) şüalanması adlanır.

Vahid saniyədə şüalanmanın orta enerjisi, şüalanmanın intensivliyini verir və şüalanmanın tam intensivliyi

$$\frac{dE}{dt} \equiv I = N_k \frac{4\omega_{k\kappa}^4}{3c^3} |\vec{D}_{k\kappa}|^2 \tag{49.34}$$

olur. Burada N_k k' həyacanlaşmış səviyyədə olan atomların sayıdır

$$N_k = C(T) e^{-\frac{E_k}{kT}}$$

Aşkırdır ki, bəzi şəraitdə kvadrupol və maqnit dipol şüalanmasının intensivliyi çox az olduqda, yalnız elektrik dipol momenti hesabına olan şüalanma baş verir. Nüvə fizikasında isə Q2 və Mİ şüalanmalarına təsadüf olunur.

§50. Işıqın mühitdən səpilməsi (dispersiya)

Işıq şüaları mühitdən keçdikdə, mühit onları udmaqla bərabər, həm də mühitin atomları tərəfindən səpilir. Bu zaman işıq dalğaları öz istiqamətini dəyişir. Mühitin sındırma əmsalı düşən işığın tezliyinə uyğun olaraq dəyişir. Bu hadisəyə dispersiya deyilir. Mühitin sındırma əmsalı dielektrik və maqnit nüfuzluğu ilə əlaqədardır və $\mu = 1$ mühitləri üçün Maksivell nəzəriyyəsinə görə sındırma əmsalı $n = \sqrt{\epsilon}$ -dir. Dielektrik sabiti ϵ öz növbəsində mühitin qütübləşməsi (polyarizasiyası) α ilə bağlıdır.

$$\epsilon = 1 + 4\pi\alpha \quad (50.1)$$

$$n^2 - 1 = 4\pi\alpha$$

Əgər 1 sm³-da N qədər atom varsa, onda $\alpha = N\beta$ olar və β atomun qütübləşməsi olur. Onda

$$n^2 - 1 = 4\pi N\beta$$

yazılar və polyarizasiya vektoru \vec{P} induksiya vektoru \vec{D} ilə əlaqədar olur qütübləşmə vektoru

$$\vec{D} = \vec{\epsilon} + 4\pi\vec{P} = n^2\vec{\epsilon}$$

$$\vec{P} = \frac{n^2 - 1}{4\pi} \vec{\epsilon} \quad (50.2)$$

şəkində olar. Digər tərəfdən atomların dipol momentlərinin cəmi polyarizasiya vektorunu xarakterizə edir.

$$\vec{P} = n\vec{D} = Ne \int \psi_k^*(r, t) \vec{r} \psi_k(r, t) dV$$

Dipol momentini

$$\vec{D} = \beta\vec{\epsilon} \quad (50.3)$$

kimi təsvir etmək olar. $\vec{\epsilon}$ -ışığın dalğasının dəyişən elektrik sahəsinin intensivliyidir. Z oxunu işığın yayılması istiqamətində yönəldə-

riksə, $\varepsilon_x = \varepsilon, \varepsilon_y = \varepsilon_z = 0$ olar, maqnit sahəsi v/c tərtibində olduğu üçün işıq dalğası $\varepsilon = \varepsilon_o \cos\left(\omega t - \frac{2\pi x}{\lambda}\right)$ ilə xarakterizə olunur. Görü-

nən işıq $\lambda \sim 10^{-5} sm, x = a_o = 10^{-8} sm$ xarakterizə olanda $\frac{x}{\lambda}$ həddi 10^{-3} tərtibdə olar və ona görə onu nəzərə almamaq olar. Nəticədə

$$\vec{\varepsilon} = \vec{\varepsilon}_o \cos \omega t$$

yaza bilərik. Dipol momenti

$$\vec{D} = \beta \vec{\varepsilon}_o \cos \omega t \quad (50.4)$$

şəklində olduğu üçün burada

$$\beta = \frac{n^2 - 1}{4\pi} \quad (50.5)$$

olar.

İşıq sahəsi mövcud olduqda atomun halı dəyişir, məcburi rəqslər meydana gəlir β -ni hesablamaq üçün zamandan asılı Şçrödinger tənliyinin həllindən istifadə edək və qeyristasionar həyacanlaşma nəzəriyyəsinin müddətlərini tətbiq edək. Şçrödinger tənliyinə görə n halının dalğa funksiyası

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \hat{H}_o \psi_n + \hat{V} \psi_n \quad (50.6)$$

tənliyinin həllidir. Burada \hat{H}_o işıq sahəsi olmayanda Hamilton operatorudu, \hat{V} işıq dalğası hesabına yaranan həyacanlaşmadı. (50.4) – ə görə bu həyacanlaşma

$$\hat{V} = e(\vec{r} \vec{\varepsilon}_o) \cos \omega t \quad (50.7)$$

olar. $\hat{V} = 0$ olanda (50.6) tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n^{(o)}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_o \psi_n^{(o)}(\vec{r}, t)$$

şəklində yazırıq və

$$\begin{aligned} \hat{H}_o \psi_n^{(o)}(\vec{r}) &= E_n \psi_n^{(o)}(\vec{r}) \\ \psi_n^{(o)}(\vec{r}, t) &= \psi_n^{(o)}(\vec{r}) e^{i\omega_n t}, \omega_n = \frac{E_n}{\hbar} \end{aligned} \quad (50.8)$$

stasionar hal üçün Şçrödinger tənliyinin həlli olur. İşıq sahəsi ol-

duqda (50.6) tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_o \psi_n(\vec{r}, t) + e \varepsilon_o r \cos \omega t \psi_n(\vec{r}, t)$$

yazılar. Bu tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[\hat{H}_o + e \varepsilon_o r \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right] \psi_n(\vec{r}, t) \quad (50.9)$$

kimi yazaraq, onun həllini

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n^{(o)}(r) e^{-i\omega_n t} + U_n(r) e^{-i(\omega_n - \omega)t} + \mathcal{G}_n(r) e^{-i(\omega_n + \omega)t} \quad (50.10)$$

axtaraq. Bu həlli (50.9)-da yerinə yazsaq

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n^{(o)}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \hbar(\omega_n - \omega) \mu_n e^{-i(\omega_n - \omega)t} + \hbar(\omega_n + \omega) \mathcal{G}_n e^{-i(\omega_n + \omega)t} =$$

$$= \hat{H}_o \psi_n^{(o)}(\vec{r}, t) + \frac{1}{2} e \varepsilon_o r \psi_n^{(o)}(\vec{r}) e^{-i(\omega_n + \omega)t} + \frac{1}{2} e \varepsilon_o r \psi_n^{(o)}(\vec{r}) e^{-i(\omega_n - \omega)t} +$$

$$(50.11)$$

$$+ \hat{H}_o u_n e^{-i(\omega_n - \omega)t} + \hat{H}_o \mathcal{G}_n e^{-i(\omega_n + \omega)t} + \frac{1}{2} e \varepsilon_o r u_n e^{-i\omega t} +$$

$$+ \frac{1}{2} e \varepsilon_o r \mathcal{G}_n e^{-i\omega t} + \frac{1}{2} e \varepsilon_o r u_n e^{-i(\omega_n - 2\omega)t} + \frac{1}{2} e \varepsilon_o r \mathcal{G}_n e^{-i(\omega_n + 2\omega)t}$$

alarıq. Bu ifadədə $\varepsilon_o r u_n$ və $\varepsilon_o r \mathcal{G}_n$ hədləri, başqa hədlərə görə kiçik olduğu üçün onlardan vaz keçərik. Onda (50.11)-dən

$$\hbar(\omega_n - \omega) \mu_n e^{-i(\omega_n - \omega)t} + \hbar(\omega_n + \omega) \mathcal{G}_n e^{-i(\omega_n + \omega)t} =$$

$$= \hat{H}_o u_n e^{-i(\omega_n - \omega)t} + \hat{H}_o \mathcal{G}_n e^{-i(\omega_n + \omega)t} + \frac{e}{2} \varepsilon_o r \psi_n^{(o)} e^{-i(\omega_n + \omega)t} + \frac{e}{2} \varepsilon_o r \psi_n^{(o)} e^{-i(\omega_n - \omega)t}$$

$$\hbar(\omega_n - \omega) \mu_n e^{i\omega t} + \hbar(\omega_n + \omega) \mathcal{G}_n e^{-i\omega t} = \hat{H}_o u_n e^{i\omega t} + \hat{H}_o \mathcal{G}_n e^{-i\omega t} +$$

$$+ \frac{e}{2} \varepsilon_o r \psi_n^{(o)} e^{-i\omega t} + \frac{e}{2} \varepsilon_o r \psi_n^{(o)} e^{i\omega t}$$

əldə edərik. Buradan iki tənlik əldə edilir:

$$\hbar(\omega_n - \omega) \mu_n = \hat{H}_o u_n + \frac{e}{2} \varepsilon_o r \psi_n^{(o)}(r) \quad (50.12)$$

$$\hbar(\omega_n + \omega) \mathcal{G}_n = \hat{H}_o \mathcal{G}_n + \frac{e}{2} \varepsilon_o r \psi_n^{(o)}(r)$$

(50.12) tənliklərinin həllini $\hat{H}_0 \psi_k^{(0)} = E_k \psi_k^{(0)}$ tənliyinin həllinin superpozisiyası kimi axtaraq

$$\begin{aligned} u_n(r) &= \sum_k a_{nk} \psi_k^{(0)} \\ g_n(r) &= \sum_k b_{nk} \psi_k^{(0)} \end{aligned} \quad (50.13)$$

Bunları (49.12) tənliklərində yerinə yazsaq

$$\begin{aligned} \hbar \sum_k a_{nk} (\omega_n - \omega_k - \omega) \psi_k^{(0)} &= \frac{e}{2} \varepsilon_0 r \psi_k^{(0)}(r) \\ \hbar \sum_k b_{nk} (\omega_n - \omega_k + \omega) \psi_k^{(0)} &= \frac{e}{2} \varepsilon_0 r \psi_k^{(0)}(r) \end{aligned} \quad (50.14)$$

alınar. (50.14)-i soldan $\psi_k^{*(0)}$ -ə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallasaq

$$\sum_k \hbar (\omega_n - \omega_k - \omega) a_{nk} \int \psi_k^{*(0)}(r) \psi_k^{(0)}(r) dV = \frac{e}{2} \int \psi_k^{*(0)}(r) \varepsilon_0 r \psi_n^{(0)}(r) dV$$

$$\sum_k \hbar (\omega_n - \omega_k + \omega) b_{nk} \int \psi_k^{*(0)}(r) \psi_k^{(0)}(r) dV = \frac{e}{2} \int \psi_k^{*(0)}(r) \varepsilon_0 r \psi_n^{(0)}(r) dV$$

əldə edərik. Buradan

$$a_{nk'} = - \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{k'n}}{2\hbar(\omega_n - \omega_{k'} - \omega)}$$

$$b_{nk'} = - \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{k'n}}{2\hbar(\omega_n - \omega_{k'} + \omega)}$$

yadakı $\omega_{nk} = \omega_n - \omega_k$ işarəsi qəbul etsək,

$$a_{nk} = - \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{nk}}{2\hbar(\omega_{nk} - \omega)} \quad (50.15)$$

$$b_{nk} = - \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{nk}}{2\hbar(\omega_{nk} + \omega)}$$

alarıq. Burada

$$\vec{d}_{nk} = -e \int \psi_k^{*(0)} \vec{r} \psi_n^{(0)} dV$$

elektrik dipol momentinin matris elemanıdır. a_{nk} və b_{nk} ifadələrini yerinə yazıb, həyacanlaşmış halın dalğa funksiyasını taparıq:

$$\begin{aligned} \psi_n(\vec{r}, t) = & \psi_n^{(0)}(\vec{r}, t) - \frac{e^{-i(\omega_n - \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} - \omega} \psi_k^{(0)}(r) - \\ & - \frac{e^{-i(\omega_n + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} + \omega} \psi_k^{(0)}(r) \end{aligned} \quad (50.16)$$

Beləliklə, $\vec{\varepsilon}$ sahəsinin təsiri ilə $\psi_n^{(0)}(r, t)$ halı, $\psi_n(\vec{r}, t)$ halına keçir və atomun d_{nk} dipol momenti meydana çıxır:

$$d_{nk} = - \int \psi_k^*(\vec{r}, t) \mathbf{r} \psi_n(\vec{r}, t) dV = -e \int r |\psi_n(\vec{r}, t)|^2 dV \quad (50.17)$$

burada

$$\begin{aligned} \psi_n^* = & \psi_n^{*(0)}(\vec{r}, t) - \frac{e^{i(\omega_n - \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} - \omega} \psi_k^{*(0)}(r) - \\ & - \frac{e^{-i(\omega_n + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} + \omega} \psi_k^{*(0)}(r) \end{aligned} \quad (50.18)$$

(50.16) və (50.18) ifadələrini (50.17)-də yerinə yazsaq

$$\begin{aligned} \dot{\vec{d}}_{nn}(t) = & \vec{d}_{nn}(\vec{r}) - \frac{e^{i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} - \omega} - \frac{e^{-i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} + \omega} - \\ & - \frac{e^{i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{nk}) \vec{d}_{kn}^*}{\omega_{nk} - \omega} - \frac{e^{-i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} + \omega} = \vec{d}_{nn}(\vec{r}) - \\ & - \frac{e^{i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} - \omega} + \frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} + \omega} \right) - \frac{e^{-i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{nk}^*}{\omega_{nk} + \omega} + \frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{nk}) \vec{d}_{kn}^*}{\omega_{nk} - \omega} \right) \end{aligned}$$

əldə edərək. Ermitlik şərtinə görə $d_{nk}^* = d_{kn}$ olduğu üçün

$$\begin{aligned} \vec{d}_{nn}(t) = & \vec{d}_{nn}(\vec{r}) - \frac{1}{\hbar} \sum_k \left(\frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} - \omega} + \frac{(\vec{\varepsilon}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} + \omega} \right) \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} = \\ = & \vec{d}_{nn}(\vec{r}) + \vec{d}'_{nn}(t) \end{aligned}$$

Buradan

$$\vec{d}'_{nn}(t) = \vec{d}_{nn}(t) - \vec{d}_{nn}(\vec{r}) \quad (50.20)$$

yazarıq. (50.7)-yə görə (50.20)-ni

$$\vec{d}' = \beta_{ij} \vec{\varepsilon}_o \cos \omega t \quad (50.21)$$

şəkində yazı bilirik. Burada β_{ij} qütübləşmə əmsalı ümumi halda atomun qütübləşmə tenzorudur və onun komponentlərinin sayı doqquz dənədir. Yəni, β_{ij} -tenzoru

$$\beta_{ij} = \begin{pmatrix} \beta_{xx} & \beta_{xy} & \beta_{xz} \\ \beta_{yx} & \beta_{yy} & \beta_{yz} \\ \beta_{zx} & \beta_{zy} & \beta_{zz} \end{pmatrix} \quad (50.22)$$

olur və onlar

$$(d'_{nn})_x = \text{Re} \{ \beta_{xx} \varepsilon_{ox} e^{i\omega x} + \beta_{xy} \varepsilon_{oy} e^{i\omega x} + \beta_{xz} \varepsilon_{oz} e^{i\omega x} \}$$

$$(d'_{nn})_y = \text{Re} \{ \beta_{yx} \varepsilon_{ox} e^{i\omega x} + \beta_{yy} \varepsilon_{oy} e^{i\omega x} + \beta_{yz} \varepsilon_{oz} e^{i\omega x} \}$$

$$(d'_{nn})_z = \text{Re} \{ \beta_{zx} \varepsilon_{ox} e^{i\omega x} + \beta_{zy} \varepsilon_{oy} e^{i\omega x} + \beta_{zz} \varepsilon_{oz} e^{i\omega x} \}$$

ifadəsindən tapılan komponentlərdi. Re-real cismi göstərir. β -lar

$$\beta_{xx} = -\frac{1}{\hbar} \sum_k \left(\frac{(d_{kn})_x (d_{kn})_x}{\omega_{nk} - \omega} + \frac{(d_{kn})_x (d_{kn})_x}{\omega_{nk} + \omega} \right)$$

$$\beta_{xy} = -\frac{1}{\hbar} \sum_k \left(\frac{(d_{kn})_x (d_{kn})_y}{\omega_{nk} - \omega} + \frac{(d_{kn})_x (d_{kn})_y}{\omega_{nk} + \omega} \right) \quad (50.23)$$

və sairədirlər. Bu tenzor ermit tenzordu ($\beta_{xy} = \beta_{yx}^*$), ona görə də onun diaqonal həddləri həqiqidir.

Özəl halda $d'_{nn}(t)$ momentinin fazası və istiqaməti işığın fazası və istiqamətində olarsa, polarizasiya tenzorunun $\beta_{xx} = \beta_{yy} = \beta_{zz} = \beta$ olar və yerdə qalan komponentləri sıfır olur. Yə'ni, bu halda əmsallar skalyar olar:

$$\beta = -\frac{1}{\hbar} \sum_k \left(\frac{d_{kn} d_{kn}}{\omega_{nk} - \omega} + \frac{d_{kn} d_{kn}}{\omega_{nk} + \omega} \right) \quad (50.24)$$

Buradan ($\omega_{nk} = -\omega_{kn}$)

$$\beta = \frac{2}{\hbar} \sum_k \frac{\omega_{kn} |d_{kn}|^2}{\omega_{nk}^2 - \omega^2} \quad (50.25)$$

alarıq. Atomun qütübləşmə əmsali

$$\beta = \frac{e^2}{m \hbar e^2} \sum_k \omega_{kn} |d_{kn}|^2 \frac{1}{\omega_{nk}^2 - \omega^2}$$

şəklində yazılar. Yə'ni,

$$\beta = \frac{e^2}{m} \sum_k \frac{f_{nk}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2} \quad (50.26)$$

olur. Burada

$$f_{nk} = \frac{2m\omega_{kn}}{\hbar e^2} |d_{kn}|^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega_{kn} |X_{kn}|^2 \quad (50.27)$$

f_{nk} -kəmiyyəti fiziki mə'nə kəsb edən, bir kəmiyyət olub, osilyatorun qüvvəsi (gücü) adlanır. Bu kəmiyyət spontan (özbaşına) şüalanmanın intensivliyini müəyyən edir:

$$f_{nk} = \frac{3mc^3}{2e^2 \omega_{kn}^3} A_{kn} \quad (50.28)$$

Göründüyü kimi osilyatorun qüvvəsi klassik fizikadan fərqli olaraq (klassik fizikada f_k say olduğu üçün həmişə müsbətdir) həm müsbət və həm də mənfi ola bilər. Doğurdan da əgər dalğa funksiyası bəllidirsə, mənfi olmamaq ehtimalı olur. Təcrübə göstərir ki, f_{nk} kəsr qiymətləri də ala bilər. Onun müsbət və ya mənfi dəyərlər alması aşkar olur.

$\omega_k > 0$ olanda $f_{nk} > 0$, $\omega_{kn} < 0$ olanda isə $f_{nk} < 0$ olur.

Əgər atom n -səviyyəsindən əlavə, başqa səviyyələrdə də olursa, tam qütübləşməni tapmaq üçün atomun n -səviyyəsində olma ehtimalını (49.26)-ya vurub, cəmləmək lazımdır. Onda 1 sm³ qazın qütübləşməsi

$$\alpha = \frac{e^2 N}{m} \sum_n \sum_k W_n \frac{f_{nk}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2} = N\beta \quad (50.29)$$

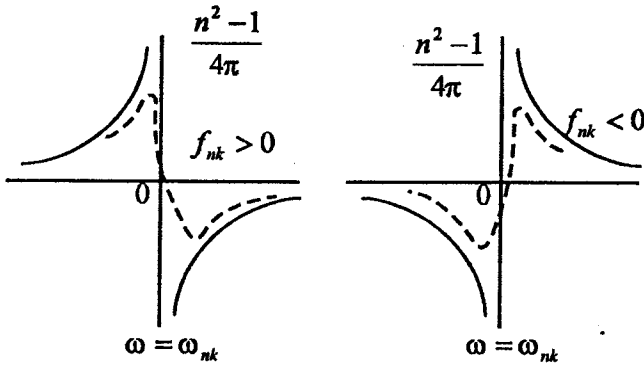
olar. Burada N 1 sm³ olan atomların sayıdır. Mühitin sındırma əmsali

$$n^2(\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2 N}{m} \sum_n \sum_k W_n \frac{f_{nk}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2} \quad (50.30)$$

yazılar. Əgər atom həyəcanlaşmış n-halında olarsa, onda k hallarından eləsi olar ki,

$$\omega_{nk} = \frac{E_n}{\hbar} - \frac{E_k}{\hbar}, \omega_{nk} = -\omega_{kn}$$

$E_k < E_n$ olsun. Yəni, $\omega_{nk} < 0$ olsun. Onda da $f_{nk} < 0$ olar ki, buna mənfi dispersiya (klassik fizikada bu dispersiya yoxdur) deyilir. Dispersiya qrafikini şəkil I.23-də göstərək.



Şəkil I.23. İşıq atomlardan səpilməsi-dispersiya.

Şəkil I.24-də solda müsbət, sağda isə mənfi dispersiya əyriləri göstərilmişdi. Bu dispersiya əyrilərinin hər birinin normal və anomal qisimləri var. Düşən işıq tezliyi artdıqca mühitin sındırma əmsalı artırsa $\left(\frac{dn}{d\omega} > 0\right)$,

belə dispersiya normal (ışığın yeddi rəngə ayrılması), əgər müəyyən oblastda $\frac{dn}{d\omega} < 0$ olarsa, belə dispersiyaya

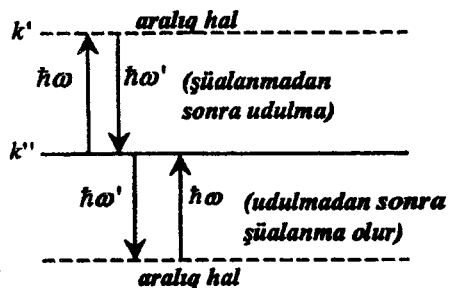
anomal dispersiya deyilir. Adətən anomal dispersiya oblastı udma oblastı ilə üst-üstə düşür.

(50.26) düsturuna görə anomal dispersiya elektronun məxsusi tezliyi ilə düşən işıq tezliyi eyni olanda deyil (klassikada belədir),

ışığın tezliyinin keçid tezliklərinin fərqinə bərabər olanda müşahidə olunur.

Özəl halda mənfi dispersiya ilə müsbət dispersiya oblastları harmonik osilyator üçün üst-üstə düşür.

Dispersiya hadisəsini enerji anlamında şəkil I.24-də göstərilən kimidə təsvir etmək olar.



Şəkil I.24. Işığın səpilməsinin enerji sxemi.

ω - düşən işığın tezliyi, ω' - səpələn işığın tezliyidir.

Təbiətdə hər iki dispersiya müşahidə olunmuşdur.

§51. Raman effekti (Kombinasion səpilmə).

Işıq dalğası maye və bərk cisimlərdən səpilərəkən elastiki səpilmə ilə yanaşı, elastiki olmayan səpilmədə baş verə bilər. Bu zaman atom və molekulların rəqsləri nəticəsində səpələn işığın tezliyi, düşən işığın tezliyindən fərqlənir və buna görə də bu cür səpilmədə tezlik dəyişmiş olur, səpələn işığın tezliyi bir neçə tezlikdən ibarət olur. Yə'ni, səpilmədə tezliklər kombinasiyası yaranır. Bu cür qeyri-elastiki səpilməyə Raman effekti və ya kombinasion səpilmə deyilir. Dispersiyadan fərqli olaraq Raman effektində elektronlar düşən fotonu udub, yeni hala keçərək, udulan fotonu yenidən buraxaraq başqa bir səviyyəyə keçir. Başqa sözlə, düşən işığın enerjisi $\hbar\omega$ - dırsa, səpələndən sonra onun enerjisi $\hbar\omega' = \hbar(\omega_{kn} + \omega)$ və ya $\hbar\omega'' = \hbar(\omega_{kn} - \omega)$ olur. Ona görə də bu növ səpilmə kombinasion səpilmə adlanır. İndi bu səpilmənin nəzəriyyəsi ilə tanış olaq. Əgər səpilmədən öncə sistem n-halındadırsa, onun dalğa funksiyası

$$\begin{aligned} \psi_n(\vec{r}, t) = & \psi_n^{(o)}(\vec{r})e^{-i\omega_n t} - \frac{e^{-i(\omega_n - \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} - \omega} \psi_k^{(o)}(r) - \\ & - \frac{e^{-i(\omega_n + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} + \omega} \psi_k^{(o)}(r) \end{aligned} \quad (51.1)$$

şəklində olur. m- halının dalğa funksiyası isə

$$\begin{aligned} \psi_m^*(\vec{r}, t) = & \psi_m^{*(o)}(\vec{r})e^{i\omega_m t} - \frac{e^{-i(\omega_m - \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{km}^*}{\omega_{mk} - \omega} \psi_k^{*(o)}(\vec{r}) - \\ & - \frac{e^{-i(\omega_m + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{km}^*}{\omega_{mk} + \omega} \psi_k^{*(o)}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (51.2)$$

funksiyasıdır. N-səviyyəsindən m-səviyyəsinə keçid olanda elektrik dipol momenti meydana gəlir ki, onuda

$$\bar{D}_{mn}(t) = - \int \psi_m^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi_n(\vec{r}, t) dV \quad (51.3)$$

şəklində təmsil etmək olar. (51.1)-lə (51.2)-ni bir-birinə vursaq

$$\begin{aligned} \psi_m^*(\vec{r}, t) \psi_n(\vec{r}, t) = & \psi_m^{*(o)}(\vec{r}) \psi_n^{(o)}(\vec{r}) e^{i(\omega_m - \omega_n)t} - \\ & - \frac{e^{-i(\omega_m - \omega_n)t} e^{-i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} - \omega} \psi_m^{*(o)} \psi_k^{(o)} - \frac{e^{-i(\omega_m + \omega_n)t} e^{i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} + \omega} \psi_m^{*(o)} \psi_k^{(o)} - \\ & - \frac{e^{i(\omega_m - \omega_n)t} e^{-i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{km}^*}{\omega_{mk} - \omega} \psi_k^{*(o)} \psi_n^{(o)} = \frac{e^{i(\omega_m - \omega_n)t} e^{i\omega t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{km}^*}{\omega_{mk} + \omega} \psi_k^{*(o)} \psi_n^{(o)} = \\ = & e^{i\omega_m t} \psi_m^{*(o)} \psi_n^{(o)} - \frac{e^{i(\omega_m + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} - \omega} \psi_m^{*(o)} \psi_k^{(o)} - \\ & - \frac{e^{i(\omega_m + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{km}^*}{\omega_{mk} - \omega} \psi_k^{*(o)} \psi_n^{(o)} - \frac{e^{i(\omega_m + \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} + \omega} \psi_m^{*(o)} \psi_k^{(o)} - \\ & - \frac{e^{i(\omega_m - \omega)t}}{2\hbar} \sum_k \frac{\bar{\epsilon}_o \vec{d}_{kn}^*}{\omega_{mk} - \omega} \psi_k^{*(o)} \psi_n^{(o)} \end{aligned}$$

alarıq. d-lərin ermitliyindən istifadə etsək, $d_{kn}^* = d_{mk}$ induşə olunmuş dipol momenti üçün

$$\begin{aligned} \bar{D}_{mn}(t) = & \bar{d}_{mn} e^{i\omega_{mn}t} - \frac{1}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{kn}) \bar{d}_{mk}}{\omega_{mk} - \omega} + \frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{mk}) \bar{d}_{kn}}{\omega_{mk} + \omega} \right) e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} - \\ & - \frac{1}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{kn}) \bar{d}_{mk}}{\omega_{mk} + \omega} + \frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{mk}) \bar{d}_{kn}}{\omega_{mk} - \omega} \right) e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} \end{aligned}$$

əldə edərik. (50.4)-ə görə $\bar{D}_{mn}(t)$ -ni

$$\bar{D}_{mn}(t) = \bar{d}_{mn} e^{i\omega_{mn}t} + \bar{d}_{mn}^{(+)} e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} + \bar{d}_{mn}^{(-)} e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} \quad (51.5)$$

yaza bilərik. Burada

$$\bar{d}_{mn}^{(+)} = -\frac{1}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{kn}) \bar{d}_{mk}}{\omega_{mk} - \omega} + \frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{mk}) \bar{d}_{kn}}{\omega_{mk} + \omega} \right) \quad (51.6)$$

$$\bar{d}_{mn}^{(-)} = -\frac{1}{2\hbar} \sum_k \left(\frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{kn}) \bar{d}_{mk}}{\omega_{mk} + \omega} + \frac{(\bar{\epsilon}_o \bar{d}_{mk}) \bar{d}_{kn}}{\omega_{mk} - \omega} \right)$$

Yə'ni, (51.5) ifadəsinə uyğun olaraq, işığın qeyrielastici səpilməsi nəticəsində zamana bağlı olan \bar{d}_{mn} dipol momenti ilə yanaşı əlavə induşə olunmuş $\bar{d}_{mn}^{(+)}$ və $\bar{d}_{mn}^{(-)}$ momentləri meydana gəlir.

Mə'lumdur ki, bir saniyədə şüalanma enerjisi

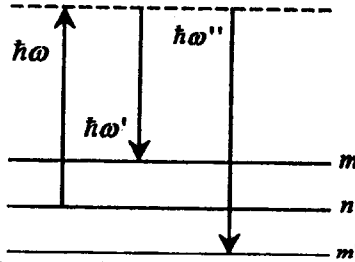
$$\frac{dE}{dt} = \frac{4\omega_{mn}^4}{3c^3} |\bar{D}_{mn}|^2 \quad (51.7)$$

olduğuna görə enerjinin (51.7) ifadəsində ω_{mn} əvəzinə Raman effektində üç cürə tezlik alırıq:

$$\begin{aligned} \omega &= \omega_{mn} = \omega_m - \omega_n \\ \omega' &= \omega_{mn} + \omega = \omega_m - \omega_n + \omega \\ \omega'' &= \omega_{mn} - \omega = \omega_m - \omega_n - \omega \end{aligned} \quad (51.8)$$

Səpələn işığın tezliyi düşən işığın tezliyindən kiçik olarsa $\omega' = \omega - \omega_{mn} < \omega$, bu xəttlərə «*stoks*» xəttləri, səpələn işığın tezliyi $\omega'' = \omega + \omega_{mn} > 0$ -dırsa bu xəttlərə «*antistoks*» xəttləri deyilir.

Bu tezlikləri səviyyələr arasında keçid uyğun olaraq şəkil I.25-dəki kimi göstərerik.



Şəkil I.25. Kombinasiyon səpilmədə keçidlər:

$$\omega' = \omega - \omega_{mn} = \omega - \omega_m - \omega_n; \omega'' = \omega + \omega'_{mn} = \omega + \omega_m + \omega_n$$

(51.7) ifadəsinə görə Raman effektində şüalanmanın intensivliyi iki növ xəttə uyğun gəlir. Bunlar

$$I_b = \frac{4(\omega_{mn} + \omega)^4}{3c^3} N_m |D_{mn}^{(+)}|^2 \quad (51.9)$$

bənövşəyi şüalanmanı

$$I_q = \frac{4(\omega_{mn} - \omega)^4}{3c^3} N_m |D_{mn}^{(-)}|^2 \quad (51.10)$$

isə qırmızı şüalanmanı təyin edən şüalanma intensivliyidir.

N_m sayı m səviyyəsində elektronların sayıdır:

$$N_m \sim \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_m}{KT}} - 1}$$

T artdıqca bənövşəyi şüalanma spektrinin intensivliyi artır. Bu nəticə təcrübədə də müşahidə olunur.

Mollekulların rəqslərinin tezliyi onun quruluşu ilə əlaqədardır. Kombinasiyon səpilmənin tezliyi, görünən işığın tezliyinin dəyişməsinə müəyyən edir. Optik aktiv və aktiv olmayan mollekulların rəqsləri görünən işığın tezliyi oblastında Raman effektindən asanlıqla təyin oluna bilər.

§52. Seçmə qaydası

Şüa udma və buraxma, səviyyələri arasında elektron keçidləri hesabına olur. E_k və E_k səviyyələrin olması halında, keçid tezliyinin udulub və buraxılması müəyyən qanunauyğunluğa tabe olur.

Bu qanunauyğunluq seçmə qaydası adlanır. Seçmə qaydasına görə $E_k \leftarrow E_k$ keçidlərindən mümkün olanları tapılır və şüa udulub və buraxılması baş verir.

Osilyatorun şüa udub və buraxması üçün seçmə qaydası enerji təsvirində verilmiş osilyatorun matris elemanı

$$x_{n'n} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left\{ \sqrt{\frac{n'+1}{2}} \delta_{n'+1,n} + \sqrt{\frac{n'}{2}} \delta_{n'-1,n} \right\}$$

tapılır. Bu matris elemanı sıfırdan fərqli olan $X_{n'N} \neq 0$ halı o vaxt olurki

$$n = n' \pm 1$$

olsun. Buradan

$$n' - n = \Delta n = \mp 1 \quad (52.1)$$

yazarıq. Yə'ni, kvant ədədi -1 və +1 qiymətlər alanda matris elemanı sıfırdan fərqli olar. Başqa sözlə, qonşu səviyyələr arasında keçidlər olur. Bu halda keçid tezliyi $\omega = \omega_0 (n' - n) = \mp \omega_0$ osilyatorun məxsusi tezliyinə uyğun gəlir. (52.1) ifadəsi osilyator üçün seçmə qaydası olur. Bu seçmə qaydasına görə $\Delta n = \mp 1$ olanda osilyator ω_0 məxsusi tezliyə bərabər olan şüa udar və ya buraxar. Bu seçmə qaydasından n kvant ədədinin böyük qiymətlərində kənara çıxmaqlar müşahidə olunur.

Optik elektron üçün seçmə qaydasını tapanq. Atomun dalğa funksiyası

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (52.2)$$

şəklindədir və dipol, multipol şüalanmanı müəyyən edən qadağan olmayan keçidləri tapmaq imkanı verir.

Momentlərin matris elemanlarını tapmaq üçün x,y,z yerinə

$$\begin{aligned} X &= x + iy = r \sin \vartheta e^{i\varphi} \\ Y &= x - iy = r \sin \vartheta e^{-i\varphi} \end{aligned} \quad (52.3)$$

$$Z = z$$

kombinasiyalarını götürək. Onda (52.2)-yə görə matris elemanı

$$D_{k'k} = \int \psi_{k'}^* \vec{D} \psi_k dv$$

olduğu üçün

$$\begin{aligned}
 X_{nlm,n'l'm'} &= \int_0^{\infty} R_{nl} R_{n'l'} r^3 dr \int_0^{\pi} P_l^m P_{l'}^{m'} \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi + i\varphi} d\varphi \\
 Y_{nlm,n'l'm'} &= \int_0^{\infty} R_{nl} R_{n'l'} r^3 dr \int_0^{\pi} P_l^m P_{l'}^{m'} \sin^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi - i\varphi} d\varphi \\
 Z_{nlm,n'l'm'} &= \int_0^{\infty} R_{nl} R_{n'l'} r^3 dr \int_0^{\pi} P_l^m P_{l'}^{m'} \sin \theta \cos \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi
 \end{aligned} \tag{52.4}$$

yazılar. φ -yə görə inteqral asanlıqla açılır:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi \pm i\varphi} d\varphi &= 2\pi \delta_{m', \mp 1, m} \\
 \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi &= 2\pi \delta_{m', m}
 \end{aligned} \tag{52.5}$$

Əgər

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} R_{nl} R_{n'l'} r^3 dr &= J_{nl, n'l'} \\
 \int_0^{\pi} P_l^m P_{l'}^{m'} \sin^2 \theta d\theta &= P'_{lm, l'm'} \\
 \int_0^{\pi} P_l^m P_{l'}^{m'} \sin \theta \cos \theta d\theta &= P_{lm, l'm'}
 \end{aligned}$$

işarələri qəbul etsək, (52.4) ifadələrini

$$\begin{aligned}
 X_{nlm,n'l'm'} &= 2\pi J_{nl, n'l'} P'_{lm, l'm'} \delta_{m, m'-1} \\
 Y_{nlm,n'l'm'} &= 2\pi J_{nl, n'l'} P'_{lm, l'm'} \delta_{m, m'+1} \\
 Z_{nlm,n'l'm'} &= 2\pi J_{nl, n'l'} P_{lm, l'm'} \delta_{m, m'}
 \end{aligned} \tag{52.6}$$

şəklində yazmaq olar. (52.6)-dan maqnit kvant ədədi m üçün seçmə qaydasını almış oluruq. Yəni $X_{nlm,n'l'm'}$, $Y_{nlm,n'l'm'}$ və $Z_{nlm,n'l'm'}$ matris elemanları, maqnit kvant ədədinin $\Delta m = m - m' = 0, \mp 1$ qiymətlərində sıfırdan fərqli olur. Deməli,

$$\Delta m = 0, \mp 1 \quad (52.7)$$

olanda keçid ola bilər. $Z_{nlm, n'l'm'}$ -in matris elemanınım sıfırdan fərqli qiymətini tapmaqdan ötəri $m = m'$ halında

$$P_{lm, l'm'} = \int_0^\pi P_l^m P_l^{m'} \sin \theta \cos \theta d\theta$$

ifadəsində $x = \cos \theta$ göstərsək, onu

$$P_{lm, l'm'} = \int_{-1}^{+1} x P_l^m(x) P_l^{m'}(x) dx \quad (52.8)$$

kimi yaza bilərik. Lejandr polinomunun xassəsinə görə

$$x P_l^m(x) = a_{lm} P_{l+1}^m(x) + b_{lm} P_{l-1}^m(x) \quad (52.9)$$

olduğu üçün (a və b-lər sabitlərdi) (52.8) ifadəsinin ortoqonallığından istifadə edərixək

$$P_{lm, l'm'} = a_{lm} \delta_{l', l+1} + b_{lm} \delta_{l', l-1} \quad (52.10)$$

şəklində əldə edirik. Buradan

$$\Delta l = l' - l = \mp 1$$

seçmə qaydasını alarıq. Əgər sferik funksiyaların

$$(1-x^2)^{\frac{1}{2}} P_l^m(x) = \alpha_{lm} P_{l-1}^{m-1}(x) + \beta_{lm} P_{l+1}^{m-1}(x)$$

xassəsindən istifadə etsək

$$P_{lm, l'm'} = a_{lm} \delta_{l-1, l'} + b_{lm} \delta_{l+1, l'}$$

alarıq və buradan da orbital kvant ədəi üçün yenədə seçmə qaydasını

$$\Delta l = l' - l = \pm 1 \quad (52.11)$$

kimi alarıq. Yə'ni optik elektronların bir səviyyədən başqa səviyyəyə keçidi, qonşu səviyyələr arasında mümkün olur və $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ orbital momentin dəyişimi baş verir. Başqa sözlə, optik keçidlər s ilə p, p ilə d və d ilə f termləri arasında baş verir. Beləliklə, maqnit kvant ədədi (52.7)-yə görə

$$\Delta m = 0, \mp 1$$

orbital kvant ədədi isə (52.11)-ə görə

$$\Delta l = \pm 1$$

şəklində dəyişir. (52.11) seçmə qaydasından istifadə etsək, matrislərin vurulması qaydasını tətbiq edərək

$$(x^2)_{l'l} = \sum_{l''} (x)_{l'l''} (x)_{l''l}$$

matris elemanının kvadratını yazı bilirik. Onda

$$l'' = l \pm 1$$

$$\text{və } l' = l'' \pm 1$$

olduğu üçün, buradan

$$\begin{aligned} l' = l, \Delta l = 0 \\ \text{və } l' = l \pm 2, \Delta l = \pm 2 \end{aligned} \quad (52.12)$$

alarıq. Deməli, kvadurupol momentin dəyişməsi $l' = l$ olanda və ya $\Delta l' = \pm 2$ olanda baş verir. Eyni üsulla maqnit momentinin dəyişməsi

$$l' = l, \Delta l = 0$$

$$\Delta m = m' - m = \pm 1$$

olur. Böyləcə, orbital kvant ədədi və maqnit kvant ədədləri üçün

$$\Delta l = 0$$

$$\Delta l = \pm 2 \quad (52.13)$$

$$\Delta m = \pm 1$$

qiymətləri alanda, bu cürə seçmə qaydasına görə kvadurupol və maqnit keçidləri baş verir. Bu keçidlərə uyğun olaraq maqnit və kvadurupol şüalanması olur.

§53. Sərbəst zərrəciyin və atomun maqnit sahəsində davranışı. Zeeman effekti

Bu paraqrafda xarici maqnit sahəsində sərbəst zərrəciyin hərəkətini və atomun enerji səviyyələrinin dəyişilməsini araşdırıraq.

Öncə fərz edək ki, yüklü zərrəcik bircins maqnit sahəsində hərəkət edir və maqnit sahəsi z oxu boyunca yönəlmişə $B_x = B_y = 0$ və $B_z = B$ olar. Belə sahə üçün vektor-potensial

$$A_x = -yB, A_y = A_z = 0$$

şəklində seçilə bilir. Onda $\vec{B} = \text{rot}\vec{A} = [\vec{\nabla}A]$ ifadəsindən maqnit sahəsinin intensivliyi üçün

$$B_x = B_y = 0, B_z = -\frac{\partial A_x}{\partial y} = B$$

əldə edərək. Əgər mümkün olan başqa sahələrdən vaz keçərixsə, stasionar halda belə maqnit sahəsində olan zərrəcik üçün Şrödinger tənliyi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{ie\hbar}{mc} yB \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{e^2}{2mc} y^2 B^2 \psi = E\psi \quad (53.1)$$

şəklini alar. Bu tənlikdə ψ -ni dəyişənlərə ayırmaq mümkün olur və ona görə

$$\psi(x, y, z) = e^{i(c_1 x + c_2 z)} \psi(y) \quad (53.2)$$

(burada C_1 və C_2 sabitlərdi) kimi seçək. (53.2)-ni (53.1)-də yerinə yazmış olsaq, $Y(y)$ üçün

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{e\hbar c_1}{mc} yB Y(y) + \frac{e^2 B^2}{2mc} y^2 Y(y) = \\ & = \left(E - \frac{\hbar^2 c_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2 c_2^2}{2m} \right) Y(y) \end{aligned} \quad (53.3)$$

tənliyi alınar. Bu tənlikdə

$$\begin{aligned} y &= y' - \frac{c\hbar c_1}{eB} \\ \omega_o &= \frac{eB}{mc} \\ \varepsilon &= E - \frac{\hbar^2 c_2^2}{2m} \end{aligned} \quad (53.4)$$

əvəzləməsi edəriksə, (53.3) tənliyi yerinə

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{m\omega_o^2}{2} y^2 Y(y) = \varepsilon Y(y) \quad (53.5)$$

tənliyi alınır. (53.5) tənliyi ω_o tezliyi ilə rəqs edən ε enerjili $Y(y)$ harmonik osilyatorun tənliyidir və onun həllini

$$\begin{aligned} Y(y) &= e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \\ \xi &= \sqrt{\frac{m\omega_o}{\hbar}} y' = \sqrt{\frac{m\omega_o}{\hbar}} \left(y + \frac{c\hbar c_1}{eB} \right) \end{aligned} \quad (53.6)$$

şəklində tapırıq. Bu həllə uyğun olan enerji

$$\varepsilon = \hbar\omega_o \left(n + \frac{1}{2} \right), n = 0, 1, 2, \dots \quad (53.7)$$

olar və (53.2)-nin həlli olaraq

$$\psi_n(x, y, z) = e^{i(c_1x + c_2z)} e^{-\frac{\varepsilon^2}{2}} H_n(\xi) \quad (53.8)$$

əldə edirik. Bu həllə uyğun olan ε qiyməti (53.4)-dən

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 c_2^2}{2m}$$

olduğu üçün maqnit sahəsində zərrəciyin enerjisinin qiyməti

$$E_n = \hbar\omega_o \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 c_2^2}{2m} \quad (53.9)$$

alınar. Burada sonuncu hədd $\frac{\hbar^2 c_2^2}{2m}$ zərrəciyin sahə istiqamətindəki kinetik enerjisidir. (53.9)-un birinci həddi

$$E_n(b) = \frac{e\hbar B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\Omega_L (2n + 1)$$

(Ω_L -Larmor tezliyidir) maqnit sahəsinə perpendikulyar (x,y) müstəvisində zərrəciyin hərəkət enerjisidir. Beləliklə, maqnit sahəsində zərrəciyin enerjisi

$$E_n = \frac{e\hbar B}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 c_2^2}{2m} = \hbar\Omega_L (2n + 1) + \frac{\hbar^2 c_2^2}{2m} \quad (53.10)$$

olur. Buradakı birinci həddi

$$E_n(b) = -\mu_b (2n + 1) B, \mu_b = -\frac{e\hbar}{2mc} \quad (53.11)$$

şəklində də yazıla bilər. Bu göstərir ki, kvant mexanikasına görə elektron qazının diamagnet xassəsi meydana çıxır. Klassik fizikada bu özəllik yoxdur. (52.8) ifadəsinə görə zərrəciyin ümumiləşmiş impulsu OX oxu istiqamətində $P_x^o = \hbar c_1$ və OZ istiqamətində

$P_z^o = \hbar c_2$ qiymətini alır. OY oxu boyunca isə zərrəcik tarazlıq və

ziyyəti $y = \frac{cP_x^o}{eB}$ ətrafında harmonik ω_o tezliyi ilə rəqs edir.

$$\left(\omega_0 = \frac{eB}{mc}\right).$$

İndi isə atomun xarici maqnit sahəsində enerji səviyyələrinin dəyişilməsini araşdıraq.

Bir valentli atom bircins maqnit sahəsində yerləşdirilir. Belə atom eyni zamanda həm maqnit və həm də nüvə ilə digər elektronların elektrik sahəsində olar. Bu elektrik sahəsini mərkəzi $U(r)$ potensialı sahə qəbul edək. Maqnit sahəsini OZ oxu boyunca yönəldək. Onda vektor-potensialı

$$A_x = -\frac{B}{2}y, A_y = \frac{B}{2}x, A_z = 0 \quad (53.12)$$

kimi qəbul etsək, $\vec{B} = \text{rot}\vec{A} = [\vec{\nabla}\vec{A}]$ ifadəsindən $B_x=B_y=0, B_z=B$ olar. Onları Pauli tənliyində yerinə yazsaq və alınan ifadədə də B^2 -ni kiçik sahələr üçün nəzərə almasaq

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(r)\psi - \frac{ie\hbar}{2mc} B \left(x \frac{\partial \psi}{\partial y} - y \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \frac{e\hbar}{2mc} \sigma_z B \psi \quad (53.13)$$

əldə edərik.

$$-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = \hat{L}_z \quad (53.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) = \hat{H}_0$$

olduğuna görə (53.13)-i

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + \hbar \sigma_z) \psi \quad (53.15)$$

yazarıq. Yə'ni, maqnit sahəsində momenti

$$-\frac{e}{2mc} (\hat{L}_z + \hbar \sigma_z)$$

olan maqnit dipolunun potensial enerjisi

$$\Delta U = -(\vec{\mu}\vec{B}) = \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + \hbar \sigma_z) \quad (53.16)$$

maqnit sahəsinin təsiri ilə müəyyən olunur. Stasionar hala baxırıqsa, dalğa funksiyası

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (53.17)$$

olanda bu hal üçün Pauli tənliyi

$$\hat{H}_0 \psi + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + \hbar \sigma_z) \psi = E \psi$$

olar. Pauli matrisi $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ və dalğa funksiyası $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ olduğuna görə

$$\hat{H}_0 \psi_1 + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z + \hbar \sigma_z) \psi_1 = E \psi_1 \quad (53.18)$$

$$\hat{H}_0 \psi_2 + \frac{eB}{2mc} (\hat{L}_z - \hbar \sigma_z) \psi_2 = E \psi_2$$

iki tənlik şəkilinə düşür. Bu tənliklərin həlli maqnit sahəsi olmayanda da iki cürə olur

$$\psi'_{nlm} = \begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix}, E = E_{nl}^{(o)} \text{ spini } S_z = \frac{\hbar}{2} \quad (53.19)$$

$$\psi''_{nlm} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm} \end{pmatrix}, E = E_{nl}^{(o)} \text{ spini } S_z = -\frac{\hbar}{2}$$

burada

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

(53.19)-u (53.18)-də yerinə yazsaq, ψ'_{nlm} üçün

$$E = E'_{nlm} = E_{nl}^{(o)} + \frac{eB}{2mc} (m+1), S_z = \frac{\hbar}{2}$$

ψ''_{nlm} üçün isə

$$E = E''_{nlm} = E_{nl}^{(o)} + \frac{eB}{2mc} (m-1), S_z = -\frac{\hbar}{2} \quad (53.20)$$

alınar. Yə'ni, xarici maqnit sahəsində atomun dalğa funksiyası dəyişmir. Lakin enerji isə momentin maqnit sahəsindəki orientirindən asılı olur. Beləliklə, maqnit sahəsində maqnit kvant ədədinə görə səviyyələri parçalanır. m-ə görə olan cırılma ortadan götürülür.

(53.20) ifadələrini

$$E'_{nlm} = E_{nl}^{(0)} + \hbar\Omega_L(m+1) \quad (53.21)$$

$$E''_{nlm} = E_{nl}^{(0)} + \hbar\Omega_L(m-1)$$

şəklindədə yazmaq olar. Ω_L -Larmor tezliyinin ifadəsi

$$\Omega_L = \frac{eB}{2mc} \quad (53.22)$$

(53.21) düsturundan keçid tezliyi

$$\omega = \frac{E_{n'l'm'} - E_{nlm}}{\hbar} = \frac{E_{n'l'}^{(0)} - E_{nl}^{(0)}}{\hbar} + \Omega_L(m' - m)$$

$$\omega = \omega^{(0)} + \Omega_L\Delta m$$

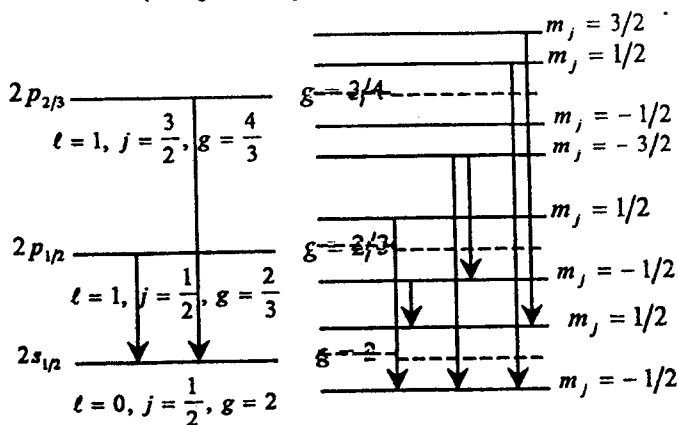
olar. Burada

$$\omega^{(0)} = \frac{1}{\hbar} (E_{n'l'}^{(0)} - E_{nl}^{(0)})$$

$$\Omega_L = \frac{eB}{2mc}$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

Xarici maqnit sahəsində atomun enerji səviyyələri şəkil I.27-də olduğu kimi parçalanma verir. Yə'ni, xarici maqnit sahəsi atomlarda Zeeyman effekti (enerjinin dəyişilməsi) yaranır.



Şəkil I.26. s və p səviyyələrinin maqnit sahəsində parçalanması. Normal Zeeyman effekti.

Zeevman effekti impuls momentinin maqnit sahəsi istiqamətində presesiya hərəkəti ilə bağlıdır. Güclü maqnit sahəsində spin momentini ilə orbital moment ayrı-ayrılıqda maqnit sahəsi ilə təsirdə olur və bu təsir normal Zeevman effektini realizə edir. Bu zaman maqnit sahəsində səviyyələr arasında olan keçidə uyğun olaraq üç spektral xətt alınır.

Lakin, təcrübə göstərir ki, normal Zeevman effektindən başqa, daha mürəkkəb Zeevman effekti də müşahidə olunur. Zeevman effektini ətraflı öyrənmək üçün tam impuls momentini araşdıraraq

Tam moment operatoru

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \quad (53.24)$$

orbital momentlə, spin momentin cəmi şəklindədir. Burada

$$\hat{L} = [\hat{r}\hat{p}] = -i\hbar[\hat{r}\hat{\nabla}]$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2(\hat{L}_x\hat{S}_x + \hat{L}_y\hat{S}_y + \hat{L}_z\hat{S}_z)$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

Onda

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$$

$$\hat{J}_z = -i\hbar[\hat{r}\hat{\nabla}] + \frac{\hbar}{2}\sigma_z \quad (53.25)$$

yazılar və

$$\hat{J}^2\psi = \hat{J}^2\psi$$

$$\hat{J}_z\psi = J_z\psi \quad (53.26)$$

tənliklərindən \hat{J}^2 və \hat{J}_z operatorlarının məxsusi qiymətlərini tapırıq. (53.24) və (53.25)-dən

$$\begin{aligned} & \hat{L}^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + 2 \left\{ \hat{L}_x \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \hat{L}_y \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ & \left. + \hat{L}_z \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = J^2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (53.27)$$

yazarıq. Matrislərin vurulması və toplanması qaydasından istifadə edərixsə

$$\begin{vmatrix} \hat{L}^2 \psi_1 + \frac{3}{4} \hbar^2 \psi_1 + \hbar(\hat{L}_z \psi_1 + (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \psi_2) & 0 \\ \hat{L}^2 \psi_2 + \frac{3}{4} \hbar^2 \psi_2 - \hbar(\hat{L}_z \psi_2 + (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \psi_1) & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} J^2 \psi_1 & 0 \\ J^2 \psi_2 & 0 \end{vmatrix}$$

alarıq və buradan da iki tənlik

$$\hat{L}^2 \psi_1 + \frac{3}{4} \hbar^2 \psi_1 + \hbar(\hat{L}_z \psi_1 + (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \psi_2) = J^2 \psi_1 \quad (53.28)$$

$$\hat{L}^2 \psi_2 + \frac{3}{4} \hbar^2 \psi_2 - \hbar(\hat{L}_z \psi_2 + (\hat{L}_x + i\hat{L}_y) \psi_1) = J^2 \psi_2$$

əldə edərik. Mə'lumdur ki,

$$\hat{L}^2 \psi_1 = \hbar^2 l(l+1) \psi_1; \hat{L}_z \psi_1 = \hbar m \psi_1 \quad (53.29)$$

$$\hat{L}^2 \psi_2 = \hbar^2 l(l+1) \psi_2; \hat{L}_z \psi_2 = \hbar m \psi_2$$

olur. Eyni ilə

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) Y_{lm} = -\hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l,m-1} \quad (53.30)$$

$$(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) Y_{lm} = -\hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_{l,m+1}$$

Əgər

$$\psi_1 = a Y_{lm}; \psi_2 = b Y_{l,m+1}$$

kimi qəbul etsək, (53.28) tənliklərindən

$$\left[l(l+1) + \frac{3}{4} + m \right] a - \sqrt{(l-m)(l+m+1)} b = \frac{J^2}{\hbar^2} a \quad (53.31)$$

$$\left[l(l+1) + \frac{3}{4} - m \right] b - \sqrt{(l-m)(l+m+1)} a = \frac{J^2}{\hbar^2} b$$

tənliklər sistemi alarıq. Onların sıfırdan fərqli o zaman olar ki, a və b əmsallarının determinantı sıfır olsun:

$$\begin{vmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m - \frac{J^2}{\hbar^2} & -\sqrt{(l+m+1)(l-m)} \\ -\sqrt{(l+m+1)(l-m)} & l(l+1) + \frac{3}{4} - m - \frac{J^2}{\hbar^2} \end{vmatrix} = 0$$

Bu determinantdan $\frac{J^2}{\hbar^2}$ üçün iki kök alırıq.

$$\frac{J^2}{\hbar^2} = \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 \pm \left(l + \frac{1}{2}\right) \quad (53.32)$$

Buradan

$$J^2 = \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l + \frac{3}{2}\right) \quad (53.33)$$

$$J^2 = \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2}\right) \left(l - \frac{1}{2}\right)$$

ifadəsində birinci orbital və spin momentlərinin cəmi, ikinci isə orbital və spin momentlərinin fərqi kimi tapılır. Yə'ni

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1) \quad (53.34)$$

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

tapmış oluruq. j -kvant ədədi daxili kvant ədədi adlanır və

$$j = l + S$$

$$j = |l - S|$$

dəyərləri alır. Eyni yolla J_z üçündə

$$(\hat{L}_z + S_z)\psi = \left(\hat{L}_z + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = J_z \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \hbar \left(m + \frac{1}{2}\right) \psi_1 & 0 \\ \hbar \left(m + \frac{1}{2}\right) \psi_2 & 0 \end{pmatrix} = \hbar \left(m + \frac{1}{2}\right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = J_z \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

yazırıq ki, buradan da

$$J_z = \hbar \left(m + \frac{1}{2}\right) \quad (53.35)$$

alınır. Başqa şəkildə

$$J_z = \hbar m_j, m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots \pm j$$

kimi yazılır. Beləliklə,

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \psi &= \hbar^2 j(j+1) \psi \\ \hat{J}_z \psi &= \hbar m_j \psi \end{aligned} \quad (53.36)$$

əldə edirik. Tam momentlə atomun maqnit momenti

$$\hat{\mu} = \frac{e}{2mc} \left(\hat{J} + \hat{S} \right) = \frac{e}{2mc} \left(\hat{L} + 2\hat{S} \right) \quad (53.37)$$

ifadə olunur. (53.37) ifadəsindən maqnit momentini

$$\hat{\mu} = \frac{e}{2mc} \left(\hat{J} + \hat{S} \right) = Q\hat{J} \quad (53.38)$$

kimi yazarıqsa, Q-nin ifadəsini taparıq. (53.38)-ni

$$\begin{aligned} Q\hat{J}\hat{J} &= \frac{e}{2mc} \left(\hat{J} + \hat{S} \right) \hat{J} = \frac{e}{2mc} \left(\hat{J}^2 + \hat{S}\hat{J} \right) = \\ &= \frac{e}{2mc} \left(1 + \frac{\vec{S}\vec{J}}{J^2} \right) \end{aligned}$$

şəklində yazarıqsa, Q üçün

$$\hat{Q} = \frac{e}{2mc} \left(1 + \frac{\vec{S}\vec{J}}{J^2} \right) \quad (53.39)$$

əldə edirik. (52.24)-dən orbital mome operatoru

$$\hat{L} = \hat{J} - \hat{S}$$

olduğu üçün

$$\hat{L}^2 = \hat{J}^2 + \hat{S}^2 - 2\hat{S}\hat{J}$$

$$\vec{S}\vec{J} = \frac{1}{2} (J^2 + S^2 - L^2)$$

yazılar. Bunu (53.39) -da yerinə yazsaq

$$\hat{Q} = \frac{e}{2mc} \left(1 + \frac{\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2J^2} \right) \quad (53.40)$$

alırıq. (53.40)-ı (53.38)-də yerinə qoysaq, maqnit momenti üçün

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2mc} \left(1 + \frac{\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2J^2} \right) \hat{J} = \hat{Q}\hat{J} \quad (53.41)$$

öldə edərik. Bu momentin xarici maqnit sahəsi ilə təsiri

$$\hat{V} = -\vec{\mu}\vec{B}$$

enerjiyə olan birinci tərtib əlavə

$$E = - \int \psi_{n'l'm'}^{*(o)} \mu_z B \psi_{n'l'm}^{(o)} dV = - \int \psi_{n'l'm'}^{*(o)} \mu_z \hat{Q} B \psi_{n'l'm}^{(o)} dV$$

şəklində olar.

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), L^2 = \hbar^2 l(l+1), S^2 = \hbar^2 S(S+1)$$

olduğuna görə bu ifadədən

$$E = - \int \psi_{n'l'm'}^{*(o)} \frac{eB}{2mc} \left(1 + \frac{\hat{J}^2 + \hat{S}^2 - \hat{L}^2}{2J^2} \right) J_z \psi_{n'l'm}^{(o)} dV = \frac{e\hbar B}{2mc} g m_j \delta_{m_j, m_j} \quad (53.42)$$

yazarıq. g-nin ifadəsi

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + S(S+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (53.43)$$

(53.43) ifadəsinə hiromaqnit münasibəti və ya Lande vuruğu deyilir. Deməli, zəyif maqnit sahəsində atomun enerjisi

$$E_m = E^{(o)} - \hbar \Omega_L m_j g \quad (53.44)$$

şəklində olar. Burada $E^{(o)}$ maqnit sahəsi olmayanda atomun enerjisi, Ω_L -Larmor tezliyidi, g-Lande vuruğu, tam momentin proek-

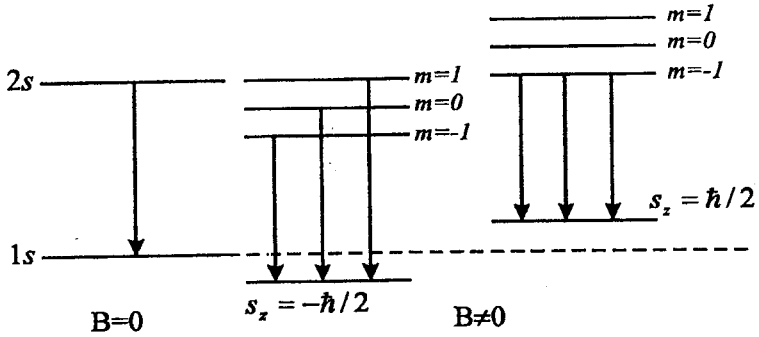
siyasını təyin edir. $m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm j$ -kvant ədəddir m_j ədədi -

j-dən +j-yə qədər qiymətlər aldığına görə, hər bir səviyyə zəyif maqnit sahəsində $2j+1$ qədər parçalanma verir.

Atomun zəyif maqnit sahəsində

$${}^2S_{1/2} \left(j = \frac{1}{2}, l = 0 \right), {}^2P_{1/2} \left(j = \frac{1}{2}, l = 1 \right) \text{ və } {}^2P_{3/2} \left(j = \frac{3}{2}, l = 1 \right)$$

səviyyələrinin parçalanması Şəkil I.27-də göstərilmişdi



Şəkil I.27. Zəyif maqnit sahəsində $S_{1/2}$, $P_{1/2}$ və $P_{3/2}$ Səviyyələrinin parçalanması. Anomal Zeeyman effekti.

Şəkil I.27-dən görüldüyü kimi normal Zeeyman effektindən fərqli olaraq, maqnit sahəsində üç xətt əvəzinə, daha çox sayda xəttlər alınır. Sahənin güclü və ya zəyif olması

$$\frac{e\hbar}{2mc} B \ll |\Delta E_{j'j''}| \quad (53.45)$$

$$B \ll \left| \frac{2mc}{e\hbar} \Delta E_{j'j''} \right|$$

şərtindən tapılır. Əgər $\Delta E_{j'j''} \approx 5,3 \cdot 10^5$ (Na atomu üçün) olursa, $B > 5 \cdot 10^4$ ersted olar. Maqnit sahəsinin 10^4 ersteddən kiçik qiymətlərinin (zəyif maqnit sahəsi) olması, belə xarici sahənin spin orbital rabitəni qıra bilməsinə uyğun gəlir və ona görə də anomal Zeeyman effekti alınır.

Güclü maqnit sahəsində Normal Zeeyman effekti (Şəkil I.28) alınır

Fəsil V-ə aid çalışmalar

Çalışma V.1. Xətti harmonik osilyatorun kvaziklassik enerji səviyyələrini tapın.

Həll: Stasionar enerji səviyyələri

$$\int_a^b P dx = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

ilə müəyyən olunur. Potensial enerji $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ olduğu üçün

$$E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 = 0$$

olanda $x = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ olur. Yə'ni, dönmə nöqtələri

$$a = -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}; b = +\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

olar. Buradan

$$\begin{aligned} \int_a^b \sqrt{2m(E-U)} dx &= \int_a^b \sqrt{2m\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)} dx = \frac{2}{\omega} \int_a^b \sqrt{E - y^2} dy = \\ &= \frac{2}{\omega} \left(\frac{y}{\omega} \sqrt{E - y^2} + \frac{E}{2} \arcsin \frac{y}{\sqrt{E}} \right)_a^b = \frac{2}{\omega} \left(\frac{E}{a} \arcsin \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} x \right)_a^b \end{aligned}$$

tapılır. Yə'ni,

$$\int_a^b \sqrt{2m(E-U)} dx = \frac{E}{\omega} \pi \quad \text{yazılar.}$$

Buradan

$$\frac{E}{\omega} \pi = \hbar \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{olduğu üçün}$$

$$E_{k,k} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \equiv E_{kvant}, n = 0, 1, 2, \dots$$

enerji tapılar.

Çalışma V.2. Sistemin hər hansı bir k halından k' halına keçmə ehtimalında həyacanlaşmanın Fouier əmsali ilə təyin edin.

Həll: III postulata görə

$$W_{kn} = |a_{kn}^{(1)}|^2$$

$$a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} dt$$

olur. $V_{kn}(t)$ -nin Fouier əmsali

$$V(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} V(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

Bunun hər iki tərəfini $e^{i\omega't}$ -yə vursaq və t üzrə inteqrallasaq

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega't} V(t) dt = \iint V(\omega) e^{i(\omega' - \omega)t} dt d\omega = 2\pi \int V(\omega) \delta(\omega' - \omega) d\omega =$$

$$= 2\pi V(\omega')$$

alırıq. Buradan

$$V(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int V(t) e^{i\omega t} dt$$

və ya $\omega \rightarrow \omega_{kn}$ yazarsaq

$$V_{kn}(\omega_{kn}) = \frac{1}{2\pi} \int V(t) e^{i\omega_{kn}t} dt$$

əldə edilər. Bu ifadəni $a_{kn}^{(1)}$ ilə müqayisə etsək

$$a_{kn}^{(1)} = -\frac{2\pi i}{\hbar} V_{kn}(\omega_{kn})$$

alırıq. Onda

$$W_{kn} = |a_{kn}^{(1)}|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |V_{kn}(\omega_{kn})|^2$$

tapılır.

Çalışma V.3. Monoxromotik, periodik dalğası ilə təsirində olan atomun chimahlını hesablayın.

Həll: Işıq dalğası

$$F = e\mathcal{E}_0 \cos\left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x\right)$$

ilə xarakterizə olunur. Görülən işıq üçün $\lambda \approx 10^{-4} \div 10^{-5} \text{ sm}$ olur və atomun ölçüsü $x \sim 10^{-8} \text{ sm}$ tərtibdədir. Onda $\frac{2\pi}{\lambda} x \approx 10^{-3}$ olar. Həyacanlaşma

$$V(x, t) = -\int_0^x F dx = -e\mathcal{E}_0 \cos \omega t \int_0^x dx = -e\mathcal{E}_0 x \cos \omega t$$

verilər və matris elemanı

$$V_{mk}(x, t) = -e\mathcal{E}_0 \cos \omega t \int \psi_m^{*(\circ)}(\vec{r}, t) x \psi_k^{(\circ)}(\vec{r}, t) dV$$

$$V_{mk}(x, t) = -e\mathcal{E}_0 x_{mk}(t) \cos \omega t$$

$$x_{mk}(t) = \int \psi_m^{*(\circ)}(\vec{r}) x \psi_k^{(\circ)}(\vec{r}) e^{\frac{i(E_m^{(\circ)} - E_k^{(\circ)})}{\hbar} t} dV = e^{i\omega_{mk} t} x_{mk}$$

$$V_{mk}(x, t) = -e\mathcal{E}_0 x_{mk} e^{i\omega_{mk} t} \cos \omega t, x_{mk} = \int \psi_m^{*(\circ)}(\vec{r}) x \psi_k^{(\circ)}(\vec{r}) dV,$$

$$\omega_{mk} = \frac{E_m^{(\circ)} - E_k^{(\circ)}}{\hbar}$$

əldə edilir. Həyacanlaşma nəzəriyyəsinə görə

$$a_{mk}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int V_{mk}(x, t) dt = \frac{ie\mathcal{E}_0}{\hbar} x_{mk} \int e^{i\omega_{mk} t} \cos \omega t dt =$$

$$= \frac{ie\mathcal{E}_0}{2\hbar} x_{mk} \int_0^t e^{i\omega_{mk} t} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) dt = \frac{ie\mathcal{E}_0}{2\hbar} x_{mk} \left(\int_0^t e^{i(\omega_{mk} + \omega)t} dt + \int_0^t e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} dt \right) =$$

$$= \frac{e\mathcal{E}_0}{2\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{mk} + \omega)t} - 1}{\omega_{mk} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mk} - \omega)t} - 1}{\omega_{mk} - \omega} \right)$$

alarıq. E səviyyəsindən E_m səviyyəsinə keçid, udulma olan zaman $\omega_{mk} - \omega = 0$ olar və $E_k + \hbar\omega = E_m$ -dir. Şüalanma olan zaman isə $\omega_{mk} + \omega = 0$ olar və $E_k - \hbar\omega = E_m$ -dir. Onda $\omega_{mk} - \omega$ kiçik qiymətlərinə onun rolu mühümdür və rezonans oblastında $\omega_{mk} - \omega$ dəyəri kiçik

olur və $E_k - \hbar\omega = E_m$ çox böyük olar. Ona görə

$$a_{mk}^{(1)} = \frac{e\mathcal{E}_0}{2\hbar} x_{mk} \frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - 1}{\omega_{mk} - \omega}$$

yazılar. III postulata görə

$$W_{mk} = |a_{mk}^{(1)}|^2$$

olduğuna görə

$$W_{mk} = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{4\hbar^2} |x_{mk}|^2 \frac{2[1 - \cos(\omega_{mk} - \omega)t]}{(\omega_{mk} - \omega)^2} = \frac{e^2 \mathcal{E}_0^2}{2\hbar^2} |x_{mk}|^2 \frac{1 - \cos(\omega_{mk} - \omega)t}{(\omega_{mk} - \omega)^2}$$

yaza bilərik. Buradan

$$W_{mk} = e^2 \mathcal{E}_0^2 |x_{mk}|^2 \frac{\frac{1}{2}[1 - \cos(\omega_{mk} - \omega)t]}{\hbar^2 (\omega_{mk} - \omega)^2} = e^2 \mathcal{E}_0^2 |x_{mk}|^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right)}{\hbar^2 (\omega_{mk} - \omega)^2}$$

olar. δ -funksiyanın tərifinə görə

$$\frac{4 \sin \frac{\omega_{mk} - \omega}{2}}{\left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right)^2} = \pi \delta \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right)$$

olduğu üçün

$$W_{mk} = e^2 \mathcal{E}_0^2 \frac{\pi}{\hbar^2} |x_{mk}|^2 \delta \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right)$$

əldə edirik. $\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x)$ xassəsinə görə

$$\delta \left(\frac{\omega_{mk} - \omega}{2} \right) = 2\delta(\omega_{mk} - \omega) \text{ yazılar və}$$

$$W_{mk} = \frac{2\pi e^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} |x_{mk}|^2 \delta(\omega_{mk} - \omega)t$$

olar. Vahid zamanda keçid ehtimalı üçün

$$W_{mk} = \frac{w_{mk}}{t} = \frac{2\pi e^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2} |x_{mk}|^2 \delta(\omega_{mk} - \omega)$$

tapılar.

Çalışma V.4. (0,a) intervalında $V(x) = \frac{V_0}{a} x$ həyacanlaşma sahəsində zərəcəyin enerjisinə olan $E^{(1)}$ və $E^{(2)}$ əlavələrini tapın.

Həll: $V(x) = \frac{V_0}{a} x$ sahəsində əsas halın enerji və hal funksiyası

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right), n = 1, 2, 3, \dots$$

olur. Enerjiyə olan I və II nərtib əlavə

$$E_n^{(1)} = V_{nn}, E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

ilə təyin olunur. Buradan

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \int_0^a \psi_n^{*(0)} V \psi_n^{(0)} dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{V_0}{a} x dx = \\ &= \frac{2V_0}{a^2} \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n}{a} x\right) x dx = \frac{V_0}{2}; E_n^{(1)} = \frac{V_0}{2} \end{aligned}$$

olar. V_{mn} -ni hesablasaq

$$\begin{aligned} V_{mn} &= \frac{2V_0}{a^2} \int_0^a x \sin\left(\frac{\pi m}{a} x\right) \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right) dx = \\ &= -\frac{V_0}{a^2} \int_0^a \left\{ \frac{a}{\pi(m-n)} \sin\left(\frac{(m-n)\pi}{a} x\right) - \frac{a}{\pi(m+n)} \sin\left(\frac{(m+n)\pi}{a} x\right) \right\} dx = \\ &= \frac{V_0}{a^2} \left\{ \frac{a^2}{(m-n)^2 \pi^2} \cos\left(\frac{(m-n)\pi}{a} x\right) - \frac{a^2}{(m+n)^2 \pi^2} \cos\left(\frac{(m+n)\pi}{a} x\right) \right\}_0^a = 0 \end{aligned}$$

sıfır alırıq. Onda II tərtib əlavənin

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = 0$$

sıfır qiymətini əldə edirik.

Çalışma V.5. Elektrik yüklü harmonik osilyator rəqs istiqamətində yönəlmiş elektrik sahəsində olarsa, onun enerjisinə olan I və II tərtib əlavələri tapın.

Həl: Osilyatorun enerjisi və hal funksiyası

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right); \psi_n^{(0)} = (2^n \sqrt{\pi} n! a)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{a}\right); a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Bu osilyator $V = -e\varepsilon x$ sahəsində olsun. Onda

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = -e\varepsilon (2^n \sqrt{\pi} n! a)^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} H_n^2\left(\frac{x}{a}\right) dx = 0$$

$$V_{mn} = -e\varepsilon (2^m m! \sqrt{\pi} a)^{-1} (2^n n! \sqrt{\pi} a)^{-1} \int x e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} H_m\left(\frac{x}{a}\right) H_n\left(\frac{x}{a}\right) dx$$

olduğundan, $n = m \pm 1$ qiymətində

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|V_{n,n-1}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} + \frac{|V_{n,n+1}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}}$$

$$\text{olar } x H_m\left(\frac{x}{a}\right) - n i$$

$$H_{m+1}\left(\frac{x}{a}\right) - 2\xi H_m\left(\frac{x}{a}\right) + 2m H_{m-1}\left(\frac{x}{a}\right) = 0 \quad \text{yazsaq}$$

$$V_{m,n} = -e\varepsilon (2^m m! \sqrt{\pi} a)^{-1} (2^n n! \sqrt{\pi} a)^{-1} a \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} m H_{m-1}\left(\frac{x}{a}\right) H_n\left(\frac{x}{a}\right) dx + \frac{1}{2} \int H_{m+1}\left(\frac{x}{a}\right) H_n\left(\frac{x}{a}\right) e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} dx \right\}$$

alırıq. $m=n+1$ və $m=n-1$ olduğu üçün

$$V_{n+1,n} = -e\varepsilon_0 a [2^{n+1} (n+1)! \sqrt{\pi} a]^{-1} [2^n n! \sqrt{\pi} a]^{-1} \int (n+1) H_n^2\left(\frac{x}{a}\right) e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} dx =$$

$$= -e\varepsilon_0 a \sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

$$V_{n+1,n} = -e\varepsilon_0 a \sqrt{\frac{n+1}{2}}; V_{n-1,n} = -e\varepsilon_0 a \sqrt{\frac{n}{2}} \quad \text{ alınar.}$$

Onda

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \frac{|V_{n,n-1}|^2}{\hbar\omega(n-1-n)} + \frac{|V_{n,n+1}|^2}{\hbar\omega(n-1-n)} = \frac{e^2\varepsilon^2 a^2 \frac{n}{2}}{-\hbar\omega} + \frac{e^2\varepsilon^2 a^2 \frac{n+1}{2}}{-\hbar\omega} \\ &= -\frac{e^2\varepsilon^2 a^2 \left(\frac{n+1}{2} - \frac{n}{2}\right)}{\hbar\omega} - \frac{e^2\varepsilon^2 a^2}{2\hbar\omega} = -\frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

$$E_n^{(2)} = -\frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

olar. Deməli, xarici sahədə osilyatorun enerjisi üçün

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$$

almış oluruq.

Çalışma V.6. $V = \frac{\alpha}{2} x^2$ sahəsində olan osilyatorun enerjisini tapın.

Həll: Osilyatorun k - səviyyəsində enerjisi

$$E_k = \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2} \right) + V_{kk} + \sum_{k' \neq k} \frac{|V_{k'k}|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}$$

olur. Onda

$$\begin{aligned} E_k^{(1)} &= V_{kk} = \frac{\alpha}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_k^{(1)}|^2 x^2 dx = \frac{\alpha}{2} \sum_{k'} x_{kk'} x_{k'k} = \\ &= \frac{\alpha}{2} (x_{k,k-1} x_{k-1,k} + x_{k,k+1} x_{k+1,k}) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\alpha}{2m\omega^2} = \\ &= \frac{\alpha}{2} \left(a^2 \frac{k}{2} + a^2 \frac{k+1}{2} \right) = \frac{\alpha}{4} a^2 (2n+1) = \frac{\alpha}{2} a^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

$$E_k^{(1)} = V_{kk} = \frac{\hbar\alpha}{2m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$V_{k'k} = \frac{\alpha}{2} \sum_l x_{k'l} x_{lk} = \frac{\alpha}{2} (x_{k',k-1} x_{k-1,k'} + x_{k',k+1} x_{k+1,k'})$$

$$V_{k-2,k} = \frac{\alpha}{2} x_{k-2,k}^2 = \frac{\alpha \alpha^2}{4} \sqrt{k(k-1)}$$

$$V_{k+2,k} = \frac{\alpha}{2} x_{k-2,k}^2 = \frac{\alpha \alpha^2}{4} \sqrt{(k+1)(k+2)}$$

olduğu üçün

$$E_k^{(2)} = \sum \frac{|V_{kk}|^2}{E_k^{(0)} - E_k^{(0)}} = \frac{\alpha^2 a^4}{16} \frac{k(k-1)}{2\hbar\omega} - \frac{\alpha^2 a^4}{16} \frac{(k+1)(k+2)}{2\hbar\omega} =$$

$$= -\frac{\alpha^2 a^4}{8\hbar\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

enerjiyə olan II tərtib əlavəni tapırıq. Ondaosilyatorun enerjisi

$$E_k = \hbar\omega \left(k + \frac{1}{2} \right) \left[1 + \frac{\alpha}{2m\omega^2} - \frac{\alpha^2}{8m^2\omega^4} \right]$$

olar.

Çalışma V.7. İkiqat cırılmış halın həyəcanlaşma hesabına enerjisini və həl funksiyasını tapın.

Həll: İki qat cırılmış halda tənliklər

$$\left. \begin{aligned} (V_{11} - E^{(1)})a_1^{(0)} + V_{12}a_2^{(0)} &= 0 \\ V_{21}a_1^{(0)} + (V_{22} - E^{(1)})a_2^{(0)} &= 0 \end{aligned} \right\}$$

olur. Bu tənliklərin birgə həlli olması üçün

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

olmalıdır. Buradan

$$(V_{11} - E^{(1)})(V_{22} - E^{(1)}) - |V_{12}|^2 = 0$$

$$(E^{(1)})^2 - (V_{11} - V_{22})E^{(1)} + V_{11}V_{22} - |V_{12}|^2 = 0$$

olar.

$$E^{(i)} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{(V_{11} + V_{22})^2 - 4(V_{11}V_{22} - |V_{12}|^2)} =$$

$$= \frac{V_{11} + V_{22}}{2} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}$$

Deməli,

$$E_1^{(i)} = \frac{V_{11} + V_{22}}{2} + \frac{D}{2}$$

$$E_2^{(i)} = \frac{V_{11} - V_{22}}{2} - \frac{D}{2}$$

$$D = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}$$

$E_1^{(i)} \neq E_2^{(i)}$ olanda cırışmanın həyacanlaşmanın hesabına aradan qalxması müşahidə olunur. $E_1^{(i)}$ və $E_2^{(i)}$ qiymətlərini tənliklər sistemində yerinə yazsaq

$$\frac{a_1^{(o)}}{a_2^{(o)}} = \frac{V_{12}}{E^{(i)} - V_{11}}, \operatorname{tg} \beta = \frac{2V_{12}}{V_{11} - V_{22}}$$

alarıq. $E_1^{(i)}$ və $E_2^{(i)}$ kökləri üçün

$$\left(\frac{a_1^{(o)}}{a_2^{(o)}} \right)^2 = \operatorname{ctg} \frac{\beta}{2}, \left(\frac{a_1^{(o)}}{a_2^{(o)}} \right)^2 = -\operatorname{tg} \frac{\beta}{2}$$

tapırıq. Onda

$$\psi_1 = \psi_1^{(o)} \cos \frac{\beta}{2} + \psi_2^{(o)} \sin \frac{\beta}{2}$$

$$\psi_2 = -\psi_1^{(o)} \sin \frac{\beta}{2} + \psi_2^{(o)} \cos \frac{\beta}{2}$$

əldə edilir.

Çalışma V. 8. Ətalət və dipol momenti \hat{I} və d olan rotatorun xarici bircins elektrik sahəsində enerjisini tapın.

Həll: Elektrik sahəsini OZ oxu boyunca yönəltsək, həyacanlaşma $V = -d\mathcal{E} \cos \theta$ olur. Rotatorun dalğa funksiyası və enerjisi sahə olma-
yanda

$$Y_e^m(\theta, \varphi); E_l^{(o)} = \frac{\hbar^2}{2J} \ell(\ell+1)$$

olar. Əsas hal $l=0, m=0$ olduğu üçün $Y_o^o = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, E_l^{(o)} = 0$ -dir. Birinci

tərtib əlavə

$$E_o^{(1)} = \iint_{o_o}^{2\pi\pi} Y_o^{*o}(\theta, \varphi) Y_o^o(\theta, \varphi) d\Omega = -\frac{1}{4\pi} \iint_{o_o}^{2\pi\pi} d\epsilon \cos\theta \sin\theta d\theta d\varphi = 0$$

$$E_o^{(1)} = 0$$

olar. II tərtib əlavə isə

$$\begin{aligned} E_o^{(2)} &= \sum_l \frac{|V_{ol}|^2}{E_o^{(o)} - E_l^{(o)}}; V_{ol} = V_{oo, lo} = \\ &= -2\pi\epsilon d \int_o^\pi \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell^o(\cos\theta) \cos\theta \sin\theta d\theta = \\ &= -\frac{\epsilon d \sqrt{2\ell+1}}{2} \int_{+1}^{-1} P_\ell^o(x) dx = \frac{\sqrt{2\ell+1} \epsilon d}{2} \int_{+1}^{-1} \frac{d^\ell}{dx^\ell} \left[\frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \right] x dx \end{aligned}$$

yazılar. Burada

$$\begin{aligned} \int_{+1}^{-1} \frac{d^\ell}{dx^\ell} \left[\frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \right] x dx &= \frac{d^{\ell-1}}{dx^{\ell-1}} \left(\frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \right) x \Big|_{+1}^{-1} - \int_{+1}^{-1} \frac{d^{\ell-1}}{dx^{\ell-1}} \left(\frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \right) dx = \\ &= \frac{d^{\ell-1}}{dx^{\ell-1}} \left(\frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \right)_{+1}^{-1} - \frac{d^{\ell-2}}{dx^{\ell-2}} \left(\frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \right)_{+1}^{-1} \end{aligned}$$

olduğu üçün, $l > 1$ qiymətində bu ifadələr sıfır olar. $l=1$ olarsa

$$\int_{+1}^{-1} \frac{d}{dx} \left(\frac{x^2-1}{2} \right) x dx = - \int_{-1}^{+1} \frac{x^2-1}{2} dx = \left(-\frac{x^3}{6} + \frac{x}{2} \right)_{+1}^{-1} = -\frac{2}{3}$$

olur. Onda

$$V_{oo,10} = -\frac{\sqrt{3} \epsilon d}{2} \frac{2}{3}$$

$$E_o^{(0)} - E_1^{(0)} = -E_1^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{J}$$

$$E_o^{(2)} = -\frac{J \varepsilon^2 d^2}{\hbar^2 3}$$

əldə edilir. Beləliklə,

$$E_o = E_o^{(0)} + E_o^{(1)} + E_o^{(2)} = -\frac{J\varepsilon^2 d^2}{3\hbar^2}$$

alarıq.

Çalışma V.9. İki elektron arasında qarşılıqlı təsiri həyacanlaşma hesab edərək, helium atomunun və heliumabənzər ionların enerjisini tapın.

Həll: Əsas halda həyacanlaşmamış halda 2 elektronlu sistemin enerjisinin qiyməti

$$E^{(0)} = 2\left(-\frac{Z^2}{2}\right) = -Z^2$$

olur. Enerjiyə olan I tərtib əlavə

$$\psi = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) = \frac{Z^3}{\pi} e^{-Z(r_1+r_2)}$$

funksiyası ilə təyin olunur.

$$E^{(1)} = \int \psi^* \frac{1}{r_{12}} \psi dV_1 dV_2 = 2 \int_0^\infty dV_2 \rho_2 \frac{1}{r_{12}} \int_0^{r_2} \rho_1 dV_1$$

burada

$$\rho_1 = |\psi_1|^2, \rho_2 = |\psi_2|^2$$

$$dV_1 = 4\pi r_1^2 dr_1, dV_2 = 4\pi r_2^2 dr_2$$

Onda

$$E^{(1)} = \frac{5}{8} Z$$

alarıq. Beləliklə, helium atomunun enerjisi

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = -Z^2 + \frac{5}{8} Z$$

olar. Buradan da helium atomunun enerjisi

$$-E = \frac{11}{4} = 2,75$$

qiymətini alar. Təcrübədən alınan qiymət $-E=2,90$ (atom vahidlərində) olur.

Çalışma V.10. Nüvənin maqnit momentini gözönünə alaraq atomun ifratıncə qurluşunu tapın.

Həll: Əgər hidrogen atomu ($Z=1$) maqnit momentinə sahibdirsə, onun maqnit momenti

$$\vec{\mu}_p = \mu_p \vec{\sigma}'_p \text{ (Pauli matrisidir, } \mu_p = \frac{e\hbar}{2mc}) \text{ olar və bu maqnit sa-}$$

həsi

$$\vec{A} = \text{rot} \frac{\mu_p \vec{\sigma}'_p}{r} = \left[\vec{\nabla}, \frac{\mu_p \vec{\sigma}'_p}{r} \right], \vec{B} = \text{rot} \vec{A} = [\vec{\nabla} \vec{A}]$$

potensiyalla təyin olunur. Belə sahə elektronun maqnit momenti ilə ($\vec{\mu}_e = \mu_b \vec{\sigma}'_e$) qarşılıqlı təsirdə olur və bu təsir nəticəsində əlavə enerji yaranır. Qarşılıqlı təsir:

$$V_{iq} = -\vec{\mu}_e \vec{B} = \mu_b \mu_p \left(\sigma'_e \text{rot} \text{rot} \frac{\vec{\sigma}'_p}{r} \right) = \mu_b \mu_p \left[\vec{\sigma}'_e \vec{\nabla} (\vec{\sigma}'_p \vec{\nabla}) \frac{1}{r} - \vec{\sigma}'_e \vec{\sigma}'_p \nabla^2 \frac{1}{r} \right]$$

olar. Əgər seçilmiş istiqamət yoxdursa, yəni fəza izotropdursa

$$(\vec{\sigma}'_e \vec{\nabla}) (\vec{\sigma}'_p \vec{\nabla}) = \frac{1}{3} (\vec{\sigma}'_e \vec{\sigma}'_p) \nabla^2$$

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\vec{r})$$

olar və ifratıncə qurluş

$$V_{iq} = \frac{8\pi}{3} \mu_b \mu_p (\vec{\sigma}'_e \vec{\sigma}'_p) \delta(\vec{r})$$

qarşılıqlı təsirdən tapılır. Elektron-proton sisteminin spin operatoru

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\vec{\sigma}'_e + \vec{\sigma}'_p)^2$$

olduğu üçün

$$\frac{\hbar^2}{4} (\vec{\sigma}'_e + \vec{\sigma}'_p)^2 = \hbar^2 S(S+1)$$

yazırıq. Burada S toplam spin (S_e+S_p) olduğuna görə, ya $S=0$ və yadəkı $S=1$ olar.

$$\frac{1}{4}(\sigma_e'^2 + \sigma_p'^2 + 2\vec{\sigma}_e'\vec{\sigma}_p') = S(S+1)$$

ifadəsindən $\sigma_e'^2 + \sigma_p'^2 = 3+3=6$ olduğundan $\vec{\sigma}_e'\vec{\sigma}_p' = 2S(S+1) - 3$ yazırıq. δ -funksiyanın

$$\int \psi^* \psi \delta(\vec{r}) dV = |\psi(0)|^2 \left(|\psi(0)|^2 = \frac{\delta_{e0}}{\pi^2} \left(\frac{Zme^2}{\hbar^2} \right) \right); \delta_{e0} = \begin{cases} 0 & \ell \neq 0 \\ 1 & \ell = 0 \end{cases}$$

verdiyi nəticəyə görə S səviyyəsinin dəyişilməsi (ifratincə qurluş) aşağıdakı ifadə ilə müəyyən olunur:

$$\Delta E_{iq} = \frac{8}{3} \mu_b \mu_p \frac{m^3 e^6}{n^3 \hbar^6} [2S(S+1) - 3]$$

Əgər elektron ilə protonun spini bir-birinə antiparaleldirsə ($S=0$), onda

$$\Delta E_{iq}(S=0) = -8 \mu_b \mu_p \frac{m^3 e^6}{n^3 \hbar^6}$$

olar. Əgər elektron və protonun spini bir-birinə paraleldirsə ($S=1$), onda

$$\Delta E_{iq}(S=1) = \frac{8}{3} \mu_b \mu_p \frac{m^3 e^6}{n^3 \hbar^6}$$

olar. $S=1$ halındakı enerji ilə $S=0$ halındakı enerjinin fərqi üçün

$$\Delta E_{iq}(S=1) - \Delta E_{iq}(S=0) = \frac{32}{3} \mu_b \mu_p \frac{m^3 e^6}{n^3 \hbar^6}$$

alırıq. Onda S səviyyəsində keçid tezliyi

$$\Delta \omega = \frac{32}{3} \frac{\mu_b \mu_p}{\hbar} \frac{m^3 e^6}{n^3 \hbar^6}$$

olar. $n=1$ halı üçün $\Delta \omega$ -nin nəzəri qiyməti

$$\Delta \omega_{naz} = 1417 mghs$$

tapılar. Onun təcrübi qiyməti isə

$$\Delta \omega_{tac} = 1420 mghs$$

Çalışma V.11. Sındırma əmsalı $n>1$ mühitdə hərəkət edən elektron şüalanma verir (Çerenkov şüalanması). Bu şüalanmanın elektronun sürətindən asılılığını tapın

Həlli: Şüalanma zamanı enerji-impulsun saxlanması qanuna görə

$$E = \hbar\omega + E'$$

olur. Və ya

$$\vec{P} = \vec{P}' + \hbar\vec{k}$$

$$(m^2c^4 + c^2P^2)^{1/2} = \hbar\omega + (m^2c^4 + c^2P'^2)^{1/2}$$

$$\vec{P} = \vec{P}' + \hbar\vec{k}$$

olur. Burada \vec{P} və \vec{P}' başlanğıc və son halda elektronun impulsudur, $\hbar\vec{k}$ və $\hbar\omega$ fotonun impulsu və enerjisidir. Buradan

$$c(m^2c^2 + p^2)^{1/2} = \hbar\omega + c(m^2c^2 + p'^2)^{1/2}$$

$$\vec{P} - \vec{P}' = \hbar\vec{k}$$

$c^2(m^2c^2 + p^2) = \hbar^2\omega^2 + c^2(m^2c^2 + p'^2) + 2\hbar\omega c(m^2c^2 + p'^2)^{1/2}$
alırıq. Onda fotonun çıxış bucağının cosinusunu

$$\cos\theta = \frac{\omega}{ck\beta} + \frac{2\hbar}{2p} \left(1 - \frac{\omega^2}{c^2k^2}\right), \beta = \frac{v}{c}$$

olar. Sındırma əmsalı

$$\varepsilon = \hbar\omega = c'\hbar k = \frac{c\hbar k}{n}$$

($c' = \frac{c}{n}$ - mühitdə işığın faza sürətidir) münasibətindən tapıldığı üçün

$$\cos\theta = \frac{1}{\beta n} + \frac{\hbar k}{2p} \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$$

alınar. Əgər, $\beta n > 1$ -dirsə, elektronun sürəti, işığın mühitdəki sürətindən böyük olarsa ($c > v' > c'$) şüalanma baş verər. Klassik fizikada şüalanma bucağı

$$\cos\theta = \frac{1}{\beta n} (\hbar \rightarrow 0)$$

olar. Boşluqda belə şüalanma baş verməz, çünki $n=1$ və $\cos\theta = \frac{c}{v}$ olur.

Buna görə elektronun V sürəti, işığın sürətindən böyük ola bilməz.

Kitabın içindəkilər

Ön söz.....	5
Ədəbiyyat.....	9
I Fəsil. Kvant mexanikası və onun riyazi əsasları.....	11
§ 1. Kvant mexanikasının yaranmasına səbəb olan hadisələr.....	11
§ 2. Kvant halının dalğa funksiyası ilə xarakterizə olunması prinsipi.....	15
§ 3. Operatorlar və onların xassələri.....	20
§ 4. Kvant mexanikasının postulatları.....	22
§ 5. Kəsilməz spektrə sahib olan operatorun məxsusi funksiyası.....	24
§ 6. Diskret spektrə malik olan operatorun məxsusi funksiyaları ..	27
§ 7. Fiziki kəmiyyətin orta qiyməti.....	29
§ 8. Məxsusi qiymət və məxsusi funksiya tənliyi.....	30
§ 9. Fiziki kəmiyyətin müəyyən qiymət alma şərti.....	32
§ 10. Dinamik dəyişənlər üçün qeyrimüəyyənlik münasibəti.....	34
§ 11. Koordinat və impuls operatorlarının aşkar şəkili, onların məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyaları.....	37
§ 12. Enerji operatoru, Şödinger tənliyi.....	41
§ 13. Kvant mexanikasının hərəkət tənliyi.....	45
§ 14. Kəsilməzlik tənliyi.....	47
§ 15. Erenfest teoremləri.....	50
§ 16. Şödinger tənliyindən Hamilton-Yakobi tənliyinin alınması ..	52
§ 17. İmpuls momenti operatorunun aşkar şəklinin alınması, onun məxsusi qiyməti və məxsusi funksiyası.....	54
§ 18. İmpuls momenti və Hamilton operatorunun bəzi özəllikləri ..	65
Fəsil I-ə aid çalışmalar və onların həlli.....	69
II F əsil. Bə'zi sadə hallarda Şchödinger tənliyinin həlləri.....	81
§ 19. Potensial qutuda hərəkət edən zərrəcik.....	81
§ 20. Harmonik osilyatorun kvant nəzəriyyəsi.....	85
§ 21. Maqnit sahəsində zərrəciklərin hərəkəti.....	93
§ 22. Mərkəzi sahədə hərəkət. Rotator.....	95
§ 23. Kulon sahəsində zərrəciyin hərəkəti.....	99
§ 24. Birvalentli atomların enerjisi və dalğa funksiyası.....	106
§ 25. Atomların maqnit momentləri.....	109
Fəsil II-ə aid çalışmalar.....	113
III Fəsil. Təsvir və ya Təmsil (göstərim) nəzəriyyəsi elementləri.....	129
§ 26. Dalğa funksiyasının müxtəlif təsvirdə verilməsi.....	129
§ 27. Operatorların müxtəlif təsvirdə yazılışı.....	133

§ 28. Unitar çevirmələr.....	140
§ 29. Zamanı dəyişdirən unitar çevirmə.....	143
§ 30. Osilyatorun enerji təsvirində yazılışı.....	146
§ 31. Sistemin halının sıxlıq matrisi (statistik operator) ilə verilməsi.....	148
Fəsil III-ə aid çalışmalar.....	152
IV Fəsil. Kvant mexanikasında istifadə olunan təqribi metodlar	162
§ 32. Ritsin varyasiya üsulu.....	162
§ 33. Klassikəbənzər (kvaziklassik) yaxınlaşma.....	166
§ 34. Həyəcanlaşma nəzəriyyəsinin əsas tənlikləri.....	170
§ 35. Cırlaşmamış (qətmərləşməmiş) halın həyəcanlaşması.....	171
§ 36. Cırlaşma (qətmərləşmə) olan halın həyəcanlaşması.....	174
§ 37. Stasionar olmayan həyəcanlaşma və keçid ehtimalı.....	176
Fəsil IV-ə aid çalışmalar.....	182
V Fəsil. Həyəcanlaşma nəzəriyyəsinin tətbiqləri	186
§ 38. Yüklü xətti harmonik osilyatorun elektrik sahəsində hərəkəti.....	186
§ 39. Anharmonik osilyator.....	190
§ 40. Stark effekti (xarici elektrik sahəsində atomun enerjisi).....	194
§ 41. Hidrogen atomu üçün Stark effekti.....	197
§ 42. Üçölçülü rotatorun xarici elektrik sahəsində hərəkəti.....	203
§ 43. Spinin varlığı. Məxsusi qiymət və məxsusi funksiyalar. Pauli matrisləri.....	205
§ 44. Spin funksiyası. Pauli tənliyi.....	214
§ 45. Simmetrik və antisimmetrik hal funksiyaları. Pauli prinsipi.....	218
§ 46. Helium atomunun enerji səviyyələri Para, orto helium halları.....	221
§ 47. Elementlərin periodik sistemi.....	231
§ 48. Molekulların yaranması. Hidrogen molekulu.....	238
§ 49. Şüalanmanın kvant nəzəriyyəsi, məcburi və özbaşına (spontan) keçid ehtimalları.....	247
§ 50. Işığın mühitdən səpilməsi (dispersiya).....	254
§ 51. Raman effekti.....	262
§ 52. Seçmə qaydası.....	265
§ 53. Sərbəst zərrəciyin və atomun maqnit sahəsində davranışı. Zeeman effekti.....	269
Fəsil V-ə aid çalışmalar.....	281