

A.Í. MUXTAROV

**KVANT
MEKANİKASI**

ALÍ MƏKTƏBLƏR ÜÇÜN DƏRS VƏSAİTİ

İ k i n c i n ə ş r i

*Azərbaycan Respublikası Təhsil
Nazirliyi tərəfindən mart 1999-cu il
tarixli qərarla təsdiq edilmişdir*

«BAKİ UNİVERSİTETİ» NƏŞRİYYATI
BAKİ – 2007

530
* M 81

RƏY VERƏNLƏR:

Azərbaycan EA-nın akademiki **N.A.Quliyev**,
Azərbaycan EA-nın müxbir üzvü **S.A.Hacıyev**

ELMİ REDAKTOR:

fizika-riyaziyyat elmləri doktoru, professor **R.X.Muradov**

A.İ.Muxtarov. Kvant mexanikası: *ali məktəblər üçün dərs vəsaiti, –ikinci nəşr.* Bakı: «Bakı Universiteti» nəşriyyatı, 2007. – 660 səh., şəkilli.

Dərs vəsaiti əsasən respublikanın universitetlərinin fizika fakültələrinin tələbələri üçün kvant mexanikası fənni üzrə təklif olunmuş proqrama uyğun yazılmışdır.

M $\frac{1604030000 - 12}{M - 658(07) - 025}$

© Bakı Universiteti nəşriyyatı, 2007

© A.İ. Muxtarov, 2007

ÖN SÖZ

Ali təhsil müəssisələrinin tələbələri üçün təklif olunan «Kvant mexanikası» kursu müəllifin uzun illər Bakı Dövlət Universitetində oxuduğu mühazirələr əsasında yazılmışdır.

Kvant mexanikası müasir fizika, kimya və bioloji elmlərin əsasını təşkil edir. O, elementar zərrəciklərin, atomların və molekulların müxtəlif hərəkət formalarının tabe olduğu qanunauyğunluqları öyrənir və mikroaləmdə gedən fiziki, kimyəvi, bioloji və s. prosesləri tədqiq etməklə onların mahiyyətini aydınlaşdırmaq üçün elmi əsas verir.

Təbiətdə gedən hər bir proses və baş verən hər bir hadisə elementar zərrəciklərin, atomların, molekulların və onların birləşmələrinin müxtəlif hərəkət formalarının təzahürü olduğundan, mikroaləmdə baş verən proseslərin gedişini təsvir edən qanunauyğunluqları makrosistemlərdə gedən analogi proseslər üçün ümumiləşdirməklə, kvant mexanikası, axırıncıların tabe olduğu qanunauyğunluqları aşkar etməyə imkan verir.

Bu baxımdan kvant mexanikasının əsas qanun və prinsiplərini bilmək təbiət elmləri sahəsində işləyən orta və ali məktəb müəllimləri və elmi işçilər üçün çox vacibdir. Bunu nəzərə alaraq müəllif, oxuculara təklif olunan «Kvant mexanikası» kitabında kvant mexanikasının əsas qanun və prinsiplərini mümkün qədər geniş və sadə dildə şərh etməyə çalışmışdır.

Kitabda qeyri-relyativistik və relyativistik kvant mexanikasının əsas prinsipləri şərh olunur və onların müxtəlif məsələlərin həllinə tətbiqi verilir.

Burada müxtəlif təbiətli xarici sahələrin təsirinə məruz qalmış bir və çox zərrəcikli kvant sistemlərin hərəkətini öyrənmək üçün istifadə olunan stasionar və qeyri-stasionar həyəcanlanma metodu, kvazi-klassik metod, Ritsin variasiya metodu, Xartri-Fokun özünə uzlaşan sahə metodu, statistik Tomas-Fermi metodu, adiabatik yaxınlaşma metodu kimi təxmini metodlar geniş şərh olunur və onların bəzi tətbiqləri verilir.

Qeyri-relyativistik nəzəriyyənin əsasını təşkil edən Şredinger tənliyi potensial çəpərdən keçən, potensial çuxurda, sferik simmetrik və Kulon sahələrində hərəkət edən zərrəcik və eləcə də xətti və üçölçülü ossilyator üçün dəqiq həll edilir; şüalanma nəzəriyyəsi, foto və Kompton effektlər, dispersiya, helium atomu, mürəkkəb

(ağır) atomlar və iki atomlu molekulun fiziki xassələrinin təhlilində isə onun həlli üçün yuxarıda sadaladığım təxmini metodlardan istifadə olunur.

Kitabda relyativistik kvant mexanikasının əsasını təşkil edən Dirak nəzəriyyəsinin müfəssəl şərhı verilmişdir. Onun vasitəsilə relyativistik elektronun nüvə sahəsindəki hərəkəti, anomal Zeyeman effekti, Lemb sürüşməsi kimi məsələlər ətraflı şərh edilmişdir.

Müəllif orta və ali məktəblərdə işləyən müəllimlərdən, fizika, kimya və biologiya sahələrində çalışan elmi işçilərdən və kitabla maraqlanan digər oxuculardan kitab haqqında öz fikirlərini bildirməyi xahiş edir. Faydalı təkliflər minnətdarlıqla qəbul olunacaq və gələcəkdə nəzərə alınacaqdır.

Kitab nəşrə hazırlanarkən öz tənqidi qeydləri və faydalı məsləhətləri ilə onun keyfiyyətinin yaxşılaşmasına kömək etmiş akademik Nəriman Quliyevə, Azərb. EA müxbir üzvü Sabir Hacıyevə, prof. Rəsul Muradova müəllif öz dərin minnətdarlığını bildirir və kitabın kompüter variantının hazırlanmasında əmək sərf edən Tələt Mehdiyevə, Elmira Bağirovaya, Məcid Qocayevə və Sevinc Rəhimovaya təşəkkür edir.

Kitabın birinci nəşri 1999-cu ildə kiril əlifbası ilə çapdan çıxmışdır. Hazırda tələbələrin və respublika elmi ictimaiyyətinin tələbatını nəzərə alaraq, müəllif kitabın latın qrafikası ilə yazılmış yeni – ikinci nəşrini çapa hazırlamışdır.

I HISSƏ

QEYRİ-RELYATIVİSTİK KVANT MEXANİKASI

I FƏSİL

KVANT MEXANİKASINA GİRİŞ

§1. Kvant mexanikasının meydana çıxma səbəbləri

Keçən əsrin 80–90-cı illərinə qədər təbiətdə müşahidə olunan fiziki hadisələr klassik fizika adlanan Nyuton mexanikası və Maksvel elektrodinamikası qanunları əsasında izah olunurdu. O dövrə görə bizi əhatə edən aləm maddi zərrəciklərdən (atom və molekullardan) təşkil olunmuş maddədən və sahələrdən (məsələn, elektromaqnit sahəsi, qravitasiya sahəsi və s.) ibarətdir.

Klassik fizika baxımından maddi zərrəcik və sahə bir-birindən təbiətə kəskin fərqlənən maddi varlıqdır. Zərrəcik fəzada lokalizə olunur, sahə isə bu xassəyə malik deyil.

Maddi nöqtə kimi qəbul edilən zərrəciyin hərəkəti Nyuton mexanikasının qanunlarına tabedir, onun halı hər anda vəziyyətini təyin edən üç koordinatın və sürətinin (impulsun) verilməsi ilə tapılır. Zərrəciyin koordinatlarının və impulsunun zamandan asılılığının tapılması (bu asılılıq Nyuton və ya Hamilton tənliklərinin həlli ilə tapılır) onun hərəkəti haqqında tam məlumat almağa imkan verir.

Atom və molekullardan təşkil olunmuş makroskopik cisimlərin xassələri isə atom və molekulların hərəkət qanunları ilə müəyyən olunur. Başqa sözlə, makrocisimlərin xassələrini tapmaq üçün onu təşkil edən və bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olan atom və molekulların hər biri üçün Nyuton hərəkət tənliyi yazılmalı və alınan diferensial tənliklər sistemi həll edilməli idi.

Prinsipcə riyazi yerinə yetirilə bilməyən bu problem makrocisimlərin xassələrini öyrənmək üçün statistik metodlardan istifadəsi ilə əvəz olundu. Beləliklə, statistik fizika yaranmağa və inkişaf etməyə başladı.

Sahənin təsviri isə xeyli mürəkkəb bir məsələdir. Onun halını təyin etmək üçün baxılan anda fəzanın hər bir nöqtəsində onun intensivlik vektorunun (məsələn, elektromaqnit sahəsi üçün elektrik və maqnit intensivlik

vektorlarının) qiymət və istiqamətini bilmək, yəni sonsuz sayda kəmiyyətləri vermək lazımdır.

Beləliklə, sahəyə dalğavari proses kimi baxılırdı və əksər optik hadisələr (ışığın difraksiyası, interferensiyası və hətta düzxətt boyunca yayılması) işığın dalğavari təbiətinə malik olması baxımından yaxşı izah oluna bilirdi. Işığın təbiətinə olan bu baxış Maksvel tərəfindən elektromaqnit nəzəriyyəsi yaradıldıqdan sonra daha da möhkəmləndi və o göstərdi ki, işıq elektromaqnit dalğalarının xüsusi şəklidir.

Lakin, XIX əsrin sonunda və XX əsrin əvvəllərində mikroaləmdə (atom və molekullarda) gedən fiziki hadisələrin hərtərəfli və dərinlən öyrənilməsi göstərdi ki, klassik fizika bu hadisələrin izahında böyük çətinliklərlə və ziddiyyətlərlə qarşılaşır. Mikroaləmdə gedən hadisələr klassik fizika baxımından izah oluna bilmir və onların izahı üçün tamamilə yeni prinsiplər axtarıb tapmaq lazımdır.

O vaxtlar fiziklərin qarşısında iki əsas problem – maddənin həqiqi mikroskopik quruluşunu aydınlaşdırmaq və maddi zərrəciklərin bir-biri ilə və elektromaqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsir qanununu tapmaq problemləri dururdu.

Maddənin atomar quruluşa malik olması təsəvvürlərinin möhkəmlənməsi ilə yanaşı elektromaqnit şüalanma haqqındakı biliklərin dərinləşməsi prosesi baş verirdi. 1895-ci ildə çox qısa dalğalı rentgen şüalarının kəşfi və onların kristallardan difraksiyası işığın dalğavari təbiətə malik olması təsəvvürlərini daha da möhkəmləndirdi. Lakin işığın cisimlər tərəfindən udulması, buraxılması və səpilməsi proseslərinin təcrübə olaraq hərtərəfli öyrənilməsi və alınan nəticələrin klassik nəzəriyyənin köməyi ilə izah edilmə cəhdləri təcrübə ilə nəzəriyyə arasında ilk ziddiyyətləri meydana çıxardı.

Maddə ilə tarazlıqda olan elektromaqnit şüalanmada (istilik şüalanması) və ya mütləq qara cismin şüalanmasında intensivliyin tezliyə görə paylanması (spektral sıxlığı) öyrənilən zaman klassik fizika ilk həlledilməz çətinliklə qarşılaşdı. Spektral sıxlıq üçün klassik fizikanın ümumi prinsipləri əsasında alınmış nəzəri düstur, təcrübə nəticələri tam izah edə bilmədi. Bu çətinliyi həll etmək üçün 1900-cü ildə Plank şüalanmanın maddə ilə klassik qarşılıqlı təsir qanunundan imtina etməli oldu. Plank fərz etdi ki, şüalanmanın maddə tərəfindən udulub buraxılması, klassik fizikada iddia olunduğu kimi, arasıkəsilmədən yox, diskret enerji porsiyaları və ya *ışığı kvantları* şəklində baş verir. Planka görə, kvantin enerjisi ε şüalanmanın tezliyi ν ilə mütənasibdir. $\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$, mütənasiblik əmsali h – Plank sabiti adlanır. Onu uyğun şəkildə seçməklə ($h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ C.san). Plank spektral sıxlıq üçün bütün temperatur oblastında təcrübə ilə yaxşı uyğunluq verən aşağıdakı ifadəni almışdı:

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} (e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1)^{-1}; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ C.san.}$$

burada ω – işığın dairəvi tezliyi, T – mütləq temperaturdur.

Fotoeffekt və sonralar Kompton effekt hadisələrində müşahidə olunan qanunauyğunluqlar da klassik fizika çərçivəsində izah edilə bilmədi. Fotoeffekt – maddənin üzərinə düşən işığın ondan elektronları qoparıb çıxarması hadisəsinə deyilir. Təcrübə göstərir ki, çıxan elektronların sayı işığın intensivliyi ilə mütənəsbədir; elektronların sürəti isə intensivlikdən yox, yalnız işığın tezliyindən asılıdır; hər istənilən tezlikli işıq fotoeffekt yarada bilmir (fotoeffektin qırmızı sərhəddi) və elektronların çıxış anı işığın düşmə anı ilə eynidir.

İşığın dalğavari proses olduğu və maddə tərəfindən kəsilmədən udulduğu qəbul edilsə, fotoeffektin sadalanan üç xassəsini izah etmək mümkün olmur. Doğrudan da, bu halda elektronun sürəti intensivlikdən asılı olmalı, istənilən tezlikli şüalar fotoeffekt yaratmalı (enerjini kəsilmədən udan elektron kifayət qədər enerji toplayandan sonra maddədən kənara çıxar) və elektronun çıxış anı işığın düşmə anı üzərinə düşməməli idi.

Fotoeffektdə müşahidə olunan qanunauyğunluqları izah etmək üçün Eynşteyn, Plankdan irəli gedərək fərz etdi ki, yalnız işığın udulub buraxılması prosesləri diskret xarakter daşımır, işığın özü də diskret quruluşa malikdir, o kvantlardan – fotonlardan ibarətdir və həmin kvantlar $\varepsilon = h\nu$

enerjisindən başqa hərəkəti istiqamətində yönəlmiş $p = \frac{\varepsilon}{c}$ impulsuna da

malikdir. Eynşteynə görə, fotonun korpuskul (zərrəvi) xarakteristikaları olan enerji ε və impuls p ilə onun (ışığın) dalğavari xarakteristikaları olan tezlik və dalğa uzunluğu λ

$$\begin{aligned} \varepsilon &= h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} &= \hbar\vec{k} \left(\left| \vec{k} \right| = \frac{2\pi}{\lambda} \right) \end{aligned} \quad (1.1)$$

münasibətləri ilə bağlıdır. Burada $\omega = 2\pi\nu$, ν – xətti tezlik, k – dalğa ədədidir.

Bu fərziyyə əsasında Eynşteyn fotoeffektdə müşahidə olunan təcrübə qanunları çox asanlıqla izah edə bildi: işıq enerjisi $h\nu$ olan foton seli şəklində hərəkət edir. Foton, məsələn, metalın elektronu üzərinə düşdükdə o, fotonu bütövlükdə udur və $h\nu$ qədər enerji alır. Metalı tərk etmək üçün isə elektron A qədər çıxış işi görməlidir. Buradan çıxan elektronun kinetik

enerjisi $\frac{m\nu^2}{2} = h\nu - A$ olur. Hər metal üçün A sabit kəmiyyət olduğundan elektronun kinetik enerjisi (sürəti) yalnız işığın tezliyindən asılı olur və fotoeffektin qırmızı sərhəddi üçün $\frac{m\nu^2}{2} = 0$ şərtindən $h\nu_y = A$ alınır. Deməli, fotoeffekt yalnız $h\nu \geq A$ şərtini ödəyən işıq yarada bilər. Bütün bu iddialar təcrübədə tam təsdiq olunmuşdu.

İşığın fotonlar selindən ibarət olmaq fərziyyəsi Kompton effektini də tam izah etməyə imkan verir. Kompton effekt – rentgen şüalarının atomda zəif bağlanmış (sərbəst) elektronlardan səpilməsi hadisəsidir. Kompton səpilmədə səpilən şüanın dalğa uzunluğu λ' , düşən şüanın dalğa uzunluğu λ -dan böyük olur və bu $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ fərqi düşən şüanın tezliyindən asılı olmayıb, yalnız səpilmə bucağı θ (şüanın düşmə və səpilmə istiqamətləri arasındakı bucaq) ilə təyin olunur: $\Delta\lambda = \frac{\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}$ (burada $\lambda = \frac{\hbar}{mc} -$

Kompton dalğa uzunluğu adlanır, m – elektronun sükunət kütləsi, c – işıq sürətidir). Səpilən xəttin intensivliyinə gəldikdə isə o, ağır atomlar tərəfə getdikcə zəifləyir.

Fotona enerji və impulsu (1.1) ilə təyin edilmiş zərrəcik, işığın sərbəst elektrondan səpilməsinə isə iki zərrəciyin toqquşma nəticəsi kimi baxsaq, yuxarıdakı hər iki fakt asanlıqla izah olunur. Doğrudan da, zərrəciklərin toqquşma prosesində enerji və impuls saxlanır. Elektronun atomdakı sürəti ν , c işıq sürətindən çox kiçik olduğundan, birinci yaxınlaşmada başlanğıcda onu sükunətdə qəbul etmək olar ($E_o = m_o c^2$, $\vec{p}_o = 0$). Fotonun başlanğıc və son enerjilərini $\hbar\omega$ və $\hbar\omega'$, impulslarını $\hbar\vec{k}$ və $\hbar\vec{k}'$, təpmə elektronun enerjisini E , impulsunu \vec{p} ilə işarə etsək (şəkil 1), saxlanma qanunları

$$m_o c^2 + \hbar\omega = \hbar\omega' + E \quad \left(E = \sqrt{c^2 p^2 + m_o^2 c^4} \right) \quad (1.2)$$

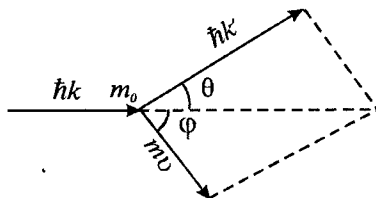
$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \vec{p}$$

kimi yazılır, buradan isə asanlıqla, $\Delta\lambda$ üçün yuxarıdakı ifadə alınır. Səpilmə spektral xəttinin intensivliyinin azalması isə fotonun atomdakı elektronla yox, bütöv atomla toqquşma nəticəsi olur. Məlumdur ki, belə elastiki toqquşmada fotonun tezliyi dəyişmir.

Beləliklə, elektromaqnit şüalanma (ışıq) ikilik xarakterinə – dalğa-zərrəcik (korpuskul) dualizminə malikdir. Difraksiya və interferensiya hadisələrində işıq özünü dalğavari proses, tarazlıqdakı şüalanmada, atomun

şüaudma və şüaburaxma proseslərində, fotoeffekt və Kompton effekt hadisələrində isə özünü zərrəciklər (fotonlar) seli kimi aparır. Işıq nə klassik zərrəciklər selidir, nə də klassik dalğaların superpozisiyasıdır. Fotonların qəfəsdən səpilməsində ekranda alınan difraksiya mənzərəsi o zaman izah olunur ki, səpilmə prosesində qəfəs ayrı-ayrı yarıqlar şəklində yox, bütövlükdə iştirak etsin, yəni işıq qəfəsdən dalğalar kimi səpilsin, ekrana isə zərrəciklər seli kimi düşsün, başqa sözlə, eyni bir prosesdə işıq həm dalğa, həm də zərrə xassələrinə malik olsun.

Klassik nəzəriyyənin qarşılaşdığı ikinci növ çətinliklər maddənin quruluşu problemi ilə əlaqədardır. Klassik nəzəriyyəyə görə, bütün maddələr atom və molekullardan korpuskullardan təşkil olunmuşdur. Elektronun kəşfi, kimyəvi elementlərin atomlarının mürəkkəb tərkibli (α , β və γ) radioaktiv şüalar buraxması faktlarından alınır ki, atom mürəkkəb quruluşa malikdir. Atomun neytrallığı, α və β -şüalarının isə uyğun olaraq müsbət və mənfi elektrik yükü daşması, atomda bu yüklərin paylanması qanununu tapmaq, yəni onun quruluşunu müəyyən etmək problemini qarşıya qoydu.



Şəkil 1. Işığın sərbəst elektrondan səpilməsi (Kompton effekt).

Atomun ilk modeli C.Tomson tərəfindən təklif olunmuşdu. Tomsona görə atomda müsbət yük onun bütün həcmi boyu kəsilmədən bərabər paylanır, mənfi yüklər isə onun daxilində (dənizdə özbaşına buraxılmış qayıq kimi) xaos hərəkat edir.

Radioaktivliyin kəşfi, digər tərəfdən, alimlərə atomun quruluşunu tədqiq etmək üçün güclü vasitə verdi. Radioaktiv elementlərin buraxdığı yüksək enerjili α -zərrəciklər (onlar hidrogen atomundan təxminən dörd dəfə ağırdır) atomun quruluşunu öyrənmək üçün zond rolunu oynadı. α -zərrəcikləri müxtəlif elementlərin atomlarından səpmək yolu ilə Rezerford atomun müasir modelini qura bildi. Rezerforda görə, atom, mərkəzində yerləşmiş kiçik ölçülü (10^{-13} - 10^{-12} sm) müsbət yüklü nüvədən və onun ətrafında fırlanan mənfi yüklü elektronlardan ibarətdir. Atomun, demək olar ki, bütün kütləsi onun nüvəsində toplanmışdır.

Yarandığı ilk gündən atomun Rezerford modeli mühüm çətinliklərlə qarşılaşdı. Elektronlar ilə nüvə arasındakı Kulon qarşılıqlı təsirdən başqa, onların elektromaqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsirini də nəzərə alsaq, Lorensin elektron nəzəriyyəsinə görə, nüvə ətrafında təcillə hərəkət edən (əyri xətlə

hərəkət həmişə təcilli hərəkətdir) elektron tezliyi fırlanma tezliyinə bərabər elektromaqnit dalğaları şüalandırmalıdır. Bunun nəticəsində onun kinetik enerjisi tədricən azalar və nüvəyə yaxınlaşaraq onun üzərinə düşər – atom dayanıqlı olmaz. Digər tərəfdən isə maddənin buraxma və udma spektrləri kəsilməz (bütöv) spektr olardı. Təcrübə göstərir ki, atom dayanıqlıdır və atomların (maddənin) buraxma və udma spektrləri xəttidir. Məsələn: ən sadə atom olan hidrogen atomunun spektrində müşahidə olunan spektral xətlərin tezlikləri $\nu = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$ düsturuna ilə təyin olunur, burada

R – Ridberq sabiti, n və m isə tam müsbət ədədlərdir ($m > n$).

Atomun quruluşu ilə əlaqədar ziddiyyətləri həll etmək üçün məşhur Danimarka alimi Nils Bor işıq kvantlarının mövcud olması hipotezini tamamlayan iki postulat irəli sürdü (1913). Birinci postulata görə, atomar sistemlər yalnız müəyyən stasionar və ya kvant hallarında ola bilər, bu hallarda sistemin enerjisi $E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$ kimi diskret qiymətlər alır və elektronların hərəkətinə baxmayaraq atom bu hallarda enerji şüalandırmır. Atom yalnız bir stasionar haldan digərinə keçdikdə, bu halların enerjiləri fərqi bərabər enerji udur və ya buraxır. Enerjini ya işıq kvantı şəklində şüalandırır və ya da toqquşduğu başqa sistemə verməklə itirir. İkinci postulata görə, keçid zamanı buraxılan və ya udulan kvantın ν tezliyi, Borun

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h}$$

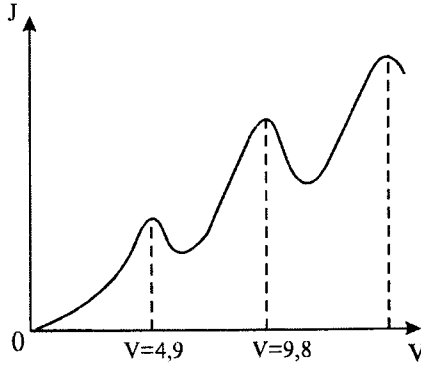
nömrəli stasionar halların enerjisi, h – Plank sabitidir.

Bu iki postulat, dairəvi və elliptik orbitlərin kvantlanması qaydaları ilə birlikdə hidrogen atomunun stasionar hallarının enerjisini hesablamağa, Ritsin kombinasiya prinsipini, Frank–Hers təcrübələrinin nəticələrini və atomar sistemlərin spektrlərinin xəttiliyini izah etməyə imkan verdi.

Doğrudan da, Frank–Hers təcrübəsində elektronlar civənin buxarından keçdikdə dövrədə gərginlik artdıqca əvvəl cərəyan şiddəti artır. Sürətlənən elektronların enerjisi $4,9 \text{ eV}$, $9,8 \text{ eV}$, $13,8 \text{ eV}$ və i.a. qiymətlərə çatdıqda cərəyan şiddəti birdən-birə kəskin azalır. Bu ona dəlalət edir ki, elektronlar civə atomları ilə toqquşduqda atomlar, enerjinin yuxarıda göstərilən qiymətlərində onu (enerjini) bütövlükdə qəbul edərək həyəcanlanır. Enerjisini itirmiş elektronların yaratdığı cərəyan isə kəskin zəifləyir (şəkil 2). Bu da civə atomlarının enerjisinin yalnız sıçrayışla dəyişdiyinə dəlalət edir.

Lakin Bor nəzəriyyəsi tam kvant nəzəriyyəsi deyildi. Bor nəzəriyyəsinə elektronun atomdakı hərəkəti Nyuton hərəkət tənlikləri ilə təsvir olunurdu, onun həllindən alınmış sonsuz sayda trayektoriyalardan, orbitlərin kvantlanması qaydaları (empirik daxil edilmiş) əsasında stasionar orbitlər seçilirdi. Orbit anlayışı isə kvantlanma qaydaları ilə birgə mövcud ola bilməz. Zərrəciyin trayektoriya boyunca hərəkəti dedikdə elə hərəkət başa düşülür ki, hər istənilən anda onun koordinat və impulsu məlum olsun və

onlar zamana görə kəsilmədən dəyişsin. Onda zərrəciyin enerjisinin sıçrayışla dəyişməsindən danışmaq olmaz, çünki trayektoriya boyunca hərəkətdə enerji həmişə kəsilmədən dəyişməlidir.



Şəkil 2. Frank və Hers təcrübəsinin nəticəsi.

Bor nəzəriyyəsi spektral xətlərin intensivliyini hesablamaq, ümumiyyətlə bütün səpilmə proseslərini tədqiq etmək, stasionar halda olan elektronun enerji şüalandırma bilməməsi səbəblərini aydınlaşdırmaq, mürəkkəb atomların stasionar hallarını hesablamaq və i.a. kimi məsələlərin həllində aradan qaldırılma bilməyən çətinliklərlə rastlaşdı.

§2. De-Broyl dalğaları və onların faza və qrup sürətləri

Bor nəzəriyyəsində meydana çıxan çətinlikləri həll etmək məqsədi ilə de-Broyl işığın təbiətində müşahidə olunan dalğa-zərrə dualizminin maddi zərrəciklər üçün də doğru olduğunu iddia edən hipotez irəli sürdü (1924). Bu hipotezə görə, zərrəciklər korpuskul xassələrlə yanaşı dalğavari xassələrə də malik olmalıdır. Başqa sözlə, dalğa-zərrə dualizmi mikroobyektlərin ümumi xassələrini ifadə edir və o, maddi zərrəciklər üçün də doğru olmalıdır.

De-Broylu bu fikrə gətirən həndəsi optika ilə Nyuton mexanikası arasındakı oxşarlıq olmuşdu. Məlumdur ki, klassik mexanikanın maddi nöqtə, trayektoriya, hərəkət sürəti, $U(x, y, z)$ potensialı sahədə hərəkət anlayışlarına həndəsi optikada uyğun olaraq, dalğa paketi, şüa, qrup sürəti və sındırma əmsali $n(x, y, z)$ olan mühitdə hərəkət anlayışları qarşı qoyulur. Klas-

sik mexanikada təsir adlanan $S = \int_a^b L dt$ inteqralı (L – mexaniki sistemin

Laqranj funksiyasıdır) istənilən mexaniki sistemin iki a və b nöqtələri arasındakı həqiqi hərəkəti üçün ekstremal qiymət alır, yəni hərəkətin həqiqi trayektoriyası boyunca onun variasiyası sıfır olur: $\delta S = 0$ (ən kiçik təsir prinsipi). Həndəsi optikada da şüa variasiya prinsipi ilə təyin olunur. Bu prinsip Ferma prinsipi adlanır. Ferma prinsipinə görə, işıq iki a və b nöqtələrini birləşdirən yollardan (şüalardan) eləsinə seçir ki, o yolda işığın yayılma müddəti ən kiçik olsun, yəni şüanın optik yolunun uzunluğu və yaxud

onun, yolun başlanğıc və sonundakı fazalar fərqi $\Delta\varphi = \varphi_b - \varphi_a = \int_a^b \frac{ds}{\lambda}$

minimum olsun. Buradan isə çıxır ki, optik yol boyunca $\Delta\varphi$ -nin variasiyası sıfıra bərabərdir: $\delta(\Delta\varphi) = 0$, burada s optik yolun uzunluğu, λ dalğa uzunluğudur.

Həndəsi optika işığın bütün xassələrini (məsələn, interferensiya, difraksiya) izah edə bilmədiyinə görə dalğa optikası meydana çıxır və çox qısa dalğalar üçün dalğa optikasının qanunauyğunluqları həndəsi optikanın qanunauyğunluqları üzərinə düşür, yəni həndəsi optika dalğa optikasının limit halı olur. Klassik mexanikanın tətbiqindəki məhdudiyət (atomun daxilindəki hərəkətə tətbiq oluna bilməməsi), de-Broylun fikrincə, maddənin hər cür hərəkətinə tətbiq oluna bilən və limit halında, yəni qısa dalğalar üçün klassik mexanikaya keçən yeni mexanikanın – dalğavari mexanikanın mövcud olmaması ilə əlaqədardır.

Bu müddəə əsasında de-Broyl enerjisi E , impulsu \vec{p} olan zərrəciyin sərbəst hərəkətini

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.1)$$

müstəvi monoxromatik dalğa ilə əlaqələndirməyi təklif etmişdir. De-Broyla görə dalğanın xarakteristikaları olan ω tezliyi və \vec{k} dalğa vektoru ilə zərrəciyin xarakteristikaları olan E enerjisi və \vec{p} impulsu arasındakı rabitə, Eynşteynin işıq kvantları (fotonları) üçün təklif etdiyi (1.1) düsturlarına oxşar düsturlarla verilməlidir:

$$E = \hbar\omega, \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \text{və ya} \quad |\vec{p}| = \frac{2\pi}{\lambda} \hbar. \quad (2.2)$$

Burada λ – dalğa uzunluğudur və (2.2)-də ikinci düstur de-Broyl düsturu adlanır.

(2.2)-dən istifadə edib, (2.1)-də ω və \vec{k} -ni E və \vec{p} ilə əvəz etsək,

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et + \frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \quad (2.3)$$

alanıq. Zərrəciyin E , \vec{p} xarakteristikaları ilə təyin olunan (2.3) dalğaları de-Broyl dalğaları adlanır.

Vakuumda yayılan (2.1) işıq dalğaları ilə zərrəciyin sərbəst hərəkətinə uyğun (2.3) de-Broyl dalğaları arasındakı zahiri oxşarlığa baxmayaraq, onların təbiəti və amplitudlarının xassələri arasında heç bir ümumilik yoxdur. Ona görə də, (2.3) dalğalarının fiziki mahiyyəti (mənası) optik dalğaların fiziki mahiyyəti ilə eyni deyildir. Bu məsələyə biz §4-də toxunacağıq. İndi isə de-Broyl dalğalarının xassələri ilə tanış olaq.

De-Broyl dalğalarının faza sürətini təyin edək. Faza sürəti fazanın $\omega t - \vec{k}\vec{r} = \frac{1}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r}) = \text{const}$ qiymətinin fəzada yerdəyişmə sürətinə bərabərdir. Sadəlik üçün x oxunu dalğanın yayılma istiqamətində yönəltsek, v_ϕ faza sürəti $Edt - pdx = 0$ tənliyindən təyin olunur:

$$v_\phi = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} > c. \quad (2.4)$$

Buradan görünür ki, de-Broyl dalğalarının v_ϕ faza sürəti işıq sürətindən böyükdür. Bu heç də nisbilik nəzəriyyəsinin tələblərinə zidd deyildir. Faza sürəti təcrübədə ölçülə bilmir. Onu ölçməkdən ötrü bütün fəza boyunca yayılmış müstəvi dalğanın fəzanın hər hansı bir nöqtəsində fazasının qiymətini qeyd edib, axırıcının fəzada yerdəyişməsinə müşahidə etmək lazımdır. Belə bir əməliyyatı bir dalğa halında aparmaq mümkün deyildir. Onu fəzada eyni zamanda yayılan iki və ikidən çox dalğalar üçün (dalğaların interferensiyası) aparmaq olar. Bu isə qrup sürəti anlayışına gətirir (aşağı bax). Digər tərəfdən, faza sürəti mühitdə nə signalın yayılma sürəti, nə də enerjinin daşınma sürətini xarakterizə etmir, yəni o, elə bir fiziki mənaya malik deyildir.

Sərbəst hərəkət halında belə de-Broyl dalğalarının v_ϕ faza sürəti k dalğa ədədindən asılıdır:

$$v_\phi = \frac{E}{p} = \frac{c}{k} \sqrt{k^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}} = f(k),$$

(burada m_0 – zərrəciyin sükunətdəki kütləsidir). Bu isə de-Broyl dalğalarının, işıq dalğalarından fərqli olaraq (ışıq dalğaları üçün $v_\phi = c$), boş fəzada da dispersiyaya uğradığını göstərir.

İndi də de-Broyl dalğalarının qrup sürətini tapaq. Bunun üçün dalğa ədədi çox kiçik $k_0 - \Delta k \leq k \leq k_0 + \Delta k$ intervalında qiymət alan dalğa qrupunun x istiqamətində hərəkət etdiyini fərz edək. Onların interferensiya etmələri nəticəsində alınan yekun dalğa (dalğa paketi)

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{-i\omega t + ikx} dk,$$

şəklində olar. $k - k_0$ fərqi çox kiçik olduğundan $\omega(k)$ -ni $\Delta k = k - k_0$ -ın üstlərinə görə sıraya ayıraq

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_o \Delta k + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} \right) (\Delta k)^2 + \dots$$

Onda k -ni $k = k_0 + k - k_0 = k_0 + \Delta k$ şəklində yazıb, $A(k)$ -nin k -ya görə zəif dəyişdiyini nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= A(k_0) e^{-i\omega_0 t + ik_0 x} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{-i \left[\left(\frac{d\omega}{dk} \right)_o t - x \right] \Delta k} dk = \\ &= 2A(k_0) \frac{\sin \left[\left(\frac{d\omega}{dk} \right)_o t - x \right] \Delta k}{\left(\frac{d\omega}{dk} \right)_o t - x} e^{-i\omega_0 t + ik_0 x} = A(x, t) e^{-i\omega_0 t + ik_0 x} \end{aligned}$$

alınar, burada $\omega_0 = \omega(k_0)$, Δk -nin kiçik olması hesabına x və t -yə görə olduqca yavaş dəyişən $A(x, t)$ kəmiyyətinə monoxromatik dalğanın amplitudu kimi baxmaq olar. O, $x = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_o t$ nöqtəsində ən böyük (maksimum),

ondan kənarında isə sıfıra yaxın qiymət alır. Amplitudun bu maksimum qiyməti fəzada, yəqin ki,

$$v_{qr} = \frac{x}{t} = \frac{d\omega}{dk}$$

sürəti ilə yerini dəyişər. Bu sürət dalğa qrupunun birgə yayılma sürəti olub, qrup sürəti adlanır. De-Broyl dalğaları üçün

$$v_{qr} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} = \frac{c^2 p}{E} = v$$

olur, burada v —zərrəciyin hərəkət sürətidir.

Deməli, de-Broyl dalğalarının qrup sürəti mikrozərrəciyin fəzada hərəkət sürəti üzərinə düşür. Digər tərəfdən, zərrəciyin ölçüləri sonlu olduğundan ona qarşı qoyulan dalğanın ölçüləri məhdud olmalıdır. Buradan çıxır ki, birinci baxışda mikrozərrəciyə tezlikləri bir-birinə çox yaxın de-Broyl dalğalarının toplusu, yəni dalğa paketi kimi baxmaq olar. Lakin bu iddia gündəlik müşahidəyə ziddir. De-Broyl dalğaları hətta boş fəzada dispersiyaya uğradığından, belə paket çox qısa bir müddətdə (məsələn, elektron üçün təxminən 10^{-26} san-dan sonra) fəzada yayılaraq dağılar. Mikrozərrəcik isə hərəkəti zamanı fərdiliyini və lokallığını saxlayır.

Beləliklə, mikrozərrəcik nə müstəvi de-Broyl dalğası və nə də onlardan təşkil olunmuş dalğa paketi ilə eyniləşdirilə bilməz, yəni de-Broyl dalğalarına, klassik mənada, hər hansı mühitdə yaranan və yayılan real dalğalar kimi baxmaq olmaz.

§3. Mikrozərrəciklərin (de-Broyl dalğalarının) difraksiyası

Mikrozərrəciklərin zərrə xassələri çoxdan məlum idi. Məsələn, onlar doymuş buxarla dolu Vilson kamerasından keçdikdə yolunda təsadüf olunan molekulları ionlaşdırır, yaranmış ionlar kondensasiya mərkəzi rolunu oynayır və üzərinə ifrat doymuş buxarı kondensasiya etdirir. Əmələ gəlmiş damcılar zənciri nazik xətt (iz) şəklində müşahidə olunur. Qalın laylı foto lövhə üzərinə sürtülmüş emulsiyada da mikrozərrəciklər buna oxşar izlər buraxır. Deməli, burada mikrozərrəciklər, adi hissəciklər kimi, trayektoriya boyunca hərəkət edir.

De-Broylun hipotezi doğrudursa, mikrozərrəciklər dalğavari xassələrə də malik olmalıdır. Hər bir hipotez kimi, bu hipotez də yalnız təcrübədə təsdiq olunan sonra doğru hesab oluna bilər.

Başqa sözlə, mikrozərrəciklər üçün difraksiya və interferensiya hadisələri müşahidə olunmalıdır. Optikadan bildiyimiz kimi, işıq dalğalarının difraksiya etməsi üçün onların dalğa uzunluğu yarığın və ya difraksiya

qəfəsi sabitinin ölçüləri tərtibində olmalıdır. De-Broyl dalğalarının difraksiya qəfəsini müəyyən etmək üçün onların dalğa uzunluğunun tərtibini tapaq.

(2.2) münasibətlərinə görə de-Broyl dalğasının dalğa uzunluğu

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (3.1)$$

Zərrəciyin sürətinin $v < c$ olduğunu qəbul etsək (yəni relyativistik effektləri nəzərə almasaq),

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} \quad (3.2)$$

olar. Zərrəciyin elektrostatik sahə vasitəsi ilə sürətləndirildiyini qəbul etsək, onun sürəti sahənin potensialı V ilə təyin olunur

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{eV}{300}. \quad (3.3)$$

v -nin (3.3)-dən tapılmış qiymətini (3.2)-də yazsaq,

$$\lambda = \sqrt{\frac{4\pi^2\hbar^2}{me}} \sqrt{\frac{150}{V}} \quad (3.4)$$

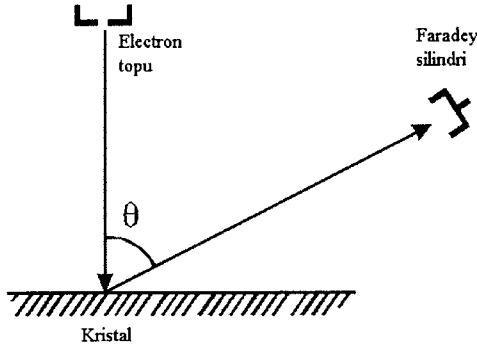
alırıq. Buradan görünür ki, mikrozərrəciyin kütləsi m və sürətləndirici potensial V böyük olduqca, ona uyğun de-Broyl dalğasının dalğa uzunluğu kiçik olur. Kvant mexanikasında aparılan mülahizələr adətən elektron misali üzərində qurulduğundan (3.4) düsturunu elektron dalğaları üçün ($m_e = 9 \cdot 10^{-28} q$, $e = 4,8 \cdot 10^{-10}$ el.stat.vahid, $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-27}$ *erq.san*) yazaq:

$$\lambda_e \approx \sqrt{\frac{150}{V}} \text{ \AA}. \quad (3.5)$$

Başqa zərrəciyə uyğun (protona, neytrona, atoma, molekul və i.a.) dalğanın uzunluğu isə $\lambda = \lambda_e \frac{m_e}{M}$ (burada M – uyğun zərrəciyin kütləsidir) düsturu ilə tapılır. $V = 150$ eB olanda $\lambda_e \approx 1 \text{ \AA}$, $V = 10^4$ eB olanda isə

$\lambda_e \approx 0,122 \text{ \AA}$ və i.a. olur. Beləliklə, elektron dalğalarının dalğa uzunluğu, rentgen şüalarının dalğa uzunluğu kimi anqstrom (\AA) tərtibindədir. Deməli, rentgen şüaları üçün difraksiya qəfəsi rolunu oynayan və qəfəs sabiti \AA tərtibində olan kristal maddələr elektronların difraksiyasını müşahidə etmək üçün yaxşı vasitə (qəfəs) ola bilər.

Elektronların difraksiyası ilk dəfə Devis və Cermer (1927) təcrübələrində elektronların monokristallardan səpilməsi öyrənilən zaman müşahidə olunmuşdu. Devis və Cermer təcrübəsinin sxemi şəkil 3-də verilmişdir.



Şəkil 3. Elektronların difraksiyasını nümayiş etdirən təcrübənin sxemi.

Elektron topundan çıxan elektron dəstəsi kristalın səthinə perpendikulyar istiqamətdə yönəldilir və müxtəlif θ bucaqları altında səpilməmiş elektronların intensivliyi qalvanometr vasitəsilə ölçülür. Təcrübədə götürülmüş enerjilərdə ($\sim 50 \text{ eV}$) elektronların kristalın dərinliklərinə girmə halları çox seyrək təsadüf edildiyindən belə səpilməyə müstəvi difraksiya qəfəsindən səpilmə kimi baxmaq olur. Bu halda difraksiya maksimumlarının vəziyyəti

$$n\lambda = 2d \sin \theta.$$

Vulf-Breqq düsturu ilə təyin olunur; burada d – müstəvi qəfəsin sabiti, θ – səpilmə bucağı, n – difraksiya maksimumlarının tərtibidir. Alınmış difraksiya mənzərəsi bu düstura tam uyğun olmuşdu.

Elektronlar, rentgen şüalarına oxşar olaraq, nazik metal lövhələrdən və ya olduqca kiçik kristallardan ibarət nazik toz təbəqəsindən keçdikdə də difraksiyaya uğrayır. Səpilən elektronların yoluna düşən dəstənin istiqamətinə perpendikulyar fotolövhə qoyulsa, fotolövhədə bir-birini əvəz edən qaranlıq və işıq konsentrik zolaqlar ardıcılığından ibarət difraksiya mənzərəsi alınır. Bu üsulla elektronların difraksiyası, bir-birindən asılı olmayaraq, P.S.Tartakovski və H.P.Tomson (1928) tərəfindən müşahidə edilmişdi.

Elektrona adi klassik zərrəcik kimi baxmaqla elektronların verdiyi difraksiya mənzərəsini izah etmək mümkün deyildir. Doğrudan da, fərz edək ki, biz, müstəvi difraksiya qəfəsinin yalnız bir yarığından keçən (onun qalan yarıqları bu və ya başqa bir vasitə ilə bağlanmışdır) elektronlar dəstəsinin müxtəlif bucaqlar altında paylanmasını müşahidə edirik. Elektronlar klassik mexanikanın qanunlarına uyğun olaraq müəyyən trayektoriyalar üzrə hərəkət etmiş və yarığın kənarları ilə qarşılıqlı təsirdə olmamış olsaydı, qarşıda qoyulmuş fotolövhdə yarığın şəklini təkrar edən ləkə alınardı. Əslində isə elektronlar yarığın atomları ilə qarşılıqlı təsirdə olur. Atomlar xaosit istilik hərəkəti etdiyindən qarşılıqlı təsir təsadüfi xarakter daşıyır və səpilən elektronların fotolövhdə paylanması təsadüfi kəmiyyətlərin paylanması qanununa uyğun olaraq Qauss paylanması şəklində olardı. Lakin, yuxarıda dediyimiz kimi, fotolövhdə əsl difraksiya mənzərəsi alınır, yəni işıq və qaranlıq konsentrik zolaqlar ardıcıl olaraq bir-birini əvəz edir.

Bəlkə elektronlar, trayektoriyaların hamısı üzrə yox, Bør nəzəriyyəsinə olduğu kimi, yalnız müəyyən şəkildə seçilmiş trayektoriyalar boyunca hərəkət edərək difraksiya mənzərəsi yaradır. Belə olmuş olsaydı, iki yarıqdan alınan difraksiya mənzərəsi, yarıqlardan növbə ilə biri bağlandıqda alınan iki mənzərənin toplusu olardı. Çünki, yarıqların birindən keçən elektron öz trayektoriyası boyunca hərəkət edib, qarşıdakı ekrana düşər və ona ikinci yarığın təsiri olmaz, belə ki, hər bir elektron yarıqların yalnız birindən keçir. Lakin elektron dəstəsi üçün iki yarıqdan alınan difraksiya mənzərəsi tam mənası ilə optikada müşahidə olunan uyğun difraksiya mənzərəsinə oxşayır. Başqa sözlə, bir yarıqdan keçən elektrona ikinci yarığın təsiri olur. Bu isə yalnız dalğalara xas olan xassədir.

Difraksiya mənzərəsi bəlkə də elektronların bir-biri ilə qarşılıqlı təsir nəticəsi və yaxud çoxlu sayda elektronların eyni zamanda təcrübədə iştirakı nəticəsidir, ayrı-ayrı elektronlar isə özlərini tamamilə başqa cür aparır.

1949-cu ildə L.Biberman, N.Suşkin və V.Fabrikant ardıcıl buraxılan elektronlar arasındakı zaman fasiləsini xeyli böyük götürərək, onları difraksiya qurğusundan bir-bir buraxmışdılar. Hər elektron fotolövhdə düşdüyü nöqtədə buraxdığı ləkə ilə qeyd alınır. Təcrübədə müşahidə olunmuşdu ki, qurğudan az sayda elektronlar keçdikdə onların fotolövhdə buraxdığı ləkələr, pis atıcının atdığı güllələrin hədəfdə səpələnməsinə oxşar olaraq pərakəndə səpələnir (paylanır), lakin təcrübəni uzun müddət davam etdirib, qurğudan çoxlu sayda elektron buraxdıqda fotolövhdə difraksiya mənzərəsi alınır və heç də elektron dəstələri vasitəsilə alınan difraksiya mənzərəsindən fərqlənmir.

Bu təcrübələr göstərir ki, elektron dalğavari xassələrə malikdir və onunla müəyyən bir dalğavari proses bağlıdır. Lakin yuxarıda dediyimiz kimi, elektronu hər hansı bir real dalğa (dalğa paketi) ilə eyniləşdirmək olmaz, çünki, bu halda yalnız bir elektron bütün difraksiya mənzərəsini vermiş olardı. Təcrübədə elektron fotolövhenin yalnız bir nöqtəsinə düşür və həmin nöqtədə ləkə buraxır, difraksiya mənzərəsi isə bu hadisənin

kifayət qədər çoxlu sayda təkrar olunması nəticəsi olur, başqa sözlə, mikrozərrəciklərin dalğavari xassələri, fotonlar halında olduğu kimi, statistik xarakter daşıyır. Ayrılıqda götürülmüş elektron və ya onların az miqdarı üçün isə dalğavi xassələr əyani şəkildə müşahidə olunmur.

Bütün bu dediklərimiz yalnız o zaman nisbətən başa düşülə bilər ki, elektronun adi klassik hissəcikdən fərqləndiyini və bu fərqin onların fotolövhədə buraxdığı ləkələrin vəziyyətinin klassik mexanika qanunlarından tamamilə fərqli qanunlarla təyin edildiyini qəbul edək. Doğrudan da, yuxarıda şərh olunan difraksiya təcrübələrindən çıxır ki, elektronun fotolövhəyə düşdüyü nöqtənin vəziyyəti, klassik hissəciyin düşdüyü nöqtənin vəziyyətini müəyyən edən Nyuton mexanikası qanunları ilə yox, statistik qanunlarla təyin olunmalıdır.

Maraqlı burasıdır ki, elektron (və ya istənilən başqa mikrozərrəcik), fotonlara oxşar olaraq, eyni bir təcrübədə özünü həm dalğa və həm də zərrəcik kimi aparır. Elektronlar yarıqdan keçdikdə onların dalğa xassələri büruzə verir, belə ki yarığın arxasında difraksiya mənzərəsi alınır. Yarıqdan sonra qoyulmuş ekrana düşdükdə isə onun zərrə (korpuskul) xassələri meydana çıxır, belə ki elektronlardan hər biri ekranın müəyyən bir nöqtəsinə düşür. Deməli, elektron yarıqdan «dalğa» kimi keçir, ekranda isə «zərrəcik» kimi qeydə alınır. Lakin bu heç də elektronun əvvəlcə dalğa, sonra isə zərrəcik olması demək deyildir.

Deməli elektron, eləcə də başqa mikrozərrəciklər nə «təmiz» dalğa və nə də klassik mənada «təmiz» zərrəcikdir. Onun hərəkəti eyni zamanda dalğa və zərrə xassələri ilə xarakterizə olunur. Verilmiş şəraitdən asılı olaraq, bu və ya başqa dərəcədə onun dalğa və ya zərrə xassələri meydana çıxır. Ona görə də dalğa-zərrə düalizminə mikrozərrəciyin müxtəlif şəraitdə müxtəlif xassələri nümayiş etdirən potensial imkanı kimi baxmaq lazımdır. Beləliklə, mikrozərrəcik yalnız özünəməxsus xassələrə malik, bir-birinə tam əks olan bu iki məfhumu özündə birləşdirən bir varlıqdır, yəni mikrozərrəciyə əyani model qarşı qoymaq mümkün deyildir.

II FƏSİL

KVANT MEXANİKASININ RİYAZİ ƏSASLARI

§4. Dalğa funksiyası və onun fiziki mahiyyəti

Yuxarıda (§2) göstərdik ki, enerjisi E , impulsu \vec{p} olan hər bir sərbəst zərrəciyə (2.3) ifadəsi ilə verilmiş $\Psi(x, t)^*$ de-Broyl dalğası qarşı qoyulur.

* x ilə sistemin bütün koordinatlar çoxluğu işarə olunur: birzərrəcikli sistem üçün $x \rightarrow x$, y , z çoxluğunu, N -zərrəcikli sistem üçün isə $x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N$ çoxluğunu ifadə edir.

Koordinatlardan və zamandan asılı olan və baxılan dalğanın amplitudu rolunu oynayan bu funksiya dalğa funksiyası və ya sadəcə Ψ -funksiya adlanır. Yalnız sərbəst zərrəciyin dalğa funksiyası (2.3) kimi sadə şəklə malikdir. İxtiyari $V(x,t)$ potensial sahədə hərəkət edən zərrəciyə uyğun Ψ -funksiyanın analitik ifadəsi mürəkkəbdir və o, $V(x,t)$ -yə uyğun sahənin təbiəti ilə təyin olunur.

Ψ -funksiyanın fiziki mahiyyətini dərk etmək məqsədi ilə yuxarıda biz onu dalğa paketi kimi göstərmək və ya da zərrəciyin hərəkətini paketin hərəkəti ilə əvəz etməyə cəhd göstərdik. Lakin bu mümkün olmadı, çünki paketlər fəzada yayılaraq dağılır, zərrəciklər isə belə xassəyə malik deyildir.

Elektronların difraksiyası təcrübələri ilə tanış olduqda gördük ki, kristaldan səpilən elektronun fotolövhenin bu və ya başqa nöqtəsinə düşməsi hadisəsi təsadüfi xarakter daşıyır. Yalnız belə hadisələrin çoxlu sayda təkrarı difraksiya mənzərəsini verir. Bu isə göstərir ki, elektronların fotolövhdə paylanması statistik qanunlara tabedir və bu paylanma hər hansı paylanma funksiyası vasitəsilə xarakterizə olunmalıdır. Bütün bunları nəzərə alaraq Maks Born Ψ -funksiyanı statistik mənalandıрмаğı təklif etmişdi (1926-cı il). M.Borna görə baxılan anda fəzanın hər hansı bir yerində de-Broyl dalğasının $|\Psi(x,t)|^2$ intensivliyi, zərrəciyin həmin yerdə olma ehtimalı ilə mütənasibdir. Başqa sözlə, $|\Psi(x,t)|^2 dV$ kəmiyyəti zərrəciyin t anında (x) nöqtəsi ətrafında götürülmüş $dV = dx dy dz = (dx)$ elementar fəza həcmində olma ehtimalı ilə mütənasib olmalıdır:

$$dW(x,t) \sim |\Psi(x,t)|^2 dV \quad (4.1)$$

və ya

$$dW(x,t) \sim C \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) (dx), \quad (4.1')$$

burada $\Psi^*(x,t)$ – Ψ -funksiyaya kompleks qoşma funksiyadır, C – mütənasiblik əmsəlidir.

Beləliklə, Ψ -funksiyanın özü ümumiyyətlə, kompleks kəmiyyətdir və heç bir fiziki mənaya malik deyildir, yalnız onun modulunun kvadratı $|\Psi(x,t)|^2$ fiziki mənə kəsb edir. Ona görə də Ψ -funksiyanın təsvir etdiyi sahə klassik fizikada məlum olan elektromaqnit və akustik sahələr kimi real sahələrdən kəskin fərqlənir. De-Broyl dalğaları sahəsi riyazi məfhumdan başqa bir şey deyildir.

Ψ -funksiyanın statistik mənasından alınır ki, onun üçün aşağıdakı mün-

sibətlər ödənilməlidir:

1. Zərrəciyin fəzanın müxtəlif yerlərində olma hadisələri bir-birini inkar edən hadisələr olduğundan, onun t anında fəzanın hər hansı bir nöqtəsində olma hadisəsi labüd hadisədir (labüd hadisənin ehtimalı vahidə bərabərdir) və onun ehtimalı, ehtimalların toplanması teoreminə əsasən, (4.1) bərabərliyindən bütün fəza üzrə götürülmüş

$$\int d W(x,t) = \int W(x,t) dV = C \int \Psi^*(x,t) \Psi'(x,t) (dx) = 1 \quad (4.2)$$

inteqralı ilə təyin olunur. (4.2) bərabərliyi ehtimalın **normalanma şərti** adlanır. Bu şərti ödəyən dalğa funksiyalarına **normalanmış funksiyalar** deyilir.

2. Normalanmış funksiyalar üçün (4.1) bərabərliyini

$$dW = w(dx) = \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) (dx) \quad (4.3)$$

kimi yazmaq olar, burada $\Psi(x,t) = \sqrt{C} \Psi'(x,t)$ və

$$w = \Psi^* \Psi = |\Psi|^2 \quad (4.4)$$

ehtimal sıxlığı adlanır.

3. (4.2) normalanma şərtindən çıxır ki, Ψ dalğa funksiyası modulu vahidə bərabər olan $e^{i\alpha}$ vuruq dəqiqliyi ilə təyin olunur, burada α – koordinatların və zamanın ixtiyari həqiqi funksiyasıdır:

$$\Psi' = e^{i\alpha} \Psi \quad (4.5)$$

buradan

$$\Psi^* \Psi' = \Psi^* \Psi$$

olduğundan, bu vuruq kvant mexanikasında alınan nəticələrə heç bir təsir göstərmir.

4. Bəzi hallarda dalğa funksiyası modulunun kvadratı $|\Psi|^2$ sonsuz uzaqda götürülmüş nöqtədə sıfıra bərabər olmur. Bu zaman $\int |\Psi|^2 (dx)$ inteqralı dağılır və $|\Psi(x,t)|^2$ ifadəsi zərrəciyin t anında (x) nöqtəsində olma ehtimalı sıxlığını xarakterizə etmir. Onun müxtəlif nöqtələrdə götürülmüş qiymətlərinin nisbəti sonlu qaldığından, bu nisbət müəyyən mənə kəsb edir və o **nisbi ehtimal** adlanır.

Yuxarıda dalğa funksiyasının fiziki mahiyyətini aydınlaşdırdıqda fərz

etmişdik ki, kvant mexaniki sistem yalnız bir zərrəcikdən təşkil olunmuşdur. Çoxlu zərrəciklər sistemini təsvir edən Ψ - funksiya üçün də kvant mexanikasında həmin fiziki məna saxlanır. Axırını halda dalğa funksiyası N zərrəciyin koordinatlarından və zamandan asılı olur (fərz olunur ki, zərrəciklərin hamısı üçün zamanın gedişi eynidir):

$$\Psi(x, t) = \Psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N, t).$$

Onda

$$dW = |\Psi(x, t)|^2 (dx_1)(dx_2)\dots(dx_N) \quad (4.6)$$

ifadəsi birinci zərrəciyin $(dx_1) = dx_1 dy_1 dz_1$ elementar həcmində, ikinci zərrəciyin $(dx_2) = dx_2 dy_2 dz_2$ elementar həcmində və i.a. eyni zamanda olma ehtimalını ifadə edir. (4.6) ehtimalı məlum olarsa, şərti ehtimal anlayışından istifadə edərək, başqa zərrəciklərin istənilən vəziyyətlərində, məsələn, birinci zərrəciyin (dx_1) , həcmində olma ehtimalı

$$dW_1 = (dx_1) \int |\Psi(x, t)|^2 (dx_2)\dots(dx_N)$$

şəklində olar. Buna oxşar ifadələr digər zərrəciklər üçün də yazıla bilər.

Mürəkkəb sistemlərin dalğa funksiyası üçün də (4.2)-(4.5) şərtləri ödənilir. Məsələn, onların normalanma şərti

$$\int \Psi^* \Psi d(x) = \int \Psi^* (x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N, t) \Psi(x_1, \dots, x_N, t) (dx_1)\dots(dx_N) = 1 \quad (4.7)$$

olur. Bu və buna oxşar inteqralların hesablanması üçün $3N$ dəyişəndən asılı funksiyanın ifadəsi məlum olmalı, yəni $3N$ ölçülü fəzada onun qiyməti verilməlidir. Belə fəzalar fiziki reallıq olmayıb, riyazi məfhumdur. $3N$ ölçülü koordinatlar fəzası **konfigurasiya fəzası** adlanır. Beləliklə, (4.6) və (4.7) ifadələrinə, uyğun olaraq, konfigurasiya fəzasında verilmiş ehtimal və normalanma şərti kimi baxmaq lazımdır.

Zərrəciklər sisteminin dalğa funksiyasının daxil edilməsi, onu elektromaqnit və akustik dalğalara oxşar real dalğaları təsvir edən bir funksiya kimi mənalandırmağın qeyri-mümkün olduğunu əyani şəkildə nümayiş etdirir. Doğrudan da, real fəzada yayılan dalğavari proses üç dəyişən koordinatla və zamanla xarakterizə olunur. Mürəkkəb sistemin dalğa funksiyası isə $3N$ koordinatdan asılı olduğundan, o, ölçüsü $3N$ olan fəzada yayılan dalğanı təsvir edir. Belə dalğaların həqiqətən mövcud olduğuna hökm vermək, konfigurasiya fəzasının reallığını qəbul etmək və ya da bir zərrəcikli sistem ilə zərrəciklər sisteminin dalğa funksiyalarının eyni bir fiziki mənaya malik olması iddiasından əl çəkmək lazım olardı. Bunların hər ikisi isə təcrübi faktlara tam ziddir.

Əksər hallarda bir zərrəcikdən ibarət kvant mexaniki sistemin Ψ funksiyasının analitik ifadəsini tapmaq mümkün olur (IV–X fəsillərə bax). N qarşılıqlı təsirdə olan zərrəciklər sistemini təsvir edən dalğa funksiyasının analitik ifadəsini tapmaq məsələsi isə hələ indiyə qədər ümumi şəkildə həll olunmamışdır. Lakin fərz etsək ki, zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir kifayət qədər zəifdir və birinci yaxınlaşmada sistemə qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sistemi kimi baxmaq olar, onda sistemin Ψ -funksiyasının tapılması məsələsi, bir zərrəcikli sistemin dalğa funksiyasının tapılması məsələsinə gətirilir.

Qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sisteminə i -ci zərrəciyin (dx_i), k -ci zərrəciyin (dx_k) və i.a. elementar fəza həcmində olma hadisələri asılı olmayan hadisələr olduğundan, belə hadisələrin eyni zamanda müşahidə olunma ehtimalı, ehtimalların vurulması teoreminə görə, onların ayrılıqda müşahidə olunma ehtimalları hasilinə bərabərdir:

$$dW = dW_1 dW_2 \dots dW_N. \quad (4.8)$$

Digər tərəfdən, (4.1)-ə görə i -ci zərrəciyin (dx_i) elementar həcmdə olma ehtimalı

$$dW_i = |\Psi_i(x_i, t)|^2 (dx_i)$$

bərabər olduğundan ($i=1, 2, \dots, N$), (4.8) ifadəsini

$$dW = |\Psi(x, t)|^2 (dx) = |\Psi_1(x_1, t)|^2 |\Psi_2(x_2, t)|^2 \dots |\Psi_N(x_N, t)|^2 (dx_1) \dots (dx_N)$$

şəklində yazmaq olar. Bu axıncı ifadədən görünür ki, N qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sisteminin dalğa funksiyasını

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x_1, t) \Psi_2(x_2, t) \dots \Psi_N(x_N, t) \quad (4.9)$$

şəklində yazmaq olar.

§5. Superpozisiya prinsipi

Optikada və akustikada dalğaların interferensiyası və dalğa paketlərinin əmələ gəlməsi, bildiyimiz kimi, superpozisiya prinsipinə əsasən izah olunur. Difraksiya zolaqlarının və ya həlqələrinin baxılan nöqtədəki intensivliyi həmin nöqtəyə düşən dalğaların xətti superpozisiyasının nəticəsi kimi hesablanır. İstənilən təbiətli dalğalar üçün doğru olan bu prinsipi de-Broyl dalğaları üçün də söyləmək olar.

Optikada və akustikada superpozisiya prinsipi bir hipotez kimi qəbul

olunur. Kvant mexanikasında isə onu dalğa funksiyasının statistik mənasından bir nəticə kimi çıxarmaq olur. Bu axırıncı iddia üzərində müfəssəl dayanaq.

Bor nəzəriyyəsi ilə tanışlıq göstərdi ki, mikrosistemlərin halı həm kəsilmədən və həm də diskret dəyişə bilər. Mülahizələrimizin sadəliyi xatirinə fərz edək ki, baxılan mikrosistemin halı diskret dəyişir və onları 1,2,3,... n kimi nömrələmək olur. De-Broylun təklifinə görə dalğavari mexanikada (kvant mexanikasında) mikrosistemə koordinat və zamandan asılı $\Psi(x,t)$ - dalğa funksiyası qarşı qoyulur. Sistemin dalğa funksiyası məlum olarsa, o, baxılan sistem haqqında tam məlumat almağa, yəni, sonra görəcəyimiz kimi, onun enerjisini, impulsunu, hərəkət miqdarı momentini və sistemin halını təyin edən başqa fiziki kəmiyyətləri hesablamağa imkan verir. Bu mənada Ψ -funksiya sistemin halını tam və birqiymətli təyin edir, yəni müəyyən bir funksiyaya sistemin yeganə bir halı uyğun gəlir. Bu iddiaya əsasən, sistemin ala biləcək 1,2,3,... n hallar ardıcılığına uyğun dalğa funksiyalar çoxluğunu $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$ və sistemin bu hallarının ehtimallarını W_1, W_2, \dots, W_N ilə işarə edək.

Sistemin bu halların hansına malik olduğu bizə məlum olmaya da bilər. Ümumiyyətlə, bu elə də mühüm deyildir. Vacibdir ki, sistem mümkün olan halların hər hansı birinə malik olsun. Sistemin müəyyən hala malik olmasını hadisə adlandırsaq, onun 1, 2, ..., n hallarında olma hadisələr ardıcılığı bir-birini inkar edən hadisələr çoxluğu təşkil edir. Ehtimalların toplanması teoreminə əsasən, sistemin yuxarıdakı halların hər hansı birində (fərqi yoxdur hansında) olma ehtimalı, halların hər birində ayrılıqda olma ehtimallarının cəminə bərabərdir:

$$W = W_1 + W_2 + \dots + W_N \quad (5.1)$$

Belə hadisə labüd hadisə olduğundan, bu cəm vahidə bərabər olmalıdır:

$$W = \sum_i W_i = 1. \quad (5.1')$$

Belə W ehtimalı **tam ehtimal** adlanır.

Buradan, sistemin tam ehtimalla verilən halına uyğun dalğa funksiyasını tapmaq məsələsi meydana çıxır. Göstərək ki, bu funksiyanı (5.1)-ə əsasən aşağıdakı kimi yazmaq olur:

$$\Psi(x,t) = C_1 \Psi_1(x,t) + C_2 \Psi_2(x,t) + \dots + C_N \Psi_N(x,t) = \sum_i C_i \Psi_i(x,t), \quad (5.2)$$

burada C_1, C_2, \dots – ixtiyari sabitlərdir.

Funksiyanın bu şəkllə malik olacağını elektronların difraksiyası təcrübələrindən də başa düşmək olur. Bundan ötrü elektronların iki yarıqdan di-

fraksiyasına baxaq. Səpilən elektronun onun yoluna perpendikulyar qoyulmuş ekranın müəyyən bir nöqtəsinə düşmə ehtimalı, yuxarıdakı mülahizələrə görə, bu yarıqlardan yayılan dalğaların həmin nöqtədə yaratdıqları $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ yekun amplitudu ilə təyin olunur: $W \sim |\Psi(x, t)|^2$, belə ki, baxılan nöqtəyə düşən elektron ya birinci və ya ikinci yarıqdan keçmiş olur.

(5.2)-dən tam ehtimallı halın ehtimal sıxlığı üçün

$$\Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = \sum_i C_i^* C_i \Psi_i^* \Psi_i + \sum_{i \neq k} C_i^* C_k \Psi_i^* \Psi_k,$$

tam ehtimal üçün isə

$$\int \Psi^* \Psi(dx) = \sum_i C_i^* C_i \int \Psi_i^* \Psi_i(dx) + \sum_{i \neq k} C_i^* C_k \int \Psi_i^*(x, t) \Psi_k(x, t)(dx) \quad (5.3)$$

alınar.

Dalğa funksiyasının statistik mənasına əsasən (5.3)-də birinci cəm altındakı inteqral, i halına malik sistemin baxılan fəzanın hər hansı bir nöqtəsində olma ehtimalını ifadə edir. Yəqin ki, belə hadisə ləbüdü hadisədir və onun ehtimalı vahidə bərabərdir:

$$\int \Psi_i^*(x, t) \Psi_i(x, t)(dx) = 1. \quad (5.4)$$

Həmin ifadənin ikinci cəmi altındakı inteqral isə, buna oxşar olaraq, i və k hallarında olan sistemin eyni zamanda fəzanın hər hansı bir nöqtəsində olma ehtimalını xarakterizə edir. Lakin sistem eyni zamanda iki müxtəlif halda ola bilmədiyindən, yəqin ki, belə ehtimal sıfıra bərabərdir:

$$\int \Psi_i^*(x, t) \Psi_k(x, t)(dx) = 0. \quad (5.5)$$

(5.4) münasibəti Ψ_i -funksiyasının normalanma şərti, (5.5) münasibəti isə ortoqonallıq şərti adlanır. Bu iki şərti

$$\int \Psi_i^*(x, t) \Psi_k(x, t)(dx) = \delta_{ik} \quad (5.6)$$

kimi də yazmaq olar. (5.6) münasibəti dalğa funksiyalarının ortonormallıq şərti adlanır, burada

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases} \quad (5.7)$$

Kroneker simvoludur.

(5.3) münasibətilə verilən tam ehtimalın labüd hadisənin ehtimalı olduğunu nəzərə alsaq, (5.4) və (5.5)-ə əsasən

$$\int \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)(dx) = \sum_i C_i^* C_i = 1 \quad (5.8)$$

alırıq. (5.1) və (5.8) bərabərliklərinin müqayisəsindən çıxır ki,

$$C_i^* C_i = |C_i|^2 = W_i \quad (5.9)$$

sistemin i halının (halında olma) ehtimalıdır.

C_i əmsalları üçün bu son iddianın doğru olduğunu qəbul etsək, (5.2) ilə verilmiş $\Psi(x,t)$ funksiyası tam ehtimallı halın dalğa funksiyası olur və (5.2) bərabərliyinin özü isə kvant mexanikasında *superpozisiya prinsipi* adlanır.

Sistemin halı kəsilmədən dəyişdikdə (5.2) bərabərliyində halın indeksi olan i üzrə cəm, halı xarakterizə edən və kəsilmədən dəyişən hər hansı l fiziki kəmiyyəti üzrə götürülmüş inteqralla əvəz olunur.

$$\Psi(x,t) = \int C(L)\Psi_L(x,t)dL, \quad (5.10)$$

burada $\Psi_L(x,t)$ — L -in verilmiş qiymətinə uyğun halın dalğa funksiyasıdır. (5.10) ifadəsi kəsilməz spektr üçün superpozisiya prinsipi olur. Superpozisiya prinsipinin fiziki mahiyyətinə gəldikdə onu belə ifadə etmək olar: kvant mexaniki sistem $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ funksiyaları ilə təyin olunan hallarda ola bilərsə, o, (5.2) və ya (5.10) ilə verilmiş $\Psi(x,t)$ funksiyası ilə təsvir olunan halda da ola bilər. Superpozisiya prinsipi kvant mexanikasının əsas prinsiplərindəndir. Xüsusi halda ondan bir nəticə olaraq çıxır ki, Ψ funksiyanın ödədiyi bütün tənliklər xətti diferensial tənliklər olmalıdır.

Doğrudan da, xətti diferensial tənliklər nəzəriyyəsinəndən məlumdur ki, $f_1(x), f_2(x), \dots$ funksiyaları xətti diferensial tənliyin xüsusi həlləridirsə, onların ixtiyari kombinasiyası olan

$$f(x) = \sum_i a_i f_i(x) \quad (5.11)$$

funksiyası da həmin tənliyin (ümumi) həllidir, burada a_1, a_2, \dots ixtiyari sabitlərdir. (5.11) və (5.2) münasibətləri isə tamamilə ekvivalentdir.

(5.2) və (5.9) ifadələrindən görünür ki, kvant mexanikasında superpozisiya prinsipi klassik mexanikadakı superpozisiya prinsipindən kəskin fərqlənir. Doğrudan da, klassik mexanikada $f(x)$ funksiyası ilə xarakterizə olunan iki eyni rəqsi topladıqda amplitudu 2 dəfə böyük olan yeni rəqs

alınır. Kvant mexanikasında isə $\Psi(x,t)$ funksiyası ilə onu ixtiyari C sabitinə vurmaqla alınan $C\Psi(x,t)$ funksiyası müxtəlif halları yox, sistemin eyni bir halını xarakterizə edir.

Beləliklə, klassik mexanikada superpozisiya prinsipi dalğaların amplitudlarının superpozisiyasını ifadə edirsə, kvant mexanikasında o, sistemin kvant hallarının superpozisiyasını ifadə edir.

§6. Operatorlar və onların əsas xassələri

a) Operator anlayışı. Operator dedikdə, ümumi şəkildə, ixtiyari $f(x)$ funksiyasını başqa bir $\varphi(x)$ funksiyasına çevirən əməliyyat başa düşülür. Operatoru \tilde{L} ilə işarə etsək, bu əməliyyat

$$\varphi(x) = \tilde{L} f(x) \quad (6.1)$$

kimi yazılır. Operatorun funksiyaya təsiri onların hasili kimi yazılır və bu hasildə funksiya həmişə operatordan sağda dayanır.

Operatorun fizikaya daxiləmə zəruriyyətinə və onun təsir qanununa aşağıdakı şəkildə gəlmək olar. Fərz edək ki, sistemin halını xarakterizə edən hər hansı L fiziki kəmiyyəti təcrübədə ölçülən zaman onun üçün N_1 dəfə L_1 qiyməti, N_2 dəfə L_2 qiyməti və i.a. alınmışdır.

Sistemin baxılan halını xarakterizə edən fiziki kəmiyyətin dəqiq qiymətinə yaxın qiymət, yəqin ki, onun ədədi orta qiymətidir. Axırını L_s kimi işarə etsək,

$$L_s = \frac{N_1 L_1 + N_2 L_2 + \dots + N_n L_n}{N_1 + N_2 + \dots + N_n} = \frac{N_1 L_1 + N_2 L_2 + \dots + N_n L_n}{N}$$

olar.

Ölçülərin sayı böyük olduqca L -in ədədi orta qiyməti onun dəqiq qiymətinə daha çox yaxın olar. Ölçülərin sayını sonsuz böyük götürdükdə isə ($N \rightarrow \infty$) L_s ədədinin limit qiyməti

$$\lim_{N \rightarrow \infty} L_s = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_1}{N} L_1 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_2}{N} L_2 + \dots + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_n}{N} L_n$$

şəklində təyin olunur.

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_i}{N} = W_i \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

aparılan ölçü zamanı L üçün L_i qiymətinin alınması ehtimalı olduğundan

$$\lim_{N \rightarrow \infty} L_n = \bar{L} = W_1 L_1 + W_2 L_2 + \dots + W_n L_n = \sum_i W_i L_i \quad (6.2)$$

olar. L -in bu cür təyin olunmuş \bar{L} qiyməti **statistik orta qiymət** adlanır.

L fiziki kəmiyyətinin müxtəlif qiymətləri sistemin uyğun hallarını xarakterizə etdiyindən W_i -yə sistemin i halının ehtimalı kimi də baxmaq olar. Digər tərəfdən, (5.9)-a görə sistemin i halının ehtimalı $C_i^* C_i$ -yə bərabər olduğundan, (6.2) münasibəti

$$\bar{L} = \sum_i C_i^* C_i L_i \quad (6.3)$$

şəklində də yazıla bilər.

İndi də operatorun təsir qanununu tapaq. Bunun üçün (6.3) ifadəsini elə şəkildə yazaq ki, L -in statistik orta qiyməti, kvant mexaniki sistemin dalğa funksiyasının (5.2) sırasına daxil olan C_i əmsalları ilə yox, Ψ - funksiyanın özü ilə ifadə olunsun.

Bunun üçün L fiziki kəmiyyətinə uyğun operatoru \tilde{L} ilə işarə edib \tilde{L} -in baxılan sistemin $\Psi(x, t)$ -dalğa funksiyasına təsirini

$$\bar{L} = \int \Psi^*(x, t) \tilde{L} \Psi(x, t) (d^3 x) \quad (6.4)$$

kimi təyin edək. $\Psi^*(x, t)$ və $\Psi(x, t)$ -funksiyalarının (5.2) ilə verilmiş ifadələri əsasında göstərmək olar ki, (6.4) bərabərliyi (6.3) bərabərliyinə tam ekvivalentdir. Doğrudan da (6.4)-də $\Psi(x, t)$ və $\Psi^*(x, t)$ -ni uyğun (5.2) sıraları ilə əvəz etsək,

$$\bar{L} = \sum_{i,k} C_i^* C_k \int \Psi_i^*(x, t) \tilde{L} \Psi_k(x, t) (d^3 x) \quad (6.5)$$

alınar. (6.5) və (6.3) ifadələrinin müqayisəsindən görünür ki, onların bir-birinin üzərinə düşməsi üçün

$$\int \Psi_i^* \tilde{L} \Psi_k (dx) = L_k \delta_{ki} \quad (6.6)$$

və ya

$$\tilde{L} \Psi_k = L_k \Psi_k. \quad (6.6')$$

Sistemin halı kəsilmədən dəyişirsə, (5.10) -a əsasən (6.6) tənliyi

$$\bar{L} \Psi_L = L \Psi_L \quad (6.6'')$$

şəklində yazılır.

Burada L_k sabit ədəd olub, L fiziki kəmiyyətin sistemin k halındakı qiymətidir. (6.6') və (6.6'') bərabərlikləri hər istənilən Ψ_k və Ψ_L funksiyaları üçün ödənilir, yəni onlar eynilik olmayıb tənlikdir.

Hər hansı \bar{L} operatoru üçün (6.6') və (6.6'') tənlikləri ödənildikdə L_k və ya L kəmiyyəti operatorun məxsusi qiyməti, Ψ_k və ya Ψ_L funksiyaları isə onun məxsusi funksiyaları adlanır.

Sistem L operatorunun Ψ_i məxsus funksiyası ilə təyin olunan halda olarsa, (5.2) sırasında yalnız bir $\Psi = C_i \Psi_i$ həddi qalır və (6.4) bərabərliyi (6.6') tənliyinə və (5.4) şərtinə əsasən

$$\bar{L} = \int C_i^* C_i \Psi_i \bar{L} \Psi_i(dx) = C_i^* C_i L_i$$

şəklinə düşür. Burada $C_i^* C_i = 1$ olduğundan $\bar{L} = L_i$ alınır. Deməli, baxılan halda L fiziki kəmiyyətinin \bar{L} orta qiyməti onun dəqiq L_i qiyməti üzərinə düşür. Bu o deməkdir ki, bu halda L kəmiyyəti üçün ölçülən qiymət hər dəfə L_i -yə bərabər olacaq.

Sistemin halı məxsusi funksiyaların heç biri üzərinə düşməyən ixtiyari $\Psi(x,t)$ funksiyası ilə təsvir olunursa, yəni sistemin mümkün olan hallardan hansında olduğu məlum deyilsə, L üçün ölçülən qiymət hər dəfə \bar{L} operatorunun məxsusi qiymətlərinin hər hansı birinin üzərinə düşər. Bu halda (6.3) və ya (6.5) ifadəsində $C_i^* C_i$ ($i=1, 2, \dots$) hasilərinin hansının sıfırdan fərqli olduğu məlum olmadığından L -in yalnız (6.3) ilə təyin olunan \bar{L} orta qiymətinin mənası olur. Digər tərəfdən, (6.4) bərabərliyinin sağ tərəfini o vaxt orta qiymət mənasını daşıyan şəkildə yazmaq olar ki, Ψ üçün

$$\bar{L} \Psi = L \cdot \Psi \quad (6.7)$$

tənliyi ödənilsin. Doğrudan da (6.7)-yə əsasən

$$\int \Psi^* \bar{L} \Psi(dx) = \int L \cdot \Psi^* \Psi(dx) = \int L w(x,t)(dx) = \bar{L}$$

alınar. Belə ki, $w = \Psi^* \Psi$, yuxarıda dediyimiz kimi, ehtimal paylanması sıxlığıdır.

Ψ -funksiya (5.2) və ya (5.10) sırası şəklində yazıla bilərsə, (6.7) tənliyinin həlli zamanı L üçün yeganə bir qiymət yox, bütün mümkün olan qiymətlər çoxluğu alınmalıdır. L -in məxsusi qiymətlər çoxluğu $\{L_i\}$ -yə onun *spektri* deyilir.

Bu çoxluq sayıla bilən ardıcılıq təşkil etdikdə *diskret spektr*, kəsilmədən dəyişən ardıcılıq təşkil etdikdə isə *kəsilməz spektr* adlanır. Eyni şəkildə (6.7) tənliyinin həllində Ψ üçün $\{\Psi_i\}$ və ya $\{\Psi_L\}$ funksiyalar çoxluğu alınır və onlar Ψ -nin, uyğun olaraq, diskret və bütöv spektrlərini təşkil edir. Qeyd edək ki, (6.7) tənliyinin həlli olan $\Psi(x,t)$ funksiyası, fiziki tələblərdən çıxan aşağıdakı üç şərti ödəməlidir. O, arqumentlərinin bütün dəyişmə oblastında sonlu, birqiymətli, özü və onun birinci tərtib törəmələri kəsilməz olmalıdır.

\tilde{L} istənilən fiziki kəmiyyətə uyğun operator olduğundan (5.2) və (5.10) ifadələrinə sistemin ixtiyari funksiyasının istənilən operatorun məxsusi funksiyaları üzrə götürülmüş sıraları kimi baxmaq olar. Sistemin ixtiyari funksiyası dedikdə $\{\Psi_L\}$ və ya $\{\Psi_i\}$ funksiyalar çoxluğundan hər hansı biri başa düşülür. Məsələn, Ψ_i üçün (5.2) ifadəsi

$$\Psi_i = \sum_k a_{ik} \varphi_k \quad (5.2')$$

şəklində yazılar, burada $\{\varphi_k\}$, məsələn, hər hansı bir \tilde{G} operatorunun məxsusi funksiyalarının tam çoxluğu olmalıdır.

Sistemin ixtiyari funksiyasını (5.2) və ya (5.2') şəklində ifadə etməyə imkan verən Ψ_i (və ya φ_k) funksiyalar sisteminə **tam sistem** deyilir ((8.18) ifadəsi tam sistemliyin riyazi şərtidir, bax §8).

Operatorun müxtəlif məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyaları fərqləndirmək üçün kəsilməz spektr halında ya dalğa funksiyasının sağ tərəfində aşağıdan fiziki kəmiyyətin işarəsi yazılır $\Psi_L(x,t)$ və ya həmin funksiya $|L| >$ kimi işarə olunur. Diskret spektr halında məxsusi qiymətləri L_1, L_2, \dots, L_n kimi nömrələmək mümkün olduğundan, funksiya $\Psi_{L_i}(x,t)$ əvəzində sadəcə ya $\Psi_i(x,t)$ və ya da $|i| >$ şəklində yazılır.

Bəzən fiziki kəmiyyətin müəyyən $L=L_i$ qiymətinə xətti asılı olmayan bir neçə məxsusi funksiya, yəni sistemin bir neçə müxtəlif halı uyğun gəlir. Sistemin belə hallarına **cırplaşmış hallar**, funksiyaların sayına isə bu halın **cırplaşma dərəcəsi** deyilir. Cırplaşma halın dalğa funksiyaları $\Psi_{i1}, \Psi_{i2}, \dots, \Psi_{if}$ kimi iki indekslə təchiz olunur. Burada f halın cırplaşma dərəcəsini göstərən indeksdir. Ψ_{if} -funksiyaları, ümumiyyətlə, qarşılıqlı ortoqonal olmur. Onların xətti kombinasiyası olan

$$\varphi_i = \sum_{\alpha} C_{i\alpha} \Psi_{i\alpha}$$

funksiyaları da L_r -yə uyğun məxsusi funksiyalar olar. Halın cırlaşma dərəcəsi sonlu olduqda φ_i -funksiyalarını ortonormallaşdırmaq olur. $\Psi_{i\alpha}$ funksiyalarının α indeksinə görə $\{\Psi_{i\alpha}\}$ çoxluğu hər hansı başqa bir \tilde{G} operatorunun məxsusi funksiyalar spektrini təşkil edərsə, yəni onlar üçün

$$\tilde{G} \Psi_{i\alpha} = G_{\alpha} \Psi_{i\alpha}$$

tənliyi ödənərsə (burada $G_{\alpha} = \tilde{G}$ operatorunun məxsusi qiymətidir, $\Psi_{i\alpha}$ funksiyaları üçün α indeksinə görə

$$\int \Psi_{i\alpha}^* \Psi_{i\alpha} (dx) = \delta_{\alpha\alpha'}$$

ortonormallanma şərti ödənildiyi zaman $\varphi_i^* \varphi_i$ hasilindən götürülmüş

$$\int \varphi_i^* \varphi_i (dx) = \sum_{\alpha} C_{i\alpha}^* C_{i\alpha}$$

inteqralı L_i -in verilmiş qiymətində G_{α} -nın mümkün qiymətlərindən istənilən birini alma ehtimalını verir.

b) Kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar

Kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar, superpozisiya prinsipinin ödənilməsi üçün yalnız xətti operatorlar olmalıdır; yəni onlar

$$\tilde{L}(a\Psi + b\varphi) = a\tilde{L}\Psi + b\tilde{L}\varphi \quad (6.9)$$

şərtini ödəməlidir: a və b – ixtiyari sabitlərdir.

Operatorların xəttiliyi zəruri şərt olub, kafi şərt deyildir. Ona görə operatorlar üzərinə qoyulan digər məhdudiyyətlər üzərində dayanacaq.

Xətti operatorlar adətən kompleks olduğundan, onların məxsusi qiymətləri də ümumi halda kompleks olur. Sistemin halını xarakterizə edən fiziki kəmiyyətlərin aldığı qiymətlər isə həmişə həqiqidir. Beləliklə, biz elə xətti operatorlar sinfi seçməliyik ki, onların məxsusi qiymətləri həqiqi olsun. Bunun üçün fiziki kəmiyyətin orta qiymətinin həqiqi olması şərtindən istifadə edək:

$$\bar{L} = (\bar{L})^* \quad (6.10)$$

(6.4) əsasən bu şərti

$$\int \Psi^* \tilde{L} \Psi(dx) = \left(\int \Psi^* \tilde{L} \Psi(dx) \right)^* = \int \Psi \tilde{L}^* \Psi^*(dx) \quad (6.10')$$

kimi də yazmaq olar. Lakin asanlıqla göstərmək olar ki, hər xətti operator üçün (6.10') şərti ödənilmir. Doğrudan da Ψ funksiyanı (2.3) müstəvi de-Broyl dalğası şəklində götürsək, məsələn, $\tilde{L} = \frac{\partial}{\partial x}$ xətti operatoru üçün (6.10') şərti ödənilmir. Digər tərəfdən, riyaziyyatdan məlumdur ki, hər bir xətti \tilde{L} operatora

$$\int \Phi \tilde{L} \varphi(dx) = \int \varphi \tilde{L} \Phi(dx) \quad (6.11)$$

bərabərliyini ödəyən \tilde{L} **transpozisiya olunmuş** operator qarşı qoyula bilər. Bu axıncı bərabərlikdə $\Phi = \Psi^*$, $\varphi = \Psi$ götürüb, onu (6.10') ilə müqayisə etsək,

$$\tilde{L} \Psi = \tilde{L}^* \Psi \quad \text{və ya} \quad \tilde{L} = \tilde{L}^* \quad (6.12)$$

alınar. Bu şərti ödəyən operatorlar *ermit operatorlar* adlanırlar. Deməli, operatorların məxsusi qiymətlərinin (yəni fiziki kəmiyyətlərin) həqiqiliyini təmin etmək üçün kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar yalnız ermit operatorlar olmalıdır.

Lakin bəzi hallarda riyazi olaraq qeyri-ermit operatorlardan da istifadə edilir. Belə operatorların məxsusi qiymətləri, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, kompleks olur. Hər bir kompleks L kəmiyyətinə kompleks qoşma L^* kəmiyyəti qarşı qoyulur. Görəsən, hər bir qeyri-ermit operatora ekvivalent qoşma operator qarşı qoymaq olarmı?

Qeyri-ermit \tilde{L} operatorunun məxsusi qiyməti L , ona qoşma \tilde{L}^+ operatorunun məxsusi qiyməti L^* olarsa, onlar (6.7)-yə əsasən

$$\begin{aligned} \tilde{L} \Psi &= L \cdot \Psi \\ \tilde{L}^+ \Psi &= L^* \cdot \Psi \end{aligned} \quad (6.12')$$

tənlilikləri ilə təyin olunur.

Sistemin Ψ ümumi funksiyası üçün həmişə (5.8) normallaşma şərti ödənildiyindən, (6.12') tənliliklərini sol tərəfdən Ψ' -ya vurub, bütün fəza

üzrə inteqralladıqda

$$\begin{aligned} L &= \int \Psi^* \tilde{L} \Psi(dx), \\ L^* &= \int \Psi^* \tilde{L}^* \Psi(dx) \end{aligned} \quad (6.12'')$$

bərabərlikləri alınar. Kompleks qoşma ədədlərin

$$(L)^* = L^*$$

xassəsinə görə bu axırıncı bərabərliyi (6.12'')-dən

$$\int \Psi^* \tilde{L}^* \Psi(dx) = \left(\int \Psi^* \tilde{L} \Psi(dx) \right)^* = \int \Psi \tilde{L}^* \Psi^*(dx)$$

kimi də yazmaq olar. (6.11) şərtinə görə hər bir xətti operatora transpozisiya olunmuş operator qarşı qoyula bildiyindən, yuxarıdakı bərabərlikdə sağda duran inteqralı

$$\int \Psi \tilde{L}^* \Psi^*(dx) = \int \Psi^* \tilde{\tilde{L}}^* \Psi(dx)$$

kimi yazmaq olar, onda

$$\int \Psi \tilde{L}^* \Psi^*(dx) = \int \Psi^* \tilde{\tilde{L}}^* \Psi(dx) \quad (6.13)$$

alınar, başqa sözlə, hər bir xətti qeyri-ermit operatora uyğun qoşma operator

$$\tilde{L}^* = \tilde{\tilde{L}}^* \quad (6.13')$$

kimi təyin olunur. Başqa sözlə, hər hansı xətti qeyri-ermit operatora uyğun qoşma operator tapmaq üçün əvvəlcə verilmiş operatorndan kompleks qoşma götürülür, sonra isə o, transpozisiya edilir (yuxarıdakı mənalarda). Bu iki əməliyyata birlikdə **ermit qoşma** deyilir.

(6.13') bərabərliyi ümumi xarakter daşıyır. O, istənilən xətti operator üçün doğrudur. Xüsusi halda fərz edək ki, \tilde{L} operatoru ermit operatorudur. Onda (6.12) şərtindən kompleks qoşma götürüb, alınan ifadəni (6.13) ilə müqayisə etsək,

$$\tilde{L}^+ = \tilde{L} \quad (6.14)$$

alarıq, yəni ermit operator üçün qoşma operatorunun özünə bərabərdir. Belə operatorlar **özünə qoşma** və ya **ermit operatorlar** adlanırlar.

§7. Operatorlar üzərində əməliyyatlar

a) Xətti operatorların toplanması

İki \tilde{L} və \tilde{F} xətti operatorun cəmi olan \tilde{C} operatoru elə operatora deyilir ki, \tilde{C} -nin ixtiyari dalğa funksiyasına təsir nəticəsi \tilde{L} və \tilde{F} operatorlarının həmin funksiyaya təsir nəticələri cəminə bərabər olsun:

$$\tilde{C} \Psi = (\tilde{L} + \tilde{F}) \Psi = \tilde{L} \Psi + \tilde{F} \Psi \quad (7.1)$$

Lakin (7.1) cəmi heç də \tilde{C} operatorunun məxsusi qiymətlərinin \tilde{L} və \tilde{F} operatorlarının uyğun məxsusi qiymətləri cəmi kimi təyin olunduğunu göstərmir. Ümumi halda onlar arasında əlaqə olmaya da bilər. Bu məsələ üzərində müfəssəl dayanaq. \tilde{L} və \tilde{F} operatorlarına uyğun L və F fiziki kəmiyyətlərinin sistemin eyni bir k -halını təyin etdiyini fərz edək, yəni qəbul edək ki, \tilde{L} və \tilde{F} operatorları eyni zamanda sistemin baxılan k halını xarakterizə edən L_k və F_k məxsusi qiymətlərinə malikdir. Bu halın dalğa funksiyasını $\Psi_k(x,t)$ kimi işarə etsək, (6.6') bərabərliyinə görə \tilde{L} və \tilde{F} üçün

$$\tilde{L} \Psi_k = L_k \Psi_k; \quad \tilde{F} \Psi_k = F_k \Psi_k \quad (7.2)$$

tənlikləri ödənilər. Deməli, Ψ_k funksiyası hər iki operatorun məxsusi dalğa funksiyası olur. Belə hallarda deyirlər ki, operatorlar ümumi dalğa funksiyasına malikdir.

Bu halda \tilde{C} -nin Ψ_k -ya təsirini hesablayaq. (7.1) və (7.2) -yə əsasən

$$\tilde{C} \Psi_k = \tilde{L} \Psi_k + \tilde{F} \Psi_k = L_k \Psi_k + F_k \Psi_k = (L_k + F_k) \Psi_k = C_k \Psi_k$$

yaxud

$$C_k = L_k + F_k \quad (7.3)$$

alınar. Deməli, baxılan halda \tilde{C} -nin məxsusi qiymətləri \tilde{L} və \tilde{F} -in uyğun məxsusi qiymətləri cəminə bərabər olur.

İndi də fərz edək ki, \check{L} və \check{F} operatorları eyni zamanda məxsusi qiymətlərə malik deyil, yəni L və F fiziki kəmiyyətləri sistemin eyni bir halını təyin etmir. Əlbəttə, bu halda \check{L} və \check{F} operatorları **birgə** dalğa funksiyasına malik olmadığından \check{C} -nin məxsusi qiymətləri ilə \check{L} və \check{F} -in məxsusi qiymətləri arasında heç bir əlaqə yoxdur. Lakin bu hal üçün də (7.1) tənliyi öz qüvvəsini saxlayır.

(7.1) bərabərliyini soldan $\Psi^*(x,t)$ funksiyasına vurub, bütün fəza üzrə inteqrallayaq, onda

$$\int \Psi^* \check{C} \Psi(dx) = \int \Psi^* \check{L} \Psi(dx) + \int \Psi^* \check{F} \Psi(dx)$$

alınar. (6.4) münasibətinə görə axırıncını

$$\bar{C} = \bar{L} + \bar{F} \quad (7.4)$$

şəklində yazmaq olar. Deməli, ümumi halda iki müxtəlif \check{L} və \check{F} operatorlarının cəminə bərabər \check{C} operatoru dedikdə elə operator başa düşülür ki, onlara uyğun fiziki kəmiyyətlərin orta qiymətləri üçün (7.4) bərabərliyi ödənilsin.

Operatorların toplanma qaydasına əsasən, verilmiş istənilən qeyri-ermit \check{L} və ona qoşma \check{L}^+ operatorlardan ermit operator quraşdırmaq olar. Göstərək ki,

$$\check{D} = \frac{\check{L} + \check{L}^+}{2} \quad (7.5)$$

operatoru ermit operatorudur. Bunun üçün ondan ermit qoşma götürək:

$$\check{D}^+ = \frac{(\check{L}^+ + \check{L})^+}{2} = \frac{\check{L}^+ + (\check{L}^+)^+}{2}.$$

(6.13)-ə əsasən $(\check{L}^+)^+ = \check{L}$ olduğundan $\check{D}^+ = \check{D}$ olar, yəni \check{D} ermit operatorudur. Buna oxşar olaraq

$$\check{G} = \frac{\check{L} - \check{L}^+}{2}$$

operatorundan ermit qoşma götürək, onda

$$G^* = \frac{\check{L}^+ - (\check{L}^+)^+}{2} = \frac{\check{L}^+ - \check{L}}{2} = -\check{G}. \quad (7.6)$$

Belə \check{G} operatoru **antiermit operator** adlanır. Asanlıqla göstərmək olar ki, antiermit operatoru i -yə (i – xəyali vahid) vurduqda alınan yeni operator ermit olar.

Nəhayət qeyd edək ki, toplanma qaydasına əsasən xətti operatorlar, cəmdə kommutativlik

$$\check{L} + \check{F} = \check{F} + \check{L} \quad (7.7)$$

və assosiativlik

$$\check{L} + (\check{F} + \check{G}) = (\check{L} + \check{F}) + \check{G} \quad (7.8)$$

xassələrinə malikdir.

b) Xətti operatorların vurulması. İki \check{L} və \check{F} xətti operatorun hasili dedikdə elə \check{C} operatoru başa düşülür ki, onun dalğa funksiyasına təsir nəticəsi \check{L} və \check{F} operatorlarının həmin funksiyaya ardıcıl təsiri nəticəsi üzərinə düşsün:

$$\check{C}\Psi = \check{L}\check{F}\Psi = \check{L}(\check{F}\Psi), \quad (7.9)$$

burada $\check{L}\check{F}$ və ya $\check{L}(\check{F})$ yazılışı, Ψ – funksiyasına əvvəlcə \check{F} operatorunun, sonra alınan yeni $\Psi' = \check{F}\Psi$ funksiyasına isə \check{L} operatorunun təsir etdiyini göstərir.

(7.9) əməliyyatı zamanı operatorların hasildə verilmiş ardıcılığını göz-ləmək çox mühümdür. Belə ki, xətti operatorlar üçün $\check{L}\check{F}$ hasilinin təsir nəticəsi $\check{F}\check{L}$ hasilinin təsir nəticəsindən, ümumiyyətlə, fərqlidir.

Hər istənilən iki və ya çox sayda operatorlar hasili üçün həmişə $\check{L}\check{F} \dots = \dots \check{F}\check{L}$ bərabərliyi ödənilmir. Buradan, $\check{C} = \check{L}\check{F} \dots$ operatorunun məxsusi qiymətləri $\check{L}, \check{F}, \dots$ operatorlarının məxsusi qiymətləri ilə həmişə təyin olunmur. Bu məsələni yaxşı başa düşmək üçün aşağıdakı iki halı araşdıraq.

1) Tutaq ki, L və F fiziki kəmiyyətləri eyni zamanda qiymət ala (ölçülə) bilir, yəni sistemin eyni bir $|k\rangle$ halını təyin edir. Bu halın funksiyasını Ψ_k ilə işarə edib, onun \check{L} və \check{F} operatorlarının birgə məxsusi funksiyası olduğunu, yəni onlar üçün (7.2) tənliklərinin ödənildiyini nəzərə alsaq,

$$\tilde{L}(\tilde{F}\Psi_k) = F_k\tilde{L}\Psi_k = L_kF_k\Psi_k \quad (7.10)$$

olar. Burada L_k və $F_k - L$ və F fiziki kəmiyyətlərinin $|k\rangle$ halına uyğun qiymətləridir, ona görə də

$$\tilde{F}\tilde{L}\Psi_k = L_k\tilde{F}\Psi_k = F_kL_k\Psi_k \quad (7.10')$$

olar. (7.10) və (7.10') tənliklərindən

$$\tilde{L}\tilde{F}\Psi_k = \tilde{F}\tilde{L}\Psi_k \text{ və ya } (\tilde{L}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{L})\Psi_k = 0$$

bərabərliyi alınır. (5.2)-yə əsasən istənilən Ψ -funksiyasını Ψ_k funksiyalarının xətti kombinasiyası şəklində göstərmək mümkün olduğundan, yəqin ki, $\tilde{L}\tilde{F}$ və $\tilde{F}\tilde{L}$ operatorlarının Ψ -yə təsiri də bərabər olar:

$$\tilde{L}\tilde{F}\Psi = \tilde{F}\tilde{L}\Psi \text{ və ya } (\tilde{L}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{L})\Psi = 0. \quad (7.11)$$

Axırıncı bərabərlik şərti olaraq

$$\tilde{L}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{L} = 0 \quad (7.11')$$

şəklində yazılır. Operatorların kommutativliyi və ya yerdəyişməsi adlanan bu bərabərlik $[\tilde{L}\tilde{F}] = \tilde{L}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{L}$ kimi işarə olunur və o $[\tilde{L}\tilde{F}] = -[\tilde{F}\tilde{L}]$ xassəsinə malikdir. Hər hansı iki operator üçün (7.11) şərti ödənilirsə, bu operatorlar bir-birilə **kommutasiya** edir. Beləliklə, **iki fiziki kəmiyyət eyni zamanda qiymət ala (ölçülə) bilirsə, onlara uyğun operatorlar bir-birilə kommutasiya edir**. Bunun əks teoremi də doğrudur: istənilən iki operator bir-birilə kommutasiya edirsə, onlar eyni bir məxsusi funksiyaya malikdir və onlara uyğun fiziki kəmiyyətlər eyni zamanda ölçülə bilər.

Qeyd edək ki, hər hansı ədədə də xətti operator kimi baxmaq olar. Onun funksiyaya təsiri funksiyanın ədədə vurulmasına gətirir. Lakin ədədin digər operatorlardan fərqi ondadır ki, o, bütün operatorlarla kommutasiya edir.

2) İndi də L və F fiziki kəmiyyətlərinin eyni zamanda ölçülə bilmədiyini fərz edək. Bu halda \tilde{L} və \tilde{F} operatorlarının hasilinə bərabər olan $\tilde{C} = \tilde{L}\tilde{F}$ operatoru heç bir fiziki kəmiyyətə uyğun gəlmədiyindən, ermit və ya özünə qoşma operator deyildir. Beləliklə, \tilde{C} operatoru **qeyri-ermit**

operator olur və onun məxsusi qiymətləri hasilə daxil olan operatorların məxsusi qiymətlərinin hasili ilə təyin olunmur. Qeyri-ermit operatorların məxsusi qiymətləri adətən kompleks ədədlər olduğundan, ona qoşma operatorun tapılması məsələsi müəyyən əhəmiyyət kəsb edir.

Bunun üçün baxılan operatora uyğun transpozisiya edilmiş (etmiş) operatorun (6.11) təyinindən istifadə edək:

$$\int \Phi \tilde{C} \Psi(dx) = \int \Psi \tilde{C} \Phi(dx)$$

və ya

$$\int \Phi \tilde{L} \tilde{F} \Psi(dx) = \int \Psi (\tilde{L} \tilde{F}) \Phi(dx). \quad (7.12)$$

Axıncı bərabərlikdə soldaki inteqralın şəklini dəyişək. Bunun üçün $\varphi = \tilde{F} \Psi$ götürüb, \tilde{L} -ə uyğun transpozisiya edilmiş operatoru təyin edək:

$$\int \Phi \tilde{L} (\tilde{F} \Psi)(dx) = \int \Phi \tilde{L} \varphi(dx) = \int \varphi \tilde{L} \Phi(dx) = \int (\tilde{F} \Psi) \tilde{L} \Phi(dx). \quad (7.13)$$

İndi də $f = \tilde{L} \Phi$ götürüb, \tilde{F} -ə uyğun transpozisiya operatorunu yazaq:

$$\int f \tilde{F} \Psi(dx) = \int \Psi \tilde{F} f(dx) = \int \Psi \tilde{F} \tilde{L} \Phi(dx). \quad (7.14)$$

(7.12), (7.13) və (7.14) bərabərliklərindən

$$\int \Psi (\tilde{L} \tilde{F}) \Phi(dx) = \int \Psi \tilde{F} \tilde{L} \Phi(dx)$$

və ya

$$(\tilde{L} \tilde{F}) = \tilde{F} \cdot \tilde{L} \quad (7.15)$$

alırıq. Deməli, **operatorların hasilinə uyğun transpozisiya edilmiş operator hasilə iştirak edən operatorlara uyğun transpozisiya edilmiş operatorların əks ardıcılıqla götürülmüş hasilinə bərabərdir.**

(7.15) bərabərliyindən kompleks qoşma götürüb, (6.12) bərabərliyini nəzərə alsaq:

$$(\tilde{L} \tilde{F})^+ = \tilde{F}^+ \tilde{L}^+ \quad (7.16)$$

olar. Xətti operatorların hasilinə uyğun qoşma operator, hasildə iştirak edən operatorlara uyğun qoşma operatorların əks ardıcılıqla götürülmüş hasilinə bərabərdir.

(7.16) bərabərliyini ardıcıl tətbiq etməklə istənilən sayda xətti operatorların hasilindən ibarət operatora uyğun qoşma operator tapmaq olar:

$$(\check{L}\check{F}\dots\check{C})^+ = \check{C}^+ \dots \check{F}^+ \check{L}^+ . \quad (7.16')$$

\check{L} və \check{F} operatorlarının ayrılıqda ermit olduğunu fərz etsək, (6.14) əsasən (7.16) bərabərliyi

$$(\check{L}\check{F})^+ = \check{F}\check{L} \quad (7.17)$$

şəklinə düşür. Lakin bu şərt heç də $\check{C} = \check{L}\check{F}$ operatorunun ermit olması üçün kafi deyildir. \check{L} və \check{F} ilə birlikdə \check{C} -nin də ermit olduğunu qəbul etsək, (7.17)-dən

$$\check{L}\check{F} - \check{F}\check{L} = 0 \quad (7.18)$$

olar, yəni \check{L} və \check{F} ermit olduqda $\check{L}\check{F}$ hasilinin də ermit olması üçün onlar bir-birilə kommutasiya etməlidir. Buradan bir nəticə olaraq çıxır ki, \check{L} operatoru ermit olarsa, \check{L}^n operatoru həmişə ermitdir (burada n – tam müsbət ədəddir).

\check{L}^n operatorunun funksiyaya təsiri \check{L} operatorunun n dəfə ardıcıl təsiri kimi təyin olunur.

$$\check{L}^n \Psi = \check{L}(\check{L}(\check{L}(\check{L} \Psi))) \quad (7.19)$$

(sağ tərəfdə \check{L} operatoru n dəfə bir-birinə vurulur). Digər tərəfdən, asanlıqla göstərmək olar ki, eyni bir operatorun iki müxtəlif üstü üçün

$$\check{L}^{(n+m)} = \check{L}^n \check{L}^m \quad (7.20)$$

və

$$[\check{L}^n \check{L}^m] = \check{L}^n \check{L}^m - \check{L}^m \check{L}^n = 0$$

şərtləri ödənilir.

Fərz edək ki, \check{L} və \check{F} operatorları bir-birilə kommutasiya etməyən ermit operatorlardır. Onda yəqin ki, $\check{L}\check{F}$ və $\check{F}\check{L}$ hasil operatorları ermit

olmaz. Lakin onların $\frac{1}{2}(\check{L}\check{F} + \check{F}\check{L})$ və $\frac{i}{2}(\check{L}\check{F} - \check{F}\check{L})$ kombinasiyaları, (7.17)-yə əsasən, həmişə ermit operatorlardır.

Hər hansı \check{L} operatoruna tərs operator \check{L}^{-1} kimi işarə olunur. \check{L}^{-1} tərs operator yalnız o vaxt təyin oluna bilər ki, $\varphi(x) = \check{L}\Psi(x)$ tənliyi Ψ -yə nəzərə alınaraq həll oluna bilsin: $\Psi = \check{L}^{-1}\varphi$. Buradan alınır ki, tərs operator

$$\check{L}^{-1}\check{L}\Psi = \check{L}^{-1}(\check{L}\Psi) = \check{L}^{-1}\varphi = \Psi$$

yəni

$$\check{L}^{-1}\check{L} = \check{I} \quad (7.21)$$

xassəsinə malikdir. Eynilə bunun kimi

$$\check{L}\check{L}^{-1}\varphi(x) = \check{L}(\check{L}^{-1}\varphi) = \check{L}\Psi = \varphi, \text{ yəni } \check{L}\check{L}^{-1} = \check{I}, \quad (7.21')$$

burada \check{I} – vahid operatorudur. Vahid operator üçün həmişə $\check{I}\Psi = \Psi$ bərabərliyi ödənilir və buradan da o bütün başqa operatorlarla kommutasiya edir.

\check{L}^{-1} tərs operator \check{L}^+ qoşma operatora bərabər, yəni $\check{L}^{-1} = \check{L}^+$ olarsa, (7.21) və (7.21') münasibətləri

$$\check{L}\check{L}^+\Psi = \check{L}^+\check{L}\Psi$$

və ya

$$\check{L}\check{L}^+ = \check{L}^+\check{L} = \check{I} \quad (7.22)$$

şəklində düşər. Belə operatorlar **unitar operatorlar** və (7.22) şərti unitarlıq şərti adlanır. Unitar operatorların məxsusi qiymətləri modulca vahidə bərabərdir: $\check{L}\Psi = L\Psi$ və $\check{L}^+\Psi = L^*\Psi$ olduğunu və (7.22) şərtini nəzərə alsaq,

$$\check{L}^+\check{L}\Psi = \check{L}\check{L}^+\Psi = LL^*\Psi = \Psi$$

olar, buradan

$$LL^* = |L|^2 = 1.$$

Unitar \check{L} və \check{F} operatorlarının hasili olan $\check{C} = \check{L}\check{F}$ operatoru da unitar olur: $\check{C}^+ = \check{F}^+\check{L}^+$ olduğundan

$$\check{C}^* \check{C} = \check{F}^* \check{L}^* \check{L} \check{F} = \check{F}^* \check{F} = \check{I}$$

olur.

Nəhayət qeyd edək ki, xətti operatorların hasili əməliyyatı distributivlik xassəsinə malikdir:

$$\check{L}(\check{F} + \check{C}) = \check{L}\check{F} + \check{L}\check{C}. \quad (7.23)$$

§ 8. Ermit operatorların məxsusi funksiyaları və onların xassələri

Yuxarıda qeyd etdik ki, operatorların məxsusi qiymətlər çoxluğu diskret və ya kəsilməz spektr təşkil edir. Hər iki hal üçün ermit (özünə qoşma) operatorların məxsusi funksiyalarının xassələri ilə tanış olaq.

Əvvəlcə bu məsələni diskret spektr halı üçün təhlil edək. 5-ci paraqrafda göstərmişdik ki, sistemin Ψ ixtiyari funksiyasını istənilən operatorun (5.2) (və ya (5.10)) məxsusi funksiyalarının

$$\Psi(x, t) = \sum C_i \Psi_i(x, t)$$

kombinasiyası şəklində göstərmək olar və buna imkan verən Ψ_i (və ya Ψ_L) funksiyalar çoxluğu **tam sistem** təşkil edir. $C_i^* C_i$ hasili sistemin i -ci halda olma ehtimalıdır və $\Psi_i(x, t)$ funksiyaları isə (5.6) ortonormalanma şərtini ödəyir. Lakin, biz bu şərtləri ehtimal nəzəriyyəsinin tələblərinə əsasən alanda kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar sinfini dəqiqləşdirməmişdik.

Sistem sonlu fəzada hərəkət edirsə, onun ala biləcək hallar ardıcılığı diskret spektr təşkil edir (məs. IV fəslə bax) və bu halların Ψ_i dalğa funksiyaları fəzanın baxılan oblastından kənarında kifayət qədər böyük sürətlə (tez) sıfıra yaxınlaşır. Ona görə də diskret spektrin Ψ_i dalğa funksiyalarının asılı olduğu arqumentlərin bütün dəyişmə oblastı üzrə götürülmüş $\int \Psi_i^* \Psi_i(dx)$ inteqralı həmişə sonlu qalır. Buradan çıxır ki, diskret spektrin dalğa funksiyalarını həmişə normalamaq olar. Beləliklə, (5.6) şərtlərinin birincisi, yəni dalğa funksiyalarının normalanma şərti burada da öz qüvvəsinə saxlayır.

İkinci şərtə gəldikdə isə o, yalnız ermit operatorların məxsusi funksiyaları üçün ödənilir. Bunu isbat edək.

Fərz edək ki, Ψ_n və Ψ_m funksiyaları ixtiyari \check{L} xətti operatorunun L_n və L_m müxtəlif məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyalarıdır, yəni

onlar üçün

$$\tilde{L}\Psi_n = L_n\Psi_n, \quad \tilde{L}\Psi_m = L_m\Psi_m \quad (8.1)$$

tənlikləri ödənilir. Birinci tənliyi soldan Ψ_m^* -ə, ikinci tənliyə kompleks qoşma olan $\tilde{L}^*\Psi_m^* = L_m^*\Psi_m^*$ tənliyini isə sağdan Ψ_n -ə vurub, bütün fəza üzrə inteqral götürdükdən sonra alınan bərabərlikləri bir-birindən çıxsaq,

$$\int \Psi_m^* \tilde{L}\Psi_n(dx) - \int \Psi_n \tilde{L}^*\Psi_m^*(dx) = (L_n - L_m^*) \int \Psi_m^* \Psi_n(dx) \quad (8.2)$$

alırıq. Sol tərəfdəki ikinci inteqrala transpozisiya teoremini tətbiq etsək,

$$\int \Psi_m^* \tilde{L}^*\Psi_n(dx) = \int \Psi_m^* \tilde{L}^*\Psi_n(dx)$$

(8.2) bərabərliyinin sol tərəfi eynilik kimi sıfıra bərabər olar. Onda

$$(L_n - L_m^*) \int \Psi_m^* \Psi_n(dx) = 0 \quad (8.2')$$

olur. Burada iki hala baxmaq olar. Fərz edək ki, a) $n \neq m$, onda $L_n \neq L_m^*$ olduğundan

$$\int \Psi_m^* \Psi_n(dx) = 0 \quad (8.3)$$

alınır, yəni ermit operatorların müxtəlif məxsusi qiymətlərinə uyğun dalğa funksiyaları ortoqonal olur. b) $n=m$ olduqda dalğa funksiyanın fiziki mahiyyətindən $\int \Psi_n^* \Psi_n(dx) = 1$ olur və $L_n = L_n^*$ alınır, yəni ermit operatorların məxsusi qiymətləri həmişə həqiqi olur.

Ermüt operatorların məxsusi funksiyaları üçün (5.6) ortonormalanma şərti tam ödənilir. Bu halda (5.2)-yə daxil olan C_i əmsallarını sistemin dalğa funksiyaları ilə ifadə etmək olar. Doğrudan da, (5.2)-ni soldan Ψ_k^* vurub, bütün fəza üzrə inteqrallasaq, (5.6)-ya əsasən

$$C_i = \int \Psi_i^*(x,t) \Psi(x,t)(dx) \quad (8.4)$$

alınar.

İndi də fərz edək ki, L fiziki kəmiyyəti kəsilməz (bütöv) spektrə malikdir. Onun məxsusi qiymətlər çoxluğunu $\{L\}$, məxsusi dalğa funksiyalarını isə Ψ_L ilə işarə etsək, uyğun tənlik

$$\tilde{L} \Psi_L = L \Psi_L \quad (8.5)$$

kimi yazılar.

Diskret spektr halında olduğu kimi, Ψ_L məxsusi funksiyalar sistemi tam sistem təşkil edərsə, sistemin Ψ ümumi dalğa funksiyasını onların ixtiyari xətti kombinasiyası şəklində göstərmək olar. Bu halda belə kombinasiya inteqral şəklində yazılar:

$$\Psi(x, t) = \int C(L) \Psi_L(x, t) dL. \quad (8.6)$$

İnteqral L -in bütün dəyişmə oblastı üzrə götürülür.

Ψ_L funksiyalarını adi şəkildə normalamaq, yəni onlar üçün orta-normalanma şərtini (5.6) şəklində yazmaq mümkün deyildir. Kəsilməz spektrin dalğa funksiyaları kvadratik inteqrallanmır. Onlar üçün $\int \Psi_L^*(x) \Psi_L(x) dx$ inteqralı dağılır (sonsuz olur). Bu onunla əlaqədardır ki, kəsilməz spektrin dalğa funksiyaları sonsuzluqda sıfıra bərabər olmur ($\Psi_L(x \rightarrow \pm\infty) \neq 0$). Bu halda kvant mexaniki sistemin hərəkəti infinit olur, yəni sistemin (zərrəciyin) sonsuzluqda olma ehtimalı sıfırdan fərqli qiymət alır. Ona görə də bütöv spektrin Ψ_L məxsusi funksiyaları üçün ortonormalanma şərti elə təyin edilir ki, $C^*(L)C(L)dL$ ifadəsi L -kəmiyyətinin $L, L+dL$ intervalında qiymət alma ehtimalını ifadə etsin (belə ki, baxılan halda sistemin müəyyən halının $-L$ -in müəyyən qiymətinin ehtimalından danışmaq mümkün deyildir). L -in mümkün olan qiymətlərindən heç olmasa birinə bərabər olma ehtimalı vahidə bərabər olduğundan

$$\int C^*(L)C(L)dL = \int \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)(dx) = 1 \quad (8.7)$$

olar.

Ψ -nin (7.6) ilə verilmiş qiymətini burada yerinə yazsaq,

$$\int C^*(L)C(L)dL = \int C^*(L)dL \int \Psi_L^*(x)\Psi_L(x)(dx)$$

alarıq. Bu bərabərlikdə sol və sağ tərəfdəki ifadələrin müqayisəsindən

$$C(L) = \int \Psi_L^*(x) \Psi(x) (dx) \quad (8.8)$$

alınır. Beləliklə, $C(L)$ əmsallarının hesablanma qaydası C_i əmsallarının (8.4) hesablanma qaydası üzərinə düşür.

$\Psi_L(x)$ funksiyaları üçün orto-normalanma şərtini tapmaq məqsədi ilə $\Psi(x)$ -in (8.6) -dəki ifadəsini (8.8)-də yerinə yazaraq:

$$C_L = C(L) = \int C(L') \int \Psi_L^*(x) \Psi_{L'}(x) (dx) dL' . \quad (8.8')$$

Bu bərabərlik ixtiyari C_L əmsalları üçün doğru olmalıdır, yəni eynilik kimi ödənilməlidir. Bu o zaman mümkündür ki, L' -in L -dən fərqli bütün qiymətlərində ($L' \neq L$) $C(L')$ -ə vurulan $\int \Psi_L^*(x) \Psi_{L'}(x) (dx)$ inteqralı sıfır, L' -in L -ə çox yaxın qiymətlərində isə ($L' \approx L$) sonsuz böyük (dL' sonsuz kiçik olduğundan) olsun. Onda $C(L)$ ilə inteqralın hasili sonlu, yəni $C(L)$ ilə $C(L)$ eyni tərtibli olar. Beləliklə, $\int \Psi_L^*(x) \Psi_{L'}(x) (dx)$ inteqralı $L' - L$ fərqi-dən asılı bir funksiya olur. Bu funksiya arqumentin sıfırdan fərqli qiymətində sıfır, sıfır qiymətində isə sonsuzdur. Onu $\delta(L' - L)$ kimi işarə etsək,

$$\int \Psi_L^*(x) \Psi_{L'}(x) (dx) = \delta(L' - L) \quad (8.9)$$

$\delta(L' - L) = \delta(x)$ funksiyası

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases} \quad (8.10)$$

kimi təyin olunur. Bu axırıncı bərabərliklə təyin olunmuş funksiya *delta funksiya* adlanır. O, ilk dəfə məşhur ingilis alimi Dirak tərəfindən daxil edilmiş və onun şərəfinə Dirak delta funksiyası adlanır.

(8.9) münasibətini nəzərə alsaq,

$$C(L) = \int C(L') \delta(L' - L) dL' \quad (8.11)$$

olar. Bu ifadə δ -funksiyanın ən əsas xassələrindən birini ifadə edir. Doğrudan da, onu ixtiyari x və x' dəyişənləri üçün yazsaq,

$$f(x) = \int f(x')\delta(x-x')dx' \quad (8.11')$$

olar. Bu göstərir ki, inteqral altında δ -funksiya olduqda belə inteqralı almaq çox asandır. İnteqrallamanın nəticəsi inteqralaltı funksiyanın, inteqrallama dəyişəninin δ -funksiyanın arqumentini sıfıra çevirən qiymətində götürülmüş qiymətinə bərabərdir, Məsələn, $x' = a$ -da

$$f(a) = \int f(x')\delta(x'-a)dx'$$

$x' = 0$ -da

$$f(0) = \int f(x')\delta(x'-0)dx'$$

və i.a. olur.

Bu axırıncı bərabərliklərdən istifadə etməklə δ -funksiyanın başqa mühüm bir xassəsini də almaq olar. (8.11') bərabərliyi $x = x'$ ($x = a$, $x = 0$ və i.a.) qiymətində sıfırdan fərqli qaldığından, onu

$$f(x) = f(x)\int \delta(x-x')dx'$$

kimi də yazmaq olar. Buradan

$$\int \delta(x-x')dx' = 1$$

və ya

$$\int \delta(x)dx = 1 \quad (8.12)$$

alınar.

Delta funksiyanın köməyi ilə götürülən inteqrallarda inteqrallama oblas-
tı $(-\infty, \infty)$ olmaya da bilər. İnteqralı, delta funksiya sıfıra bərabər olmayan
xüsusi nöqtə daxil olan istənilən oblast üzrə götürmək olar.

(8.12) bərabərliyinin ikincisindən alınır ki, δ -funksiya cüt funksiya
dır, yəni $\delta(x) = \delta(-x)$. Doğrudan da $y = -x$ əvəzini qəbul etsək,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = - \int_{\infty}^{-\infty} \delta(y)dy = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y)dy = 1$$

olur.

δ -funksiyanın daha bir xassəsini göstərək. Fərz edək ki, δ -funksiya $\delta(\alpha x)$ şəklindədir, burada α -ixtiyari sabitdir. Ondan x üzrə götürülmüş inteqralı hesablayaq. $\alpha x = y$ əvəzini götürüb, δ -funksiyanın cüt funksiya olduğunu nəzərə alsaq,

$$\delta(\alpha x)dx = \int \delta(y) \frac{dy}{|\alpha|} = \frac{1}{|\alpha|} \int \delta(y)dy$$

alınar. Buradan çıxır ki, $\delta(\alpha x)$ və $\delta(x)$ funksiyalar üçün

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x) \quad (8.13)$$

bərabərliyi doğrudur.

İsbatsız delta funksiyanın daha bir xassəsini də göstərək:

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x - x_i)}{\left| \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=x_i}} \quad (8.14)$$

və buradan

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a} (\delta(x - a) + \delta(x + a)), \quad (8.15)$$

burada x_i -lər $\varphi(x)=0$ tənliyinin kökləri, n isə x oxu boyunca bu köklərin sayıdır.

(8.9) bərabərliyi bütöv spektrin məxsusi funksiyaları üçün orto-normalanma şərti olur. Doğrudan da, $L \neq L'$ olanda Ψ_L və $\Psi_{L'}$ funksiyaları ortoqonal olur ($\int \Psi_L^* \Psi_{L'}(dx) = 0$, $L \neq L'$), $L = L'$ də isə onlar δ -funksiyaya normalanırlar. Bu şərt diskret spektr halındakı (5.6) şərtini əvəz edir.

Bütöv spektrin məxsusi funksiyaları daha bir şərti də ödəyir. Onu almaq üçün $C(L)$ -in (8.8) ilə verilmiş ifadəsini (8.6)-da yerinə yazsaq:

$$\Psi(x, t) = \int \Psi(x') (\int \Psi_L^*(x') \Psi_L(x) dL) (dx'). \quad (8.16)$$

(8.8')-ə oxşar olaraq bu münasibət o vaxt ödənilir ki,

$$\int \Psi_L^*(x') \Psi_L(x) dL = \delta(x - x') \quad (8.17)$$

olsun.

Diskret spektrin məxsusi funksiyaları üçün də (8.17) oxşar bərabərlik almaq olar. Doğrudan da C_r -nin (8.4) ilə verilmiş ifadəsini (5.2)-də yerinə yazsaq,

$$\Psi(x, t) = \int \Psi(x', t) \left(\sum_i \Psi_i^*(x') \Psi_i(x) \right) dx'$$

alınar. (8.8) və (8.16) oxşar olaraq, bu bərabərliyin ödənilməsi üçün

$$\sum_i \Psi_i^*(x') \Psi_i(x) = \delta(x - x') \quad (8.18)$$

olmalıdır. Qeyd edək ki, (8.17) və (8.18) şərtləri uyğun olaraq kəsilməz və diskret spektrin məxsusi funksiyalar sisteminin tam sistem olması üçün lazımı və kafi şərtlərdir.

§9. Hamilton operatoru

Biz yuxarıda baxılan operatorların hansı fiziki kəmiyyətlərə aid olduğunu göstərmədən, kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar sinfini müəyyən etdik və onların ümumi xassələri ilə tanış olduq. İndi də müxtəlif fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorların aşkar şəklinin tapılması üzərində dayanacağıq.

Sistemin $\Psi(x, t)$ dalğa funksiyası məlum olarsa, baxılan anda sistemin halını xarakterizə edən fiziki kəmiyyətlərin ala biləcək qiymətlərini və onların ölçülmə ehtimallarını hesablamaq olur. Bu mənada deyirlər ki, $\Psi(x, t)$ dalğa funksiyası sistemin halını tam təyin edir. Kvant mexanikasında iddia olunur ki, $\Psi(x, t)$ dalğa funksiyası sistemin yalnız həmin andakı halını yox, bütün sonrakı anlardakı hallarını da birqiymətli təyin edir.

Riyazi olaraq axırıncı fikir belə ifadə olunur: Ψ -funksiyanın zamana görə dəyişməsinin hər verilmiş andakı qiyməti Ψ -nin həmin andakı qiyməti ilə təyin olunur. Bu asılılıq ümumi şəkildə

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \tilde{L} \Psi(x, t) \quad (9.1)$$

kimi yazılır. Burada i xəyali vahid sadəlik xatirinə daxil edilmişdir. Superpozisiya prinsipinə görə (9.1)-ə daxil olan \tilde{L} operatoru ilk növbədə xətti olmalıdır (§6-ya bax). Digər tərəfdən, \tilde{L} operatoruna zamana görə törəmələr və müəyyən zaman intervalında götürülmüş inteqrallar daxil olmamalıdır. Doğrudan da, \tilde{L} operatoru Ψ -nin zamana görə törəməsini funksiyanın özü ilə təyin etdiyindən \tilde{L} -ə zamana görə birinci tərtib törəmə daxil olmamalıdır, əks halda o, axtarılan operator olmaz. \tilde{L} -ə yüksək tərtibli törəmələr daxil olsa, diferensial tənliklər nəzəriyyəsinə görə, başlanğıc şərt olaraq dalğa funksiyasından başqa onun birinci, ikinci və i.a. tərtib törəmələrinin başlanğıc andakı qiymətləri də verilməlidir. Bu sistemin halının tam təyin olunma prinsipinə ziddir. Eynilə bunun kimi, zamana görə inteqralların \tilde{L} -ə daxil olması da bu prinsipə zidd olar, belə ki, sistemin verilməmiş andakı halı onun tarixindən asılı olardı. Bu işə kvant mexanikasında trayektoriyaların varlığına gətirər və onun əsas prinsiplərinə (məsələn, qeyri-müəyyənlik prinsipinə) zidd olar.

§6-da göstərdik ki, kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar ermit olmalıdır. \tilde{L} -in ermit operator olduğunu göstərmək məqsədilə (5.8) bərabərliyindən zamana görə törəmə alaıq:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)(dx) = 0.$$

x və t dəyişənləri ixtiyari dəyişənlər olduğundan inteqral ilə törəmənin növbəsini dəyişmək olar:

$$\int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi(dx) + \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t}(dx) = 0.$$

(9.1) və ona kompleks qoşma olan

$$-i \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \tilde{L}^* \Psi^*$$

tənliklərdən $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ və $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$ -ni uyğun ifadələrlə əvəz etsək,

$$\int (\tilde{L}^* \Psi^*) \Psi(dx) = \int \Psi^* \tilde{L} \Psi(dx)$$

alınar. Birinci inteqralda transpozisiya olunmuş operator anlayışından (§6-ya bax) istifadə etsək, axırını bərabərlik

$$\int \Psi^* \tilde{L}^* \Psi(dx) = \int \Psi^* \tilde{L} \Psi(dx)$$

və ya

$$\int \Psi^* \tilde{L}^* \Psi(dx) = \int \Psi^* \tilde{L} \Psi(dx)$$

şəklinə düşər. Bu bərabərlik ixtiyari $\Psi(x, t)$ funksiyası üçün o zaman ödənilir ki, $\tilde{L}^+ = \tilde{L}$, yəni \tilde{L} operatoru ermit operator olsun.

\tilde{L} operatorunun hansı fiziki kəmiyyətə uyğun olduğunu müəyyən edək. §2-də klassik mexanika ilə həndəsi optika arasındakı oxşarlığı araşdırdıqda gördük ki, təsir S dalğasının φ fazası ilə mütənəsbdir:

$$S = \text{const} \varphi, \quad (9.2)$$

burada φ -adsız ədəd, const isə ölçüsü təsir ölçüsü üzərinə düşən sabitdir.

Bu münasibəti

$$\Psi = A e^{i\varphi} = A e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})}$$

müstəvi de-Broyl dalğaları üçün əlaq. Müqayisədən

$$\varphi = \frac{1}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})$$

və ya

$$Et - \vec{p}\vec{r} = \hbar\varphi \quad (9.3)$$

olar. (9.2) və (9.3) -dən

$$\varphi = \frac{S}{\hbar} \quad (9.4)$$

alınır. φ -nin qiymətini dalğa funksiyanın ifadəsində yerinə yazsaq,

$$\Psi(x, t) = A e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)}. \quad (9.5)$$

Bildiyimiz kimi, dalğavarı optikada həndəsi optikaya keçid etmək üçün $\lambda \rightarrow 0$ yaxınlaşdırmaq lazımdır. Kvant mexanikasından klassik mexanikaya keçidi də bu yolla etmək olar. Doğrudan da, de-Broyl dalğalarının dalğa uzunluğu λ baxılan kvant mexaniki sistemin kütləsi ilə təyin olunur.

$$\lambda = \frac{\hbar}{mv},$$

kütlə böyüdükcə λ kiçilir və kütlənin kifayət qədər böyük qiymətində $\lambda \rightarrow 0$ yaxınlaşır.

Deməli, kütlə böyük olduqca sistemin dalğavarı xassələri zəif olur. Yalnız kifayət qədər kiçik kütləli sistemlər (elementar zərrəciklər, atomlar) üçün dalğavarı xassələr mühüm rol oynamağa başlayır. Beləliklə, $\lambda \rightarrow 0$ halında kvant mexaniki sistemlər özlərini klassik sistemlər kimi aparmalıdır. λ -nın sıfıra yaxın qiymətinə fazanın (φ -nin) ən böyük qiyməti uyğun gəlir. Onların ifadəsindən görünür ki, λ və φ -nin limit qiymətini \hbar -ni sıfıra yaxınlaşdırmaqla da ($\hbar \rightarrow 0$) almaq olar. \hbar Plank sabiti bütün kvant hadisələrində olduqca mühüm rol oynayır. Onun həmin ölçülü başqa kəmiyyətlərə nəzərən nisbi qiyməti bu və ya başqa sistemin kvantlıq dərəcəsini təyin edir. Buna görə də kvant mexanikasından klassik mexanikaya keçidi, formal olaraq, $\hbar \rightarrow 0$ yaxınlaşdırmaqla da aparmaq olar.

Deməli, $\lambda \rightarrow 0$ olanda dalğavarı optika həndəsi optikaya, kvant mexanikası isə klassik mexanikaya keçir və λ -nın bu limit qiymətində həndəsi optika ilə klassik mexanika arasındakı oxşarlıq riyazi olaraq (9.4) münasibəti ilə ifadə olunur. Bütün bunlardan çıxır ki, Ψ -nin (9.5) ifadəsi kvant mexanikasının klassik oblastı üçün dalğa funksiyasıdır.

Dalğa funksiyasının statistik mənasına görə (9.5) funksiyasının təsvir etdiyi hərəkət müəyyən trayektoriya üzrə olan klassik hərəkətin üzərinə düşə bilməz. Doğrudan da, yuxarıda gördük ki, Ψ -nin modulunun kvadratı baxılan anda sistemin koordinatlarının paylanma ehtimalını təyin edir. Ona görə də (9.5) dalğa funksiyasının klassik hərəkətlə əlaqəsi, bu paylanmanın zamana görə «yerdəyişmə»sinin klassik mexanikanın qanunlarına uyğun olaraq baş verməsindən ibarət olar.

İndi də \tilde{L} operatoruna uyğun fiziki kəmiyyəti tapaq. Bunun üçün (9.5)-dən zamana görə törəmə alağ (burada A -nın sabit qaldığı fərz olunur)

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\partial S}{\partial t} \cdot \Psi.$$

Bunu (9.1) ilə müqayisə etsək,

$$\tilde{L}\Psi = -\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial S}{\partial t} \Psi \quad (9.6)$$

alınar. Operatorun məxsusi qiyməti anlayışının təyinindən, $-\frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial S}{\partial t}$ kəmiyyəti \tilde{L} operatorunun məxsusi qiyməti olur. Klassik mexanikadan məlumdur ki, sistemin enerjisi onu təşkil edən zərrəciklərin koordinat və impulslarının funksiyası şəklində verilirə, təsirin (S -in) zamana görə törəməsi sistemin H Hamilton funksiyasına bərabər olur:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H(q, p, t). \quad (9.7)$$

Hamilton-Yakobi tənliyini almaq üçün (9.7)-də $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$ götürülür.

(9.7)-ni (9.6)-da nəzərə alsaq, $\hbar\tilde{L}\Psi = H\Psi$ alınar. Deməli, $\hbar\tilde{L}$ operatoruna sistemin Hamilton funksiyası (enerjisi) kimi fiziki kəmiyyət uyğun gəlir. Hamilton funksiyasına uyğun operatoru \tilde{H} ilə işarə etsək, axırıncı tənlik $\tilde{H}\Psi = H\Psi$ kimi yazılar. Bu tənliklərin müqayisəsindən $\tilde{L}\hbar = \tilde{H}$ alınır. (9.5)-də \tilde{L} operatorunu \tilde{H} ilə əvəz etsək, Ψ üçün

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \tilde{H}\Psi \quad (9.8)$$

tənliyi alınar. \tilde{H} operatoru sistemin *hamilton operatoru* adlanır. Ona *hamiltonian* da deyilir.

Ψ^* funksiya üçün tənlik (9.1)-dən

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \tilde{H}\Psi^* \quad (9.9)$$

şəklində olar (\tilde{L} ermit olduğundan $\tilde{H}^+ = \tilde{H}$ -dir).

Beləliklə, sistemin Hamilton operatoru məlum olarsa, (9.8) tənliyini həll edib, sistemin dalğa funksiyasını, onun enerji spektrini tapmaq, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, sistemi tam təsvir etmək, yəni onun bütün xassələrini təyin etmək olar.

§10. Fiziki kəmiyyətin orta qiymətinin zamana görə törəməsi

Digər fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorların analitik şəklini tapmazdan qabaq, əvvəlcə, fiziki kəmiyyətin zamana görə törəməsi olan

$\dot{L} = \frac{dL}{dt}$ kəmiyyətinə (məsələn, $\dot{x} = v_x, \dot{y} = v_y, \dot{z} = v_z$, və i.a. kimi) uyğun

operatoru tapaq.

Kvant mexanikasında fiziki kəmiyyətin zamana görə törəməsini klassik mənada təyin etmək mümkün deyildir. Bildiyimiz kimi, klassik mexanikada hər hansı kəmiyyətin zamana görə törəməsini almaq üçün onun bir-birinə çox yaxın müxtəlif iki momentdəki qiymətlərini bilmək lazımdır. Kvant mexanikasında isə bunu etmək mümkün deyildir, çünki kvant mexanikasında trayektoriya üzrə hərəkət mövcud deyildir (§16-a bax). Fiziki kəmiyyət baxılan anda müəyyən qiymətə malikdirsə, sonrakı momentlərdə o, ümumiyyətlə, heç bir müəyyən qiymətə malik olmaya bilər. Bu isə fiziki kəmiyyətin zamana görə törəməsini klassik yolla təyin etməyə imkan vermir. Lakin §6-da göstərdik ki, sistemin ümumi $\Psi(x,t)$ dalğa funksiyası məlum olduqda, fiziki kəmiyyətin yalnız orta qiymətinin mənası vardır (dalğa funksiyasının statistik xarakteri). Kəmiyyətin orta qiymətinin isə klassik mənada, zamana görə törəməsi hesablanı bilər.

Digər tərəfdən, kvant mexanikasının əsas prinsiplərindən biri olan **uyğunluq prinsipi** iddia edir ki, klassik mexanikada fiziki kəmiyyətlər arasındakı münasibətlər kvant mexanikasında onlara uyğun operatorlar üçün doğru qalır. Bu prinsipdən alınır ki, kvant mexanikasında ixtiyari L fiziki kəmiyyətin zamana görə törəməsinin orta qiyməti onun orta qiymətinin zamana görə törəməsinə bərabərdir:

$$\dot{\bar{L}} = \overline{\dot{L}}. \quad (10.1)$$

Bunu isbat edək. Klassik mexanikada hər hansı $L(q,p,t)$ fiziki kəmiyyətinin zamana görə törəməsi

$$\dot{L} = \frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial L}{\partial p} \dot{p}$$

kimi hesablanır. Klassik mexanikanın hərəkət tənlikləri olan

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

Hamilton tənliklərindən istifadə etsək,

$$\dot{L} = \frac{\partial L}{\partial t} + [HL] \quad (10.2)$$

alınar, burada $[HL] = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial L}{\partial p}$ klassik Puasson mötərizəsidir.

Uyğunluq prinsipinə görə \dot{L}, L, H fiziki kəmiyyətlərinə uyğun operatorlar arasında da (10.2) münasibəti doğru qalır:

$$\check{\dot{L}} = \frac{\partial \check{L}}{\partial t} + [\check{H}\check{L}]. \quad (10.3)$$

Asanlıqla göstərmək olar ki, (10.1) münasibəti kvant mexanikasında (10.3) bərabərliyinə gətirir. Bunun üçün $\check{\dot{L}}$ -ni hesablayaq:

$$\begin{aligned} \check{\dot{L}} &= \frac{d}{dt} \int \Psi^* \check{L} \Psi(dx) = \int \Psi^* \frac{\partial \check{L}}{\partial t} \Psi(dx) + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \check{L} \Psi(dx) + \\ &+ \int \Psi^* \check{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t}(dx). \end{aligned}$$

Bu ifadədə $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ və $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}$ törəmələrini (9.8) və (9.9) tənliklərindən

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \check{H} \Psi \quad \text{və} \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \check{H}^* \Psi^*$$

ifadələri ilə əvəz etsək,

$$\check{\dot{L}} = \int \Psi^* \frac{\partial \check{L}}{\partial t} \Psi(dx) + \frac{i}{\hbar} \int (H^* \Psi^*) \check{L} \Psi(dx) - \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* \check{L} \check{H} \Psi(dx)$$

alınar. \check{H} operatorunun ermit (özünə qoşma) operator olduğunu nəzərə alaraq, ($\check{H}^* = \check{H}$) ikinci inteqralın şəklini dəyişək. $\check{L} \Psi = \Psi'$ qəbul edək, onda

$$\int \Psi \tilde{H}^* \Psi^* (dx) = \int \Psi^* \tilde{H}^* \Psi' (dx) = \int \Psi^* \tilde{H} \tilde{L} \Psi (dx).$$

Beləliklə,

$$\dot{\tilde{L}} = \int \Psi^* \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} \Psi (dx) + \int \Psi^* \frac{i}{\hbar} (\tilde{H} \tilde{L} - \tilde{L} \tilde{H}) \Psi (dx)$$

və ya

$$\dot{\tilde{L}} = \int \Psi^* \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\tilde{H} \tilde{L} - \tilde{L} \tilde{H}) \right) \Psi (dx)$$

alınar. $\dot{\tilde{L}}$ -in bu ifadəsini (10.1)-də yazıb $\dot{\tilde{L}} = \int \Psi^* \dot{\tilde{L}} \Psi (dx)$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$\int \Psi^* \dot{\tilde{L}} \Psi (dx) = \int \Psi^* \frac{d\tilde{L}}{dt} \Psi (dx) = \int \Psi^* \left(\frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\tilde{H} \tilde{L} - \tilde{L} \tilde{H}) \right) \Psi (dx)$$

və buradan da aşağıdakı operator tənlik almış olarıq:

$$\dot{\tilde{L}} = \frac{d\tilde{L}}{dt} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\tilde{H} \tilde{L} - \tilde{L} \tilde{H}). \quad (10.4)$$

$[\tilde{H} \tilde{L}] = \frac{i}{\hbar} (\tilde{H} \tilde{L} - \tilde{L} \tilde{H})$ – kvant Puasson mötərizəsi adlanır. Bu işarələrdə (10.4) ifadəsi (10.3)-ün üzərinə düşür. Lakin kvant mexanikasında iki operatorun kommutasiyasını ifadə edən $\tilde{H} \tilde{L} - \tilde{L} \tilde{H}$ fərqi, şərti olaraq, $\tilde{H} \tilde{L} - \tilde{L} \tilde{H} = [\tilde{H} \tilde{L}]$ kimi işarə olunur. Bu halda (10.4) münasibəti

$$\frac{d\tilde{L}}{dt} = \dot{\tilde{L}} = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\tilde{H} \tilde{L}] \quad (10.4')$$

kimi yazılır. Bu tənlik Heyzenberq formasında **hərəkət tənliyi** adlanır və fiziki kəmiyyətin zamana görə evolyusiyasını xarakterizə edir.

(10.4) ifadəsi $\dot{\tilde{L}}$ operatorunun zamana görə tam törəməsi kimi başa düşülməməlidir. O, sadəcə $\dot{\tilde{L}}$ və L fiziki kəmiyyətlərinə uyğun $\dot{\tilde{L}}$ və \tilde{L} operatorları arasındakı əlaqəni ifadə edir. Göründüyü kimi, bu əlaqə sistemin \tilde{H} Hamilton operatoru ilə təyin olunur. $\dot{\tilde{L}}$ operatorunun zamana

görə xüsusi törəməsi olan $\frac{\check{\mathcal{L}}}{\partial t}$ həddinə isə operatorun parametmə (t -yə) görə törəməsi kimi baxılmalıdır.

Operator \check{L} aşkar şəkildə zamandan asılı deyilsə, $(\frac{\check{\mathcal{L}}}{\partial t} = 0)$ və Hamilton operatoru ilə kommutasiya edirsə, $([\check{H}\check{L}] = 0)$, (10.4) və ya (10.3)-dən

$$\check{L} = \int \Psi^* \check{L} \Psi(dx) = 0 \quad (10.5)$$

və (10.1)-dən $\dot{\check{L}} = \check{L} = 0$ alınır. Bu axırıncıdan $\check{L} = \text{const}$ olur, yəni sistemin istənilən halında fiziki kəmiyyətin orta qiyməti sabit qalır. Belə kəmiyyətlərə hərəkət inteqralları deyilir və (10.5) bərabərliyi onların saxlanma qanununu ifadə edir.

Məsələn, fərz edək ki, $\check{L} = \check{H}$ -dir və sistemin Hamilton operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı deyildir. Onda

$$\check{H} = \frac{\partial \check{H}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\check{H}\check{H}] = 0$$

olar, buradan da $E = \check{H} = \text{const}$ alınır, yəni baxılan halda sistemin enerjisi saxlanılır. Hamilton operatoru zamandan aşkar şəkildə asılı olan hallarda isə sistemin enerjisinin saxlanmasından danışmaq olmur, çünki belə hallar üçün

$$\check{H} = \frac{\partial \check{H}}{\partial t} \neq 0 \text{ qalır.}$$

§ 11. Koordinat və impuls operatorları, onların məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları

(5.2), (5.10) və (5.3), (8.7) münasibətləri göstərir ki, (9.8) tənliyinin həlli olan $\Psi(x,t)$ dalğa funksiyası ilə, onu ixtiyari \check{L} operatorunun Ψ_{L_i} və ya Ψ_L məxsusi funksiyalarının kombinasiyası şəklində göstərməyə (superpozisiya prinsipi) imkan verən C_{L_i} və $C(L)$ əmsalları (əslində funksiyaları) kvant mexanikasında eyni fiziki mənaya malikdir.

$\Psi_i, \Psi_{L_i}, C_{L_i}, C(L)$ funksiyalar çoxluğunun (spektrinin) hər biri ayrılıqda tam sistem təşkil edir və kvant mexaniki sistemi tam təsvir etməyə imkan

verir. Beləliklə, onlardan hər biri sistemin dalğa funksiyası olur.

Kvant mexaniki sistemin nəzəri tədqiqi $\Psi(x,t)$ dalğa funksiyası vasitəsilə aparılırsa, kvant mexanikasında belə təsvir « x -təsviri» və ya «koordinat təsviri» adlanır. Sistemin fiziki xassələrinin təsviri üçün diskret spektrin $C_{L_i} = C_i$ dalğa funksiyaları seçilirsə, belə təsvir uyğun fiziki kəmiyyətin adı ilə adlanır. Məsələn, L kəmiyyəti sistemin E enerjisi olarsa, belə təsvir « E -təsviri» və ya «enerji təsviri» adlanır. Nəhayət, kəsilməz spektrin $C(L)$ dalğa funksiyalarından istifadə edilərsə, təsvirə « L -təsviri» deyilir. Məsələn, L kəmiyyəti kəsilmədən dəyişən koordinat x və ya impuls p olarsa, təsvir uyğun olaraq «koordinat» və ya «impuls təsviri» adlanır və i.a. Qeyd etmək lazımdır ki, fiziki kəmiyyətə uyğun operatorun analitik ifadəsi də təsvirin seçilməsindən asılıdır (III fəslə bax). Eyni bir operator müxtəlif təsvirlərdə müxtəlif analitik ifadəyə malik olur.

Biz bu paraqrafda koordinat və impuls operatorlarının yalnız iki təsvirdə–koordinat və impuls təsvirlərindəki ifadələrini tapacağıq. Onların verilmiş təsvirdəki analitik ifadəsindən hər hansı başqa təsvirdəki analitik ifadəyə (ümumiyyətlə, istənilən təsvirdən ixtiyari digər təsvirə) keçid məsələsi üzərində isə «Təsvir nəzəriyyəsi» fəslində (III fəsil) ətraflı dayanacağıq.

A. Koordinat təsviri (x -təsviri)

Əvvəlcə koordinat və impuls operatorlarının koordinat təsvirindəki ifadəsini tapaq.

a) Koordinat operatoru, onun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları. Fərz edək ki, sistem $\Psi(x,t)$ funksiyası ilə təsvir edilir. Sistemin (zərrəciyin), məsələn, x koordinatının bu və ya başqa qiyməti alma ehtimal sıxlığı (4.4)-dən $w(x) = \Psi^*(x)\Psi(x)$ olduğundan, onun statistik orta qiyməti

$$\bar{x} = \int w(x)x(dx) = \int \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)x(dx)$$

bərabər olar. x -ə uyğun operatoru \tilde{x} ilə işarə etsək, operatorun tərifindən

$$\bar{x} = \int \Psi^* \tilde{x} \Psi(dx)$$

olur. Bu iki bərabərliyin müqayisəsindən alınır ki,

$$\tilde{x} \Psi(x) = x \Psi(x)$$

olur, yəni koordinat təsvirində \tilde{x} operatorunun $\Psi(x)$ dalğa funksiyasına

təsiri sadəcə x -in dalğa funksiyasının hasilinə bərabər olur. Koordinat təsvirində \tilde{x} operatoru x koordinatı üzərinə düşür. Eyni sözləri \tilde{y} və \tilde{z} operatorları üçün də demək olar:

$$\tilde{x} = x, \tilde{y} = y, \tilde{z} = z \text{ və eləcə də } \tilde{\vec{r}} = \vec{r}. \quad (11.1)$$

Bu münasibətlərdən alınır ki, \vec{r} radius vektorun komponentlərinə qarşı qoyulmuş $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ operatorları bir-birilə kommutasiya edir:

$$\tilde{x}_i \tilde{x}_k - \tilde{x}_k \tilde{x}_i = 0, \quad i, k = 1, 2, 3, \quad (11.2)$$

yəni onlar, eyni zamanda, müəyyən qiymət ala bilər. Başqa sözlə, \vec{r} radius vektoru baxılan halda müəyyən qiymətə malik olur.

Buradan bir nəticə olaraq çıxır ki, hər hansı fiziki kəmiyyət yalnız koordinatlarla (\vec{r} radius vektoru ilə) təyin olunursa, bu kəmiyyətə uyğun operator koordinat təsvirində öz üzərinə düşür:

$$\tilde{L}(x, y, z) = \tilde{L}(\vec{r}) = L(\vec{r}). \quad (11.3)$$

Belə hallarda deyirlər ki, operator öz təsvirində verilmişdir.

\tilde{x} operatorunun məxsusi funksiyalarını və məxsusi qiymətlərini təyin edək. Operatorun məxsusi qiymətinin tərifindən

$$\tilde{x} \Psi_{x_0}(x) = x_0 \Psi_{x_0}(x) \quad (11.4)$$

burada x_0 - x -in hər hansı bir qiymətidir. Digər tərəfdən, « α -təsvirində» \tilde{x} -in həmin təsvirdə verilmiş $\Psi_{x_0}(x)$ -a təsiri x -in funksiyaya hasilinə bərabərdir:

$$\tilde{x} \Psi_{x_0}(x) = x \Psi_{x_0}(x). \quad (11.5)$$

(11.4) və (11.5) bərabərliklərini tərəf-tərəfə çıxsaq,

$$(x - x_0) \Psi_{x_0}(x) = 0.$$

Burada $x = x_0$ olanda $\Psi_{x_0}(x) \neq 0$; $x \neq x_0$ olanda isə $\Psi_{x_0}(x) = 0$ olur. Klasik mexanikada olduğu kimi, kvant mexanikasında da sistemin koordinatları

kəsilmədən dəyişir, yəni spektri kəsilməz olur. Kəsilməz spektrin $\Psi_{x_0}(x)$ dalğa funksiyaları isə (8.9) -a əsasən δ -funksiyaya normalanır:

$$\int \Psi_{x_0}^*(x) \Psi_{x_0}(x) (dx) = \delta(x_0 - x'_0). \quad (11.6)$$

$\Psi_{x_0}(x)$ funksiyasının yuxarıdakı xassələri və onun üçün axırıncı bərabərlik o vaxt eyni zamanda ödənilir ki, $\Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ olsun. Doğrudan da, δ -funksiyanın tərifindən

$$\Psi_{x_0}(x) = \begin{cases} \infty, & x = x_0 \\ 0, & x \neq x_0 \end{cases}$$

və $\Psi_{x_0}^*(x) = \delta^*(x - x_0) = \delta(x - x_0)$ olduğundan, onun (8.11) xassəsinə əsasən

$$\int \Psi_{x_0}^*(x) \Psi_{x_0}(x) (dx) = \int \delta(x'_0 - x) \delta(x - x_0) (dx) = \delta(x_0 - x'_0)$$

alınar. Bunun kimi də \tilde{y} və \tilde{z} operatorlarının məxsusi funksiyaları uyğun olaraq

$$\Psi_{y_0}(y) = \delta(y - y_0), \Psi_{z_0}(z) = \delta(z - z_0), \Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (11.7)$$

olar. \tilde{x} , \tilde{y} , \tilde{z} operatorları kommutasiya etdiyindən onlar eyni bir məxsusi funksiya malikdir. Bu funksiya

$$\begin{aligned} \Psi_{r_0}(\vec{r}) &= \Psi_{x_0}(x) \Psi_{y_0}(y) \Psi_{z_0}(z) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) = \\ &= \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \end{aligned} \quad (11.8)$$

şəklində olar.

b) İmpuls operatoru, onun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları. İmpuls operatorunun koordinat təsvirindəki ifadəsini tapmaq üçün kvant mexaniki sistemin simmetriya xassələrindən – onun Hamilton operatorunun koordinatların çevrilməsinə görə invariant qalması xassəsindən istifadə edək.

Qəbul olunub ki, xarici qüvvələrin təsiri müşahidə olunmayan fəza bircins və izotropdur, yəni onda bütün nöqtələr eyni hüquqlu, bütün

istiqlamətlər isə ekvivalentdir. Əvvəlcə, fəzanın bircins olması xassəsindən istifadə edək. Qapalı sistemi bircins fəzada özünə paralel köçürdükdə onun xassələri dəyişmir. Kvant mexanikasında sistemin xassələri onun Hamilton operatoru ilə təyin olunduğundan, sistemi istənilən məsafəyə paralel köçürdükdə onun Hamilton operatoru dəyişməməli, yəni paralel köçürmə çevrilməsinə görə invariant qalmalıdır. İstənilən sonlu məsafəyə paralel köçürmə sonsuz kiçik paralel köçürmələrdən təşkil olunduğundan, Hamilton operatorun invariantlığı sonlu paralel köçürmə üçün də doğru qalır.

Ümumiliyi pozmadan fərz edək ki, kvant mexaniki sistem bir zərrəcikdən ibarətdir. Belə ki, alınan nəticələr sərbəst zərrəciklər sistemi üçün də asanlıqla ümumiləşdirilə bilər.

Sonsuz kiçik $\delta \vec{r}$ məsafəyə paralel köçürmə zamanı zərrəciyin radius vektoru $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \delta \vec{r}$, dalğa funksiyası isə $\Psi(\vec{r}) \rightarrow \Psi(\vec{r} + \delta \vec{r})$ çevrilir. $\delta \vec{r}$ artımı kifayət qədər kiçik olduğundan $\Psi(\vec{r} + \delta \vec{r})$ funksiyasını $\delta \vec{r}$ -in üstlərinə görə sıraya ayırıb, birinci iki hədlə kifayətlənək,

$$\Psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \Psi(\vec{r}) + \delta \vec{r} \frac{\partial \Psi(\vec{r})}{\partial \vec{r}} + \dots = (1 + \delta \vec{r} \vec{\nabla}) \Psi(\vec{r}) \quad (11.8)$$

və ya

$$\Psi(\vec{r} + \delta \vec{r}) = \tilde{R}_{\delta} \Psi(\vec{r}) \quad (11.8')$$

burada

$$\tilde{R}_{\delta} = 1 + \delta \vec{r} \vec{\nabla} \quad (11.9)$$

sonsuz kiçik paralel köçürmə operatoru, $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$ - nabla adlı diferensial operatorudur.

Yuxarıda qeyd etdik ki, sistemin Hamilton operatoru paralel köçürməyə görə invariant qalır. Başqa sözlə, $\Psi(\vec{r})$ funksiyasına əvvəlcə \tilde{H} , sonra isə \tilde{R}_{δ} operatoru ilə təsir etdikdə alınan nəticə, əvvəlcə \tilde{R}_{δ} , sonra isə \tilde{H} ilə təsir etdikdə alınan nəticəyə bərabər olur:

$$\tilde{R}_{\delta} \tilde{H} \Psi = \tilde{H} \tilde{R}_{\delta} \Psi \quad \text{və ya} \quad (\tilde{R}_{\delta} \tilde{H} - \tilde{H} \tilde{R}_{\delta}) \Psi = 0,$$

yəni $\tilde{R}_{\delta} = 1 + \delta \vec{r} \vec{\nabla}$ operatoru Hamilton operatoru ilə kommutasiya edir.

Vahid və $\delta\vec{r}$ vektoru istənilən operatorla kommutasiya etdiyindən \vec{H} və \vec{R}_α -in kommutasiyası

$$(\vec{H}\vec{\nabla} - \vec{\nabla}H)\Psi = 0 \quad (11.10)$$

şəklini alır. §10-da gördük ki, hər hansı operator aşkar şəkildə zamandan asılı deyilsə və Hamilton operatoru ilə kommutasiya edirsə, ona uyğun fiziki kəmiyyət saxlanır, hərəkət inteqralı olur. Mexanikadan məlumdur ki, fəzanın bircinsliyi impulsun saxlanması gətirir. Buna əsasən deyə bilərik ki, zərrəciyin impulsuna uyğun operator \vec{p} ilə mütənasib olmalıdır: $\vec{p} = C\vec{\nabla}$. C -mütənasiblik əmsalinin qiyməti xüsusi halda tapılsa, o, ümumi halda da öz qiymətini saxlayır. Bunun üçün klassik oblastın (9.5) dalğa funksiyasına \vec{p} operatoru ilə təsir edək:

$$\vec{p}\Psi = \vec{p}Ae^{iS} = C\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}S \cdot \Psi.$$

Bu təsir $C\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}S$ -in Ψ -dalğa funksiyasına hasilinə gətirir, yəni o, \vec{p} operatorunun məxsusi qiyməti olur. Klassik mexanikada təsirin gradienti sistemin impulsuna bərabərdir: $\vec{\nabla}S = \vec{p}$. Məxsusi qiymətin (6.7) tərifinə görə $C\frac{i}{\hbar} = 1$ və $C = -i\hbar$ olur.

Beləliklə, koordinat təsvirində zərrəciyin impuls operatoru

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad \text{və ya} \quad \check{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \check{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \check{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \quad (11.11)$$

olur. (11.9) sonsuz kiçik paralel köçürmə operatorunu \vec{p} ilə ifadə etsək,

$$\vec{R}_\alpha = 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\vec{p}. \quad (11.12)$$

(11.8) sırasında sonrakı hədlər də nəzərə alınarsa, sonlu $\vec{r} = \vec{a}$ məsafəsinə paralel köçürmə operatoru

$$\tilde{R} = e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{a} \tilde{p}} = e^{\frac{i}{\hbar} a_i \tilde{p}_i} \quad (11.13)$$

olar. Burada a_i – paralel köçürmə çevrilməsinin parametrləri adlanır. \tilde{R} operatorunun a_i parametrlərinə görə törəməsinin bütün parametrlərin sıfır qiymətinə uyğun

$$\tilde{I}_i(x) = \frac{\partial \tilde{R}}{\partial a_i} \Big|_{a_i=0} = \frac{i}{\hbar} \tilde{p}_i \quad (11.4)$$

ifadəsi paralel köçürmə çevrilməsinin **generatorları** və ya **infinitezimal operatorları** adlanır. Buradan görünür ki, koordinat oxlarından biri boyunca paralel köçürmə çevrilməsinin generatoru və ya infinitezimal operatoru, impuls operatorunun uyğun komponenti ilə mütənasibdir.

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ dalğa funksiyası ilə təsvir olunan zərrəciklər sisteminin fəzada sonsuz kiçik paralel köçürmə operatoru, yəqin ki,

$$\tilde{R}_{\delta r} = 1 + \sum_i \delta \vec{r}_i \vec{\nabla}_i = 1 + \frac{i}{\hbar} \sum_i \delta \vec{r}_i \tilde{\vec{p}}_i = 1 + \frac{i}{\hbar} \delta \vec{r} \tilde{\vec{p}}$$

şəklində olar, burada $\tilde{\vec{p}} = \sum_i \tilde{\vec{p}}_i$. Deməli, zərrəciklər sisteminin fəzada

sonsuz kiçik paralel köçürmə operatoru da (11.12) ifadəsi ilə verilir. Lakin bu halda, $\tilde{\vec{p}}$ -yə sistemin tam impulsuna uyğun operator kimi baxmaq lazımdır.

(11.11)-dən görünür ki, impuls operatoru xətti operatorudur. O, kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar üzərinə qoyulan ikinci tələbi də ödəyir. O, özünə qoşma ermit operatorudur. Bunu göstərmək üçün $\Phi(\pm\infty) = 0$, $\varphi(\pm\infty) = 0$ şərtlərini ödəyən ixtiyari Φ və φ funksiyaları üçün yazılmış

$$\int \Phi \tilde{p}_x \varphi(dx) = -i\hbar \int \Phi \frac{\partial \varphi}{\partial x}(dx)$$

inteqralları hissə-hissə açaq:

$$-i\hbar \int \Phi \frac{\partial \varphi}{\partial x}(dx) = i\hbar \int \varphi \frac{\partial \Phi}{\partial x}(dx) = \int \varphi \tilde{p}_x^* \Phi(dx) = \int \Phi \tilde{p}_x^* \varphi(dx) =$$

$$= \int \Phi \tilde{p}_x^+ \varphi(dx)$$

və ya

$$\tilde{p}_x = \tilde{p}_x^+$$

özünə qoşma şərti alınır. Eyni şəkildə \tilde{p}_y və \tilde{p}_z -in də ermit olduğunu isbat etmək olar.

Funksiyanın müxtəlif dəyişənlərə görə ikinci tərtib törəmələri törəmənin götürülmə ardıcılığından asılı olmadığından \tilde{p}_x , \tilde{p}_y , \tilde{p}_z operatorları kommutasiya edir:

$$(\tilde{p}_i \tilde{p}_k - \tilde{p}_k \tilde{p}_i) \Psi = 0 \text{ və ya } \tilde{p}_i \tilde{p}_k - \tilde{p}_k \tilde{p}_i = 0, \quad (11.15)$$

yəni zərrəciyin impulsu verilmiş halda müəyyən qiymətə malik ola bilər.

İmpuls operatorunun məxsusi funksiyalarını və məxsusi qiymətlərini tapaq. Onlar (6.7)-yə əsasən

$$\tilde{p}_x \Psi = p_x \cdot \Psi, \quad \tilde{p}_y \Psi = p_y \cdot \Psi, \quad \tilde{p}_z \Psi = p_z \cdot \Psi \quad (11.16)$$

tənlikləri ilə təyin olunur, burada p_x, p_y, p_z -uyğun operatorların məxsusi qiymətləridir. Sərbəst hərəkət üçün (11.16) tənliklərindən, məsələn, birincinin həllini $\Psi(x, y, z) = \varphi(x) f(y, z)$ şəklində axtarmaq olar. Onda

$$-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x} = p_x \varphi(x)$$

buradan

$$\varphi(x) = C e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}$$

yaxud

$$\Psi(x, y, z) = f(y, z) e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (11.17)$$

Bildiyimiz kimi, x dəyişəni $(-\infty \leq x \leq +\infty)$ intervalında kəsilmədən dəyişir. \tilde{p}_x ermit operatorunun məxsusi qiymətlərinin həqiqi, (11.17) həllinin isə x -in kəsilməz funksiyası olması üçün p_x də $(-\infty \leq p_x \leq +\infty)$ intervalında kəsilmədən dəyişməlidir. Eyni sözləri p_y və p_z kəmiyyətləri üçün də söyləmək olar.

$\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{p}_z$ operatorları kommutasiya etdiyindən onlar ümumi məxsusi

funksiyaya malik olmalıdır. (11.17)-yə əsasən bu funksiyanı

$$\Psi_{\vec{p}}(x, y, z) = ae^{\frac{i}{\hbar}p_x x} e^{\frac{i}{\hbar}p_y y} e^{\frac{i}{\hbar}p_z z} = ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \quad (11.18)$$

şəklində yazmaq olar. p_x, p_y, p_z kəmiyyətlərinin eyni zamanda verilməsi sistemin (11.18) dalğa funksiyasını tam təyin edir, yəni onlar fiziki kəmiyyətlərin mümkün **tam çoxluqdan** biri olur.

Deməli, impuls operatorunun məxsusi funksiyalar və məxsusi qiymətlər çoxluğu kəsilməz spektr təşkil edir. Kəsilməz spektrin məxsusi funksiyaları üçün normalanma şərti (8.9)-a əsasən

$$\int \Psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r})\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})(d\vec{r}) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad (11.19)$$

şəklində yazılır. Bu şərtədən a -nı tapmaq olar. $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ -in (11.18) ifadəsini (11.19)-da yazıb, δ – funksiyanın $\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(x - x') \cdot \delta(y - y')\delta(z - z')$ xassəsindən istifadə etsək, $a^2(2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p}' - \vec{p}) = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$ alarıq, buradan $a^2(2\pi\hbar)^3 = 1$ və $a = (2\pi\hbar)^{-3/2}$ alınır. Beləliklə, \vec{p} operatorunun normalanmış məxsusi funksiyası

$$\Psi_{\vec{p}}(x, y, z) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \quad (11.18')$$

olar.

Zərrəciyin sərbəst hərəkəti finitdirsə, yəni zərrəcik ölçüləri istənilən qədər böyük, lakin sonlu fəzada hərəkət edirsə, (11.18) müstəvi dalğaları başqa yolla normalamaq əlverişli olur. Ümumiliyi pozmadan belə fəzanı tili L olan kub qəbul edək (L istənilən qədər böyük ola bilər). Bu zaman tələb olunur ki, dalğa funksiyası kubun divarlarında periodik olsun, yəni kubun bir-birinə qarşı duran üzlərinin uyğun nöqtələrində dalğa funksiyası bərabər qiymətlər alsın. Bu şərtədən alınır ki, finit sərbəst hərəkətdə impulsun komponentləri kəsilmədən dəyişmir, diskret qiymətlər alır (§31-ə bax):

$$p_i = \frac{2\pi}{L_i} n_i, \quad p_x = \frac{2\pi}{L_1} n_1, \quad p_y = \frac{2\pi}{L_2} n_2, \quad p_z = \frac{2\pi}{L_3} n_3, \quad (11.20)$$

burada n_1, n_2, n_3 – tam müsbət və mənfi qiymətlər alır.

Bu və buna oxşar hallarda müstəvi dalğalar üçün normalanma şərti

$$\int \Psi_{p_i}^*(x, t) \Psi_{p_i}(x, t) dx = 1 = a^2 \int e^{\frac{i}{h}(p_i - p_i)x} dx$$

və ya

$$a^2 V = 1, \quad a = V^{-\frac{1}{2}}$$

buradan

$$\Psi_{\bar{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i}{h}(\bar{p}\bar{r})} \quad (11.21)$$

olur.

B. İmpuls təsviri (p-təsvir)

İndi də koordinat və impuls operatorlarının impuls təsvirində analitik ifadəsini tapmaq üçün impuls operatorunun koordinat təsvirindəki (11.18') məxsusi funksiyalar çoxlucundan istifadə edək. Əvvəlcə impuls operatorunun öz təsvirində məxsusi funksiyasını tapaq. Bunun üçün $\Psi(x, t)$ funksiyasının impuls operatorunun koordinat təsvirində verilmiş və tam sistem təşkil edən (11.18') məxsusi funksiyalar çoxluğu üzrə superpozisiyasını götürək:

$$\Psi(x, t) = \int C(\bar{p}) \Psi_{\bar{p}}(x, t) (d\bar{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int C(\bar{p}) e^{\frac{i}{h}\bar{p}\bar{r}} (d\bar{p}), \quad (11.22)$$

buradan ((8.8) bərabərliyinə bax)

$$C(\bar{p}) = \int \Psi_{\bar{p}}^*(\bar{r}, t) \Psi(\bar{r}, t) (d\bar{r}) \quad (11.23)$$

alınır. §8-də deyilənlərdən çıxır ki, $C(\bar{p})$ sistemin impuls təsvirində verilmiş dalğa funksiyasıdır. $C^*(\bar{p})C(\bar{p})(d\bar{p}) = |C(\bar{p})|^2 (d\bar{p}) = w(\bar{p})(d\bar{p})$ ifadəsi zərrəciyin impulsunun \bar{p} , $\bar{p} + d\bar{p}$ intervalında qiymət alma ehtimalı olur. Zərrəciyin impulsunun mümkün olan qiymətlərindən hər hansı birinə bərabər olma ehtimalı isə

$$\int C^*(\bar{p})C(\bar{p})(d\bar{p}) = 1 \quad (11.24)$$

olar.

p -təsvirində impuls operatoru, yəqin ki, operatorun (6.4) tərifindən alınan

$$\bar{\bar{p}} = \int C^*(\bar{p}) \check{\bar{p}} C(\bar{p})(d\bar{p}) = \int \omega(\bar{p}) \bar{p}(d\bar{p}) \quad (11.25)$$

ifadəsi ilə təyin olunur. Bu axırıncı bərabərliyin ödənilməsi üçün

$$\check{\bar{p}} C(\bar{p}) = \bar{p} \cdot C(\bar{p})$$

olmalıdır. Bunu (11.25)-da yazıb, (11.24)-ü nəzərə alsaq, $\check{\bar{p}} = \bar{p}$ alınır, yəni p -təsvirdə impuls operatoru impulsun özünə bərabər olur. Qeyd edək ki, bu teorem istənilən başqa fiziki kəmiyyət üçün də doğrudur.

İndi də p -təsvirində \bar{r} radius vektora uyğun $\check{\bar{r}}$ operatorunu tapaq. Operatorun (6.4) tərifindən

$$\bar{\bar{r}} = \int C^*(\bar{p}) \check{\bar{r}} C(\bar{p})(d\bar{p}) . \quad (11.26)$$

Digər tərəfdən, « x -təsvirində» \bar{r} -in orta qiyməti

$$\bar{\bar{r}} = \int \Psi^*(\bar{r}, t) \bar{r} \Psi(\bar{r}, t)(d\bar{r}) \quad (11.27)$$

olar.

$\Psi(\bar{r}, t)$ -nin (11.22) ifadəsindən istifadə edərək $\bar{r} \Psi(r, t)$ hasilinin şəklini dəyişdirək:

$$\bar{r} \Psi = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \bar{r} C(\bar{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{r}}(d\bar{p}) = -i\hbar(2\pi\hbar)^{-3/2} \int \frac{\partial}{\partial \bar{p}} (e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{r}}) C(\bar{p}) d\bar{p}$$

Axırıncı inteqralı hissə-hissə açsaq,

$$\bar{r} \Psi = \hbar(2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \bar{r}} i \frac{\partial C(\bar{p})}{\partial \bar{p}}(d\bar{p})$$

olar. Bu axırıncı ifadəni (11.27) yazıb $\Psi(\bar{r}, t)$ -ni (11.22)-yə uyğun ifadəsi ilə əvəz etsək,

$$\bar{\bar{r}} = (2\pi\hbar)^{-3} \int C^*(\bar{p}') e^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}-\bar{p}')\bar{r}}(d\bar{r}) i\hbar \frac{\partial C(\bar{p})}{\partial \bar{p}}(d\bar{p})(d\bar{p}')$$

alarıq. Burada

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

olduğunu nəzərə alıb, alınan ifadəni δ -funksiya vasitəsi ilə \vec{p}' -ə görə inteqrallasaq,

$$\vec{r} = \int C^*(\vec{p})\vec{r}C(\vec{p})(d\vec{p}) = \int C^*(\vec{p})i\hbar \frac{\partial C(\vec{p})}{\partial \vec{p}}(d\vec{p}) \quad (11.28)$$

alarıq. (11.28)-i (11.26) ilə müqayisə etdikdə \vec{r} operatoru p -təsvirində

$$\vec{r} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \quad (11.29)$$

olur.

c) Koordinat və impuls operatorları arasında kommutativ münasibətlər. 7 və 8-ci paragraflarda gördük ki, müxtəlif operatorların kommutativ olub, olmaması kvant mexanikasında mühüm əhəmiyyətə malikdir. İki operator kommutasiya edirsə, onlar ümumi məxsusi funksiyalara malikdir, onlara uyğun fiziki kəmiyyətlər eyni bir halı təyin edir, yəni eyni zamanda müəyyən qiymət alır.

Yuxarıda göstərdik ki, $\check{p}_i(\check{p}_x, \check{p}_y, \check{p}_z)$ və $\check{x}_i(\check{x}, \check{y}, \check{z})$ operatorları ayrılıqda öz aralarında kommutasiya edir ((11.2) və (11.15)-ə bax). İndi də \check{p}_i ilə \check{x}_i operatorları arasındakı kommutasiya münasibətlərini tapaq.

Asanlıqla göstərmək olar ki,

$$\check{p}_x y - y \check{p}_x = 0 \quad \check{p}_x z - z \check{p}_x = 0 \quad \text{və i.a.}$$

yaxud

$$(\check{p}_i \check{x}_k - \check{x}_k \check{p}_i)\Psi = 0 \quad \text{və ya} \quad \check{p}_i \check{x}_k - \check{x}_k \check{p}_i = 0 \quad (i \neq k) \quad (11.30)$$

olur. Doxrudan da, $i \neq k$ olduqda $\check{p}_i x_k \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}(x_k \Psi)$ ifadəsində x_k özünü parametr kimi aparır və $\check{p}_i x_k \Psi = x_k \check{p}_i \Psi$ olur. $i=k$ halında isə məsələn,

$$(\tilde{p}_x x - x \tilde{p}_x) \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x \Psi) + i\hbar x \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -i\hbar \Psi$$

və ya

$$\tilde{p}_i x_i - x_i \tilde{p}_i = -i\hbar \quad (i=1,2,3) \quad (11.31)$$

olur. (11.30) və (11.31) münasibətlərini birləşdirsək,

$$(\tilde{p}_i x_k - x_k \tilde{p}_i) \Psi = -i\hbar \delta_{ik} \Psi, \text{ yaxud } \tilde{p}_i \tilde{x}_k - \tilde{x}_k \tilde{p}_i = -i\hbar \delta_{ik} \quad (11.32)$$

(11.32) münasibətindən alınır ki, kvant mexaniki sistemin (məsələn, zərrəciyin) koordinat və impulsu eyni zamanda müəyyən qiymət ala bilmir. Fəzanın müəyyən \vec{r} nöqtəsində olan zərrəcik eyni zamanda müəyyən \vec{p} impulsuna malik ola bilmir. Deməli, kvant mexanikasında hərəkətin trayektoriyası anlayışı mövcud deyildir, çünki hərəkətin trayektoriyasını qurmaq üçün sistemin koordinat və impulsunun baxılan anda qiymətləri verilməlidir.

(11.11) ifadələri impuls operatoru \tilde{p} ilə ixtiyari $f(\vec{r})$ funksiyası arasında

$$\tilde{p} f(\vec{r}) - f(\vec{r}) \tilde{p} = -i\hbar \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \quad (11.33)$$

münasibətini almağa imkan verir (koordinat təsviri). Eynilə bunun kimi (11.29)-dan \tilde{r} ilə ixtiyari $f(\vec{p})$ funksiyası arasında

$$\tilde{r} f(\vec{p}) - f(\vec{p}) \tilde{r} = -i\hbar \frac{\partial f(\vec{p})}{\partial \vec{p}} \quad (11.34)$$

münasibəti alınır. Bu axırınca iki bərabərlikdən biz gələcəkdə dəfələrlə istifadə edəcəyik.

§12. Enerji və zaman operatorları, onların məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları

$\Psi(x,t)$ funksiyasının arqumentinə x, y, z koordinatları ilə yanaşı zaman t

dördüncü ixtiyari dəyişən kimi daxil olur və koordinatlar kimi kəsilmədən dəyişir. Buradan alınır ki, t fiziki kəmiyyətinə uyğun \tilde{t} operatorunun xassələri koordinat operatorlarının xassələri ilə eyni olmalıdır: \tilde{t} operatorunun dalğa funksiyasına təsiri t -nin funksiyaaya hasilinə bərabərdir, onun məxsusi qiymətlər spektri kəsilməz olub, $(-\infty \leq t \leq +\infty)$ intervalında dəyişir, məxsusi funksiyaları isə $\Psi_{t_0}(t) = \delta(t - t_0)$ olur.

Enerji operatorunu tapmaq üçün zamanın biricinsliyindən istifadə edək. Zamanın biricinsliyinə görə fiziki proseslərin gedişi, zaman üçün hesablanma başlanğıcı kimi bu və ya başqa anın seçilməsindən asılı deyildir. Başqa sözlə, zamanın hesablanma başlanğıcının sonsuz kiçik və ya sonlu zaman fasiləsi qədər sürüdürlməsi sistemin fiziki xassələrini dəyişmir və onun \tilde{H} Hamilton operatoru bu dəyişməyə görə invariant qalır.

Zamanın hesablanma başlanğıcının sonsuz kiçik δt sürüşməsi zamanı alınan $\Psi(x, t + \delta t)$ funksiyasını δt -nin üstlərinə görə sıraya ayırıb, birinci iki hədlə kifayətlənsək,

$$\Psi(x, t + \delta t) = \Psi(x, t) + \delta t \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} + \dots = (1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}) \Psi(x, t).$$

Bu sürüşmənin

$$R_{\delta t} = 1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t} = 1 + \delta t \nabla_t, \quad (12.1)$$

operatoru sistemin \tilde{H} operatoru ilə kommutasiya etdiyindən

$$(\tilde{H} \tilde{R}_{\delta t} - \tilde{R}_{\delta t} \tilde{H}) \Psi = 0 \text{ və ya } \tilde{H} \nabla_t - \nabla_t \tilde{H} = 0.$$

∇_t operatoruna uyğun fiziki kəmiyyət saxlanılır. Mexanikadan məlumdur ki, zamanın biricinsliyi sistemin enerjisinin saxlanmasına gətirir. Onda \tilde{E} enerji operatoru ∇_t ilə mütənasib olmalıdır: $\tilde{E} = C \nabla_t$. C əmsalı \tilde{E} -nin klassik oblastın dalğa funksiyası $\Psi = e^{\frac{i}{\hbar} S}$ -ə təsirindən təyin oluna bilər:

$$\tilde{E} \Psi = C \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = C \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \Psi = E \Psi.$$

$E = C \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t}$ - \tilde{E} operatorunun məxsusi qiyməti olur. Klassik me-

xanikada $E = -\frac{\partial S}{\partial t}$ olduğundan $\frac{i}{\hbar}C = -1$, $C = i\hbar$ və enerji operatoru

$$\tilde{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (12.2)$$

olur. Buradan R_{δ} -də $\frac{\partial}{\partial t}$ -ni \tilde{E} operatoru ilə əvəz etsək, zamanın hesabət başlanğıcının sonsuz kiçik sürüşmə operatoru üçün

$$R_{\delta} = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta t \tilde{E} \quad (12.3)$$

alırıq. Buradan, (11.9) -a oxşar olaraq, başlanğıcın sonlu Δt fasiləsi qədər sürüşmə operatoru

$$R_{\Delta t} = e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \tilde{E}} \quad (12.4)$$

və bu çevrilmənin generatoru (infinitesimal operatoru)

$$\tilde{I} = \frac{i}{\hbar} \tilde{E} \quad (12.5)$$

olur.

$\tilde{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ operatoru koordinat, impuls və hərəkət miqdarı momenti

(bax §13) operatorları ilə kommutasiya etdiyindən, \tilde{E} operatoru onlarla birgə məxsusi funksiyalara malik olur. Məxsusi qiymətlər spektrini müəyyən etmək üçün isə (9.8) tənliyini (12.2) operatoru vasitəsi ilə yazaq

$$\tilde{E} \Psi(x, t) = \tilde{H}(x, t) \Psi(x, t), \quad (12.6)$$

Buradan görünür ki, \tilde{E} operatorunun məxsusi qiymətlər spektri \tilde{H} operatorunun məxsusi qiymətlər spektri üzərinə düşür.

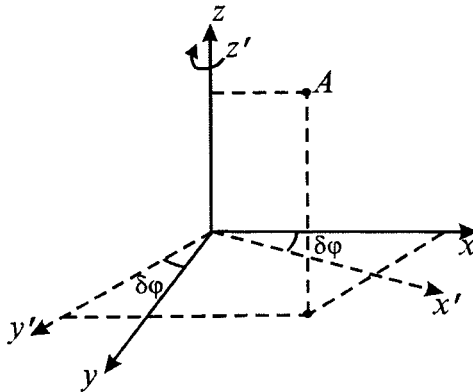
§13. Hərəkət miqdarı momenti operatoru və onun xassələri

§11-də gördük ki, fəzanın bircinsliyi impuls operatorunun analitik ifadəsinin tapılmasına və qapalı sistemin impulsunun saxlanma qanununa gətirir. Fəza izotropluq xassəsinə də malikdir, onda bütün istiqamətlər eyni hüquqludur. Fəzanın izotropluğu qapalı sistemin fiziki xassələrinin ixtiyari fırlanmaya görə invariant qalmasında büruzə verir. Başqa sözlə, qapalı sistem istənilən ox ətrafında ixtiyari bucaq qədər döndükdə, onun Hamilton operatoru dəyişmir, yəni fırlanmaya görə invariant qalır.

Əvvəlcə sistemin koordinat başlanğıcı ətrafında sonsuz kiçik dönmə operatorunu tapaq. Fərz edək ki, sistem məsələn, z oxu ətrafında sonsuz kiçik $\delta\varphi$ bucağı qədər dönür. Onun ixtiyari nöqtəsinin yeni koordinatları x', y', z' köhnə koordinatları x, y, z ilə

$$\begin{aligned}x &\leftarrow x + \delta x, \quad y' = y + \delta y \quad \text{və ya} \quad \delta x = y \delta\varphi, \quad \delta y = -x \delta\varphi \\x' &= x + y \delta\varphi, \quad y' = y - x \delta\varphi, \quad z' = z\end{aligned}\tag{13.1}$$

kimi təyin olunur (şəkil 4-ə bax).



Şəkil 4. Koordinat sisteminin z -oxu ətrafında fırlanması.

Fərz edək ki, dönməzdən əvvəl sistem $\Psi(x, y, z, t)$, döndəndən sonra isə $\Psi(x', y', z', t')$ dalğa funksiyaları ilə təsvir olunur. Sonsuz kiçik $\delta\varphi$ bucağı qədər dönmə nəticəsində $\Psi(x, y, z, t)$ funksiyasını $\Psi(x', y', z', t')$ funksiyasına çevirən operatoru $R_{\delta\varphi}$ ilə işarə etsək,

$$\Psi(x', y', z', t') = R_{\delta\varphi} \Psi(x, y, z, t)\tag{13.2}$$

(13.1)-dən x', y', z' -i uyğun ifadələri ilə əvəz edəndən sonra $\Psi(x', y', z', t')$ funksiyasını $\delta\varphi$ -nin üstlərinə görə sıraya ayırıb, birinci iki hədlə kifayətlənsək,

$$\Psi(x + y\delta\varphi, y - x\delta\varphi, z) = \Psi(x, y, z, t) + \left(y\delta\varphi \frac{\partial\Psi}{\partial x} - x\delta\varphi \frac{\partial\Psi}{\partial y} \right) + \dots$$

$$\Psi(x', y', z', t') = \left[1 - \delta\varphi \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \Psi(x, y, z, t) \quad (13.3)$$

alınar. Bu ifadənin (13.2) ilə müqayisəsindən z oxu ətrafında sonsuz kiçik dönmə operatoru

$$\tilde{R}_{\delta\varphi} = 1 - \delta\varphi \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (13.4)$$

Vektor hesabından

$$x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = [\vec{r}\vec{\nabla}]_z \quad \text{və} \quad \delta\varphi \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = (\delta\varphi)_z [\vec{r}\vec{\nabla}]_z$$

olduğunu nəzərə alsaq, sistemin fəzada koordinat başlanğıcından keçən ixtiyari ox ətrafında sonsuz kiçik $\delta\vec{\varphi}$ bucağı qədər dönmə operatoru

$$\tilde{R}_{\delta\vec{\varphi}} = 1 - \delta\vec{\varphi} [\vec{r}\vec{\nabla}] \quad (13.5)$$

kimi yazılar, burada $\delta\vec{\varphi}$ sonsuz kiçik fırlanma bucaq vektorudur. Onun qiyməti $\delta\varphi$ dönmə bucağına bərabərdir, istiqaməti isə sistemin ətrafında döndüyü oxun müsbət istiqamətində götürülmüş \vec{n} vahid vektoru ilə təyin olunur:

$$\delta\vec{\varphi} = \delta\varphi \vec{n}.$$

(13.5)-də $\vec{\nabla}$ operatorunu impuls operatoru $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ ilə əvəz etsək,

$$R_{\delta\bar{\varphi}} = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi(\bar{n}[\bar{r}\bar{p}]) \quad (13.5')$$

şəklinə düşər. Hərəkət miqdarı momentinin $\bar{L} = [\bar{r}\bar{p}]$ klassik ifadəsinə və uyğunluq prinsipinə əsasən

$$\bar{\bar{L}} = [\bar{r}\bar{p}] \quad (13.6)$$

operatoru və ya

$$\begin{aligned} \bar{\bar{L}}_x &= y\bar{p}_z - z\bar{p}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}), \\ \bar{\bar{L}}_y &= z\bar{p}_x - x\bar{p}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}), \\ \bar{\bar{L}}_z &= x\bar{p}_y - y\bar{p}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{aligned} \quad (13.7)$$

operatorları hərəkət miqdarı momenti operatoru olur. Bu münasibətləri daha yığcam şəkildə yazmaq olar.

$$\bar{\bar{L}}_l = \sum_{k,l} \tilde{\varepsilon}_{ikl} x_k \bar{p}_l = -i\hbar \sum_{k,l} \tilde{\varepsilon}_{ikl} x_k \frac{\partial}{\partial x_l}, \quad (13.7')$$

burada $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$; $\tilde{\varepsilon}_{ikl}$ üçüncü rəng tam antisimmetrik vahid tenzordur. Onun komponentləri i, k, l indekslərini cüt dəfə yerdəyişməklə 1, 2, 3 ardıcılığı alınrsa, 1-ə, tək dəfə -1 -ə, üç indeksdən hər hansı ikisi bərabər olduqda isə 0 (sıfır) bərabərdir.

$R_{\delta\bar{\varphi}}$ -ni $\bar{\bar{L}}$ ilə ifadə etsək,

$$R_{\delta\bar{\varphi}} = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\varphi(\bar{n}\bar{\bar{L}}) \quad (13.5'')$$

olur.

Fırlanma zamanı sistemin xassələri dəyişmədiyindən \bar{H} Hamilton operatoru $R_{\delta\bar{\varphi}}$ operatoru ilə kommutasiya edir. $\delta\bar{\varphi}$ -sabit, vahid operator istənilən operatorla kommutasiya etdiyindən $R_{\delta\bar{\varphi}}$ ilə \bar{H} -in kommutasiyası

$$\check{H}\check{L} - \check{L}\check{H} = 0 \quad (13.8)$$

gətirir. \check{L} operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından (13.8) bərabərliyi, §10-a əsasən, qapalı sistemin hərəkət miqdarı momentinin saxlanma qanununu ifadə edir.

Xarici sahədə olan sistem üçün hərəkət miqdarı momenti ümumiyyətlə, saxlanılır. Lakin xarici sahə müəyyən simmetriyaya malik olarsa, bu moment saxlana bilər. Məsələn, sistem xarici sferik simmetrik sahədə olarsa, belə sahələrdə mərkəzə nəzərən bütün istiqamətlər eyni hüquqlu olduğundan sistemin həmin mərkəzə görə momenti saxlanılır. Sahə silindrik simmetriyaya malik olduğu hallarda isə momentin yalnız silindr oxu boyunca olan proyeksiyası saxlanılır və i.a.

$\delta\varphi$ -nin sonsuz kiçikliyi və (13.3) sırasının sonrakı hədləri də nəzərə alınarsa, (13.5'') operatoru

$$R_{\delta\varphi} = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta\varphi(\check{n}\check{L})}$$

şəklində yazılır.

Müəyyən ox ətrafında iki ardıcıl dönmə həmin ox ətrafında ardıcıl dönmə bucaqlarının cəminə bərabər bucaq qədər dönməyə ekvivalent olduğundan \check{n} oxu ətrafında sonlu φ bucağı qədər dönməyə həmin ox ətrafında sonsuz sayda sonsuz kiçik ardıcıl dönmələrin cəmi kimi baxmaq olar. Onda sonlu φ bucağı qədər dönmə operatoru

$$R_{\varphi} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(\check{n}\check{L})} \quad (13.9)$$

olur.

(11.14) uyğun olaraq (13.1) fırlanma çevrilmələri **generatorları** və ya \check{n} oxu ətrafında fırlanma çevrilmələrinin **infinitesimal** operatoru, hərəkət miqdarı moment operatorunun həmin ox üzrə proyeksiyaları ilə təyin olunur:

$$\check{I}(\check{n}) = \left. \frac{\partial R_{\varphi}}{\partial \varphi} \right|_{\varphi=0} = -\frac{i}{\hbar}(\check{L}\check{n}) \quad (13.10)$$

\check{n} vektoru z oxuna paralel olduqda

$$\tilde{L}_3 = -\frac{i}{\hbar} \tilde{L}_z \quad (13.11)$$

olur və i.a.

Hərəkət miqdarı momenti operatorunun \tilde{L}_x, \tilde{L}_y və \tilde{L}_z komponentləri arasındakı yerdəyişmə (kommutasiya) münasibətlərini tapaq. Bunun üçün əvvəlcə hərəkət miqdarı momenti operatoru ilə koordinat və impuls operatorları arasındakı kommutativlik münasibətlərini hesablayaq.

(11.32) köməyi ilə asanlıqla göstərmək olar ki,

$$\begin{aligned} \tilde{L}_x \tilde{x} - \tilde{x} \tilde{L}_x &= 0, \quad \tilde{L}_y \tilde{y} - \tilde{y} \tilde{L}_y = 0, \quad \tilde{L}_z \tilde{z} - \tilde{z} \tilde{L}_z = 0 \\ \tilde{L}_x \tilde{y} - \tilde{y} \tilde{L}_x &= i\hbar \tilde{z}, \quad \tilde{L}_x \tilde{z} - \tilde{z} \tilde{L}_x = -i\hbar \tilde{y} \quad \text{və i.a.} \end{aligned}$$

Bütün bunları bir münasibətdə cəmləsək,

$$\tilde{L}_i x_k - x_k \tilde{L}_i = i\hbar \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} x_l, \quad (13.12)$$

\tilde{L}_i ilə \tilde{p}_k operatorları arasında eynilə buna oxşar münasibətlər alınır:

$$\tilde{L}_x \tilde{p}_y - \tilde{p}_y \tilde{L}_x = i\hbar \tilde{p}_z \quad \text{və i.a.}$$

yaxud

$$L_i \tilde{p}_k - \tilde{p}_k L_i = i\hbar \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} \tilde{p}_l. \quad (13.13)$$

Bu iki (13.12) və (13.13) münasibətlərinin köməyi ilə $\tilde{L}_x, \tilde{L}_y, \tilde{L}_z$ operatorları üçün kommutasiya münasibətləri asanlıqla tapılır:

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

İndekslərin yerini tsiklik dəyişməklə

$$\tilde{L}_y \tilde{L}_z - \tilde{L}_z \tilde{L}_y = i\hbar \tilde{L}_x; \quad \tilde{L}_z \tilde{L}_x - \tilde{L}_x \tilde{L}_z = i\hbar \tilde{L}_y$$

və ya ümumi şəkildə

$$\tilde{L}_i \tilde{L}_k - \tilde{L}_k \tilde{L}_i = i\hbar \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} \tilde{L}_l \quad (13.14)$$

alınır. Buradan çıxır ki, koordinatlardan və impulsun komponentlərindən fərqli olaraq, hərəkət miqdarı momentinin L_x, L_y, L_z komponentləri eyni zamanda müəyyən qiymət almır və sistemin momenti verilmiş halda müəyyən qiymətə malik ola bilmir. Lakin \tilde{L}_i operatorlarının kvadratları

cəmi olan $\tilde{L}^2 = \tilde{L}_x^2 + \tilde{L}_y^2 + \tilde{L}_z^2 = \sum_{i=1}^3 \tilde{L}_i^2$ operatoru sistemin \tilde{H} Hamilton

operatoru və $\tilde{L}_x, \tilde{L}_y, \tilde{L}_z$ operatorlarının hər biri ilə kommutasiya edir:

$$\tilde{L}^2 \tilde{H} - \tilde{H} \tilde{L}^2 = 0; \quad \tilde{L}^2 \tilde{L}_i - \tilde{L}_i \tilde{L}^2 = 0 \quad (i=1,2,3). \quad (13.14')$$

Başqa sözlə, sistemin enerjisi, hərəkət miqdarı momentinin kvadratı və hərəkət miqdarı momentinin hər hansı verilmiş istiqamətdəki proyeksiyası eyni zamanda müəyyən qiymət alır; sistem bu üç kəmiyyətlə xarakterizə olunan hallara malik ola bilər.

Doğrudan da, (13.14) münasibətlərindən istifadə edərək göstərmək olar ki,

$$\begin{aligned} \tilde{L}_x^2 \tilde{L}_z - \tilde{L}_z \tilde{L}_x^2 &= L_x (\tilde{L}_x \tilde{L}_z - \tilde{L}_z \tilde{L}_x) + (\tilde{L}_x \tilde{L}_z - \tilde{L}_z \tilde{L}_x) \tilde{L}_x = -i\hbar (\tilde{L}_x \tilde{L}_y + \tilde{L}_y \tilde{L}_x) \\ \tilde{L}_y^2 \tilde{L}_z - \tilde{L}_z \tilde{L}_y^2 &= i\hbar (\tilde{L}_x \tilde{L}_y + \tilde{L}_y \tilde{L}_x); \quad \tilde{L}_z^2 \tilde{L}_z - \tilde{L}_z \tilde{L}_z^2 = 0, \end{aligned}$$

buradan

$$\tilde{L}^2 \tilde{L}_z - \tilde{L}_z \tilde{L}^2 = 0; \quad \text{eynilə} \quad \tilde{L}^2 \tilde{L}_y - \tilde{L}_y \tilde{L}^2 = 0; \quad \tilde{L}^2 \tilde{L}_x - \tilde{L}_x \tilde{L}^2 = 0 \quad (13.15)$$

olur.

Əksər hallarda \tilde{L}_x və \tilde{L}_y operatorları əvəzində onların kombinasiyası olan

$$\begin{aligned} \tilde{L}_+ &= \tilde{L}_x + i\tilde{L}_y, \\ \tilde{L}_- &= \tilde{L}_x - i\tilde{L}_y \end{aligned} \quad (13.16)$$

operatorları daxil edilir. Bunlar biri digərinə nəzərən ermit qoşma operatorlardır, lakin özünə qoşma deyildir. (13.14)-ün köməyi ilə

$$\begin{aligned} \tilde{L}_+ \tilde{L}_- - \tilde{L}_- \tilde{L}_+ &= 2\tilde{L}_z; \quad \tilde{L}_z \tilde{L}_\pm - \tilde{L}_\pm \tilde{L}_z = \pm \tilde{L}_\pm; \\ \tilde{L}^2 &= \tilde{L}_+ \tilde{L}_- - \hbar \tilde{L}_z + \tilde{L}_z^2 \end{aligned} \quad (13.17)$$

münasibətlərinin doğruluğunu asanlıqla isbat etmək olar.

Fəza və zamanın 11–13-cü paragraflarda köstərilən simmetriya xassələri bir tərəfdən enerji, impuls və hərəkət miqdarı momentinə uyğun operatorların riyazi ifadələrini tapmağa imkan verir, digər tərəfdən isə (10.4') hərəkət tənliyi əsasında onların uyğun \tilde{L} operatoru ilə əlaqəsi tapılır və buradan da alınır ki, impuls və hərəkət miqdarı momenti hərəkət inteqrallarıdır və onların saxlanması fəza və zamanın müəyyən simmetriyaya malik olması nəticəsidir.

Mikroaləmdə gedən proseslərdə fəza və zamanın yuxarıdakı simmetriya xassələrinin pozulmasına dəlalət edən heç bir təcrübi faktın olmaması göstərir ki, belə dinamik kəmiyyətlər mikrosistemlər üçün də öz mənasını saxlamalıdır. Lakin enerji, impuls, hərəkət miqdarı momenti və s. kimi anlayışları klassik fizikadan kvant fizikasına keçirdikdə, mikrosistemlərin xüsusiyyətlərini nəzərə almaq lazımdır. Klassik fizikada sistemin tam enerjisi E onun $K(\vec{p})$ kinetik və $U(\vec{r})$ potensial enerjilərinin cəminə bərabərdir: $E = K(p) + U(r)$. Hərəkət miqdarı momenti isə \vec{r} və \vec{p} ilə $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$ kimi təyin olunur. Kvant mexanikasında bu münasibətlərin hər ikisi öz mənasını itirir. Koordinat və impuls operatorları kommutasiya etmədiyindən ((11.32)-yə bax), mikrosistem koordinat və impulsu eyni zamanda müəyyən qiymət alan hallara malik ola bilməz. Buna görə də sistemin E tam enerjisi bütövlükdə fiziki mənaya malikdir və o, kinetik və potensial enerjilərinin cəmi kimi təyin oluna bilməz. Hərəkət miqdarı momentinə gəldikdə isə, o, (13.14)-ə əsasən \tilde{L} sistemin baxılan halında, ümumiyyətlə, müəyyən qiymətə malik deyildir.

§14. \tilde{L}^2 və \tilde{L}_z operatorlarının məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları

\tilde{L}^2 və \tilde{L}_z operatorları kommutasiya etdiyindən ((13.15)-ə bax) onlar ümumi məxsusi funksiyalara malikdir

$$\begin{aligned} \tilde{L}^2 \Psi &= L^2 \cdot \Psi, \\ \tilde{L}_z \Psi &= L_z \cdot \Psi. \end{aligned} \quad (14.1)$$

Bu tənlikləri həll etmək üçün sferik koordinat sistemində keçək:

$$x=r \sin \theta \cos \varphi, y=r \sin \theta \sin \varphi, z=r \cos \theta \quad (14.2)$$

Sferik koordinat sistemində

$$\begin{aligned} \tilde{L}_x &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \tilde{L}_y &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \tilde{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned} \quad (14.3)$$

olur. Buradan

$$\tilde{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} = -\hbar^2 \nabla_{\theta \varphi}^2 \quad (14.4)$$

alınar. \tilde{L}^2 və \tilde{L}_z -in ifadələrindən görünür ki, onlar yalnız polyar θ və azimutal φ bucaqlarından asılıdır, yəqin ki, Ψ funksiyası da yalnız həmin bucaqlardan asılı olar. O, $\Psi(\theta, \varphi) = Y(\theta, \varphi)$ kimi işarə olunur. $L^2 / \hbar^2 = \lambda$ qəbul etsək, (14.1)-də birinci tənlik

$$\nabla_{\theta \varphi}^2 Y(\theta, \varphi) + \lambda Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (14.5)$$

olur. Onun həllini

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (14.6)$$

kimi axtarsaq, o, dəyişənlərinə ayrılır:

$$\frac{\sin^2 \theta}{\Theta(\theta)} (\nabla_{\theta}^2 + \lambda) \Theta(\theta) = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \nabla_{\varphi}^2 \Phi = m^2$$

və ya

$$\nabla_{\theta}^2 \Theta(\theta) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta(\theta) = 0 \quad (14.7)$$

$$\nabla_{\varphi}^2 \Phi(\varphi) + m^2 \Phi(\varphi) = 0. \quad (14.8)$$

Burada m^2 -dəyişənlərə ayırma sabiti, $\nabla_{\varphi}^2 = \frac{d^2}{d\varphi^2}$, $\nabla_{\theta}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right)^*$.

(14.8) tənliyinin ümumi həlli ($k^2 + m^2 = 0$, $k = \pm im$ olduğundan)

$$\Phi(\varphi) = C_1 e^{im\varphi} + C_2 e^{-im\varphi}$$

m -in həm müsbət və həm də mənfi qiymətlər aldığıni şərtləşsək, ümumiliyi pozmadan onu

$$\Phi_m(\varphi) = C e^{im\varphi} \quad (14.9)$$

kimi yazmaq olar. Göründüyü kimi, (14.9) funksiyası periodu 2π -yə bərabər olan φ -nin kəsilməz periodik funksiyasıdır. Belə funksiya üçün birqiymətlilik şərti periodiklik şərti üzərinə düşür:

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi)$$

buradan

$$e^{2\pi im} = 1.$$

Axıncı şərt m -in yalnız müsbət və mənfi tam qiymətləri üçün ödənilir. Beləliklə,

$$m=0, \pm 1, \pm 2, \pm \dots \quad (14.10)$$

Qeyd edək ki, burada m -in yuxarı sərhədi müəyyən deyildir, o, (14.7) tənliyin həllindən tapılır.

(14.9) ifadəsindəki C sabiti Φ dalğa funksiyasının

* Θ və Φ funksiyaları yalnız bir dəyişəndən asılı olduğundan ∇_{θ}^2 və ∇_{φ}^2 -da xüsusi törəmələr tam törəmələrlə əvəz olunmuşdur.

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) d\varphi = \delta_{m'm} \quad (14.11)$$

ortonormalanma şərtindən tapılır. Bu inteqralı $m' = m$ üçün açsaq, $2\pi C^2 = 1$, $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ alınır. Beləliklə, ∇_φ^2 operatorunun normalanmış məxsusi funksiyası

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (14.12)$$

məxsusi qiymətləri isə (14.10) çoxluğu ilə verilir.

İndi də (14.7) tənliyini həll edək. Bunun üçün yeni $\cos\theta = x$ ($-1 \leq x \leq 1$) dəyişəni daxil edək. Onda tənlik

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right] + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2} \right) \Theta(x) = 0. \quad (14.13)$$

Buradan görünür ki, x in $x = \pm 1$ qiymətləri (14.13) tənliyinin xüsusi nöqtələridir, bu nöqtələrdə tənliyin ikinci həddi sonsuz olur. Bu sonsuzluqdan xilas olmaq üçün onun həllini

$$\Theta(x) = (1-x^2)^{\frac{s}{2}} u(x) \quad (14.14)$$

şəklində axtaraq. Bu halda (14.13) tənliyi

$$(1-x^2)u''(x) - 2x(s+1)u'(x) + \left(\lambda - s - s^2 + \frac{s^2 - m^2}{1-x^2} \right) u(x) = 0. \quad (14.15)$$

$s = \pm m$ qəbul edilsə, axırıncı hədd düşər. Lakin (14.13) tənliyinə m -in kvadratı daxil olduğundan s -in $+m$ və $-m$ qiymətlərinə uyğun həllər eyni bir tənliyi ödəyir. Onlar arasında yalnız xətti əlaqə ola bilər (bu əlaqə (14.27) ilə verilmişdir). Ona görə də burada (14.13) tənliyinin yalnız $s = m > 0$ -a uyğun həllərini tapacağıq. Bu şərt daxilində (14.15) tənliyi

$$(1-x^2)u''(x) - 2x(m+1)u'(x) + (\lambda - m(m+1))u(x) = 0. \quad (14.16)$$

Bu tənlik xüsusi nöqtələrə malik olmadığından, onun həllini x -in üstlü sırası şəklində axtarmaq olar:

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k. \quad (14.17)$$

Bunu (14.16)-da yazsaq, a_k əmsalları üçün aşağıdakı rekurent düstur alınır:

$$a_{k+2} = \frac{(k+m)(k+m+1) - \lambda}{(k+1)(k+2)} a_k. \quad (14.18)$$

a_{k+2} əmsalı a_{k+1} ilə yox, a_k ilə təyin olunduğundan $u(x)$ funksiyasının əsas həddinin cüt və ya tək olmasından asılı olaraq, $u(x)$ funksiyası ya cüt və ya da tək funksiya olar.

Dalğa funksiyasının sonlu qalması üçün (14.17) sonsuz sırası çoxhədli (polinom) ilə əvəz olunmalıdır. Bu məqsədlə sıranı $k=r$ həddində kəsək, yəni sıranın əmsallarını elə seçək ki, $k \leq r$ üçün $a_k \neq 0$, $k > r$ də isə $a_k = 0$ olsun. Bu şərtin ödənilməsi üçün (14.18) -in surəti $k=r$ -də sıfıra bərabər olmalıdır:

$$(r+m)(r+m+1) = \lambda, \quad (14.19)$$

burada $l=r+m$ əvəz etsək.

$$\lambda = l(l+1) \quad (14.19')$$

olar. r və m müsbət və tam ədədlər olduğundan l müsbət və tam qiymətlər alır. $l=0,1,2,\dots$ l -in yuxarı sərhəddi buradan tapıla bilmir. O, sonra (§40-a bax) müəyyən olunacaq. m -in yuxarı sərhəddi isə $l=m+r$ -dən tapıla bilər. Burada $r=0$ olduqda $m_{\max} = l$ olur. m -in müsbət və mənfi qiymətlər aldığı nəzərə alsaq, $m_{\min} = -1$ və $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ olar. $l=m+r$ münasibətindən alınır ki, l -in verilmiş qiymətində m (m maqnit kvant ədədi adlanır, §40-a bax), $-l$ -dən $+l$ -ə kimi $(2l+1)$ müxtəlif qiymətlər alır. l –orbital və ya azimutal kvant ədədi adlanır.

λ -nın (14.19) ilə verilmiş qiymətini $\frac{L^2}{\hbar^2} = \lambda$ – ifadəsində yazsaq, hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatorunun məxsusi qiymətlər çoxluğu üçün

$$L^2 = \hbar^2 \lambda = \hbar^2 l(l+1), \quad (14.20)$$

momentin mütləq qiyməti üçün isə

$$L = \hbar \sqrt{l(l+1)} \quad (14.20')$$

alınır. Onun spektri diskretdir.

İndi də \tilde{L}^2 operatorunun məxsusi funksiyalarını tapaq. Bunun üçün

$$\nu(x) = (x^2 - 1)^l$$

funksiyası daxil edək və ondan birinci tərtib törəmə götürək:

$$\nu'(x) = 2lx(x^2 - 1)^{l-1} \text{ və ya } (1-x^2)\nu'(x) + 2lx\nu(x) = 0.$$

Bu axırıncı bərabərlikdən $(l+m+1)$ tərtib törəmə götürsək,

$$\left[(1-x^2)\nu'(x)\right]^{l+m+1} + 2l[x\nu(x)]^{l+m+1} = 0 \quad (14.21)$$

alınar. Bu törəmələri hesablamaq üçün Leybnis qaydasından istifadə edək. Bu qaydaya görə yz hasilinin n tərtib törəməsi

$$(yz)^n = y^{(n)}z + ny^{(n-1)}z' + \frac{n(n-1)}{2!}y^{(n-2)}z'' + \dots$$

(14.21) tənliyindəki törəmələri bu düstura görə hesablayanda sıfırdan fərqli hədləri saxlasaq,

$$\begin{aligned} \left[\nu'(1-x^2)\right]^{l+m+1} &= (\nu')^{(l+m+1)}(1-x^2) + (l+m+1)(\nu')^{(l+m)}(-2x) + \\ &+ \frac{(l+m+1)(l+m)}{2!}(\nu')^{(l+m-1)}(-2), \\ \left[x\nu\right]^{l+m+1} &= \nu^{(l+m+1)}x + (l+m+1)\nu^{(l+m)}1 \end{aligned}$$

alınar. Bunları (14.21)-də yazıb

$$u_1(x) = \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\nu(x) = \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2 - 1)^l \quad (14.22)$$

əvəzi qəbul etsək,

$$(1-x^2)u_1'' - 2x(m+1)u_1' + (l+m+1)(l-m)u_1(x) = 0 \quad (14.23)$$

olar. $\lambda = l(l+1)$ və $l(l+1) - m(m+1) = (l+m+1)(l-m)$ olduğundan (14.23) tənliyi $u(x)$ funksiyası üçün alınmış (14.16) tənliyi üzərinə düşür. Deməli, $u(x)$ və $u_1(x)$ funksiyaları yalnız sabitlə fərqlənər:

$$u(x) = C'u_1(x) = C' \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l. \quad (14.24)$$

(14.23)-də $m=0$ götürsək, bu tənlik

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l. \quad (14.25)$$

Lejandr çoxhədlisinin ödədiyi tənliyin üzərinə düşür, doxrudan da $m=0$ və $u_1(x) = P_l(x)$ götürsək,

$$(1-x^2)P_l''(x) - 2xP_l'(x) + l(l+1)P_l(x) = 0$$

dediyimiz tənlik alınır.

(14.24) və (14.25) ifadələrin müqayisəsindən

$$u(x) = C' \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

olur.

$C' = C2^l l!$ -dir. $u(x)$ üçün tapılmış bu ifadəni (14.14)-də yerinə yazıb, $s=m>0$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$\Theta_l^m(x) = C_l^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

alarlıq.

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \text{ çoxhədlisi birləşdirilmiş } \textit{Lejandr çoxhədlisi}$$

adlanır. $R_l(x)$ -in ifadəsini burada yazsaq, o,

$$P_l^m(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad (14.26)$$

olur ($\cos \theta = x$).

Buradan hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatorunun məxsusi funksiyaları üçün

$$\Theta_l^m(x) = C_l^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} \left(\frac{(x^2-1)^l}{2^l l!} \right) = C_l^m P_l^m(x) \quad (14.27)$$

ifadəsi alınır. C_l^m sabiti $\Theta_l^m(x)$ funksiyasının normalanma şərtindən təyin olunur.

$$\int_0^\pi \Theta_l^m(\cos \theta) \Theta_l^m(\cos \theta) \sin \theta \, d\theta = \int_{-1}^1 \Theta_l^m(x) \Theta_l^m(x) \, dx = 1,$$

m -in mənfi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyalar

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x) \quad (14.27')$$

şərtindən tapılır.

(14.26) və (14.27') ifadələrinin köməyi ilə normalanma şərti

$$\left| C_l^m \right|^2 \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{(-1)^m}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 \left[\frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} \left[(x^2-1)^l \right] \right] \left[\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \right] dx = 1$$

kimi yazıla bilər. Bu ifadədən $(l+m)$ dəfə hissə-hissə inteqral alaraq

$$\begin{aligned} \left| C_l^m \right|^2 \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{1}{(2^l l!)^2} \int_{-1}^1 (1-x^2)^l \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} (x^2-1)^l dx &= 1, \\ \frac{d^{2l}}{dx^{2l}} (x^2-1)^l &= (2l)! \\ \int_{-1}^1 (1-x^2)^l dx &= \frac{(l!)^2 2^{2l+1}}{(2l+1)!} \end{aligned}$$

bərabərliklərini nəzərə alsaq, normalanma sabiti üçün

$$C_l^m = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \quad (14.27'')$$

alırıq. Beləliklə,

$$\Theta_l^m(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(x). \quad (14.28)$$

(14.6), (14.12) və (14.27)-dən hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatorunun məxsusi funksiyaları

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (14.28')$$

olur.

Yuxarıda qeyd olunduğu kimi, bu funksiyalar (14.1)-in ikinci tənliyini də ödəməlidir:

$$\tilde{L}_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (14.29)$$

yəni $L_z = \hbar m$ alınır.

Buradan alınır ki, hərəkət miqdarı momentinin (və ya l - in) verilmiş qiymətində onun L_z proyeksiyası $-l$ ilə $+l$ arasında yerləşən $(2l+1)$ müxtəlif qiymət alır. z oxu ixtiyari seçildiyindən momentin L_x və L_y komponentləri haqqında da eyni sözləri demək olar. Lakin bu heç də $Y_l^m(\theta, \varphi)$ funksiyasının \tilde{L}_x və \tilde{L}_y operatorlarının, $l=0$ halı müstəsna olmaq şərtilə (aşağı bax), məxsusi funksiyaları olması demək deyildir. Belə ki, bu üç operator kommutasiya etmir və onlar ümumi məxsusi funksiyalara malik deyildir.

Deməli, hərəkət miqdarı momenti kvadratının qiymətləri cırlaşmışdır, yəni l -in hər bir verilmiş qiymətinə m -in qiyməti ilə fərqlənən $(2l+1)$ sayda $Y_l^m(\theta, \varphi)$ funksiyası uyğun gəlir.

$l=0$ olanda momentin hər üç ox üzrə proyeksiyası da sıfır olur. Bu yeganə haldır ki, momentin üç proyeksiyası eyni zamanda müəyyən qiymət (sıfır) alır. Bu halda $Y_0^0(\theta, \varphi) = \text{const}$ və o, $\tilde{L}_x, \tilde{L}_y, \tilde{L}_z$ operatorlarının

ümumi məxsusi funksiyası olur. Dediymiz kimi, sistemin ikinci belə halı yoxdur. Doğrudan da, momentin kvadratının məxsusi qiyməti

$L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, onun proyeksiyasına uyğun $L_z^2 = \hbar^2 l^2$ maksimum qiymətindən həmişə böyükdür. Bu iki qiymət bir-birinin üzərinə düşmüş olsaydı, baxılan proyeksiya maksimum olan halda digər iki proyeksiya sıfıra bərabər olardı. Lakin bu mümkün deyildir, çünki proyeksiyanın birinin müəyyən qiymətində, digər ikisinin qiyməti qeyri-müəyyən qalır.

İndi də \tilde{L}^2 və \tilde{L}_z operatorlarının diaqonal olduğu təsvirdə, yəni onlar üçün (14.20) və (14.29) bərabərlikləri ödəndiyi halda \tilde{L}_+ , \tilde{L}_- , \tilde{L}_x və \tilde{L}_y operatorlarının sıfırdan fərqli matrisa elementlərini tapaq.

(13.16) yerdəyişmə münasibətlərində (14.29) tənliyini nəzərə alsaq,

$$\tilde{L}_z \tilde{L}_\pm Y_l^m = L_\pm (\tilde{L}_z \pm 1) Y_l^m = (m \pm 1) \tilde{L}_\pm Y_l^m$$

alırıq. $\tilde{L}_\pm Y_l^m = \Phi_l^{m'}$ kimi işarə edib, axırıncı tənliyi

$$\tilde{L}_z \Phi_l^{m'} = (m \pm 1) \Phi_l^{m'} = m' \Phi_l^{m'}$$

kimi yazaq. Buradan alınır ki, $\Phi_l^{m'}$ və ya $\tilde{L}_\pm Y_l^m$ funksiyası \tilde{L}_z operatorunun $(t \pm 1)$ məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyasıdır:

$$\tilde{L}_\pm Y_l^m(\theta, \varphi) = \text{const } Y_l^{m'}(\theta, \varphi).$$

Bu bərabərliyi soldan $Y_l^{m'}(\theta, \varphi)$ funksiyasına vurub, θ və φ -in bütün dəyişmə oblastları üzrə inteqrallasaq,

$$\int Y_l^{m'}(\theta, \varphi) \tilde{L}_\pm Y_l^m(\theta, \varphi) d\Omega = \text{const} \int Y_l^{m'}(\theta, \varphi) Y_l^{m \pm 1}(\theta, \varphi) d\Omega \quad (14.30)$$

alınar.

Ümumiyyətlə, operatorun L_{mn} matrisa elementi bra-və ket-vektorlarla (bax §29)

$$L_{mn} = \langle m | L | n \rangle = \int \Psi_m^* \tilde{L} \Psi_n(dx) \quad (14.31)$$

şəklində də yazılır. Y_l^m sferik funksiyalar üçün orto-normalanma şərtinin ödəndiyini nəzərə alsaq, (14.30) bərabərliyi

$$\int Y_l^m L_{\pm} Y_l^m d\Omega = \langle lm' / L_{\pm} / lm \rangle = \text{const} \delta_{m'm} \quad (14.30')$$

(14.30') ifadəsi \tilde{L}_+ və \tilde{L}_- operatorları üçün

$$\langle m' / L_+ / m \rangle = C_1 \delta_{m'm+1}; \langle m' / L_- / m \rangle = C_2 \delta_{m'm-1}$$

olar, yəni \tilde{L}_+ və \tilde{L}_- operatorları üçün yalnız

$$(L_+)_{m+1,m} = \langle m+1 / L_+ / m \rangle \text{ və } (L_-)_{m-1,m} = \langle m-1 / L_- / m \rangle$$

matrisa elementləri sıfırdan fərqli qalır. Bunları hesablamaq üçün (13.16) münasibətlərinin axırıncısından istifadə edək. \tilde{L}^2 və \tilde{L}_z diaqonal olduğu təsvirdə (13.16) ifadəsinin sağ tərəfi diaqonaldır, onun sol tərəfi də diaqonal olar:

$$\int Y_l^m \tilde{L}_{\pm} \tilde{L}_{\mp} Y_l^m d\Omega = \langle lm / L_{\pm} L_{\mp} / lm \rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m^2 \pm m].$$

Burada $\tilde{L}_- = (\tilde{L}_+)^*$ olduğunu və (14.3) münasibətlərini nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} \langle lm / L_- L_+ / lm \rangle &= \langle lm / L_- / lm' \rangle \langle lm' / L_+ / lm \rangle = \\ &= |\langle l, m+1 / L_+ / lm \rangle|^2 = \hbar^2 [l(l+1) - m^2 - m], \\ \langle lm / L_+ L_- / lm \rangle &= \langle lm / L_+ / lm' \rangle \langle lm' / L_- / lm \rangle = \\ &= |\langle l, m-1 / L_- / lm \rangle|^2 = \hbar^2 [l(l+1) - m^2 + m] \end{aligned}$$

və ya

$$\begin{aligned} \langle l, m+1 / L_+ / lm \rangle &= \hbar \sqrt{(l(l+1) - m(m+1))} = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \quad (14.32) \\ \langle l, m-1 / L_- / lm \rangle &= \hbar \sqrt{(l(l+1) - m(m-1))} = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \end{aligned}$$

alınır. Başqa sözlə, \tilde{L}_+ və \tilde{L}_- operatorlarının $Y_l^m(\theta, \varphi)$ -yə təsiri

$$\tilde{L}_+ Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_l^{m+1}(\theta, \varphi),$$

$$\tilde{L}_- Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_l^{m-1}(\theta, \varphi) \quad (14.33)$$

kimi təyin olunur. (13.15) və (14.32) bərabərliklərindən asanlıqla \tilde{L}_x və \tilde{L}_y operatorlarının sıfırdan fərqli matrisa elementləri üçün aşağıdakı ifadələri alırıq:

$$\begin{aligned} \langle l, m+1 / L_x / lm \rangle &= \frac{1}{2} \langle l, m+1 / L_x / lm \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle lm / L_- / l, m+1 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(l-m)(l+m+1)} ; \quad (14.34) \\ \langle l, m+1 / L_y / lm \rangle &= \frac{1}{2i} \langle l, m+1 / L_x / lm \rangle = \\ &= -\frac{1}{2i} \langle lm / L_- / l, m+1 \rangle = -\frac{\hbar}{2i} \sqrt{(l-m)(l+m+1)} . \end{aligned}$$

§ 15. Cütlük. Həlin cütlüyü

Klassik mexanikada olduğu kimi, kvant mexanikasında da enerjinin, impulsun və hərəkət miqdarı momentinin saxlanma qanunları fəza və zamanın simmetriya xassələri ilə əlaqədardır. Doğrudan da, §11–13-də gördük ki, zamanın hesablanma başlanğıcının ixtiyari seçilməsi, koordinat sisteminin fəzada paralel köçürülməsi və onun öz başlanğıcı ətrafında dönməsi çevrilmələrinə görə qapalı sistemin Hamilton operatoru invariant qalır və bu da yuxarıdakı üç saxlanma qanununa gətirir. Lakin bunun əksi də mümkündür: saxlanma qanununun varlığı sistemin müəyyən simmetriyaya malik olduğuna dəlilət edə bilər. Məsələ burasındadır ki, yuxarıda adını çəkdiyimiz üç çevrilmə kəsilmədən baş verən çevrilmələr olduğundan onlar üçün sonlu çevrilmə həmişə sonsuz kiçik çevrilmələrin cəminə bərabər idi. Bu çevrilmələrin xarakteri klassik kəmiyyətin dəyişmə (kəsilmədən) xarakteri üzərinə düşür və üç kvant saxlanma qanunu öz klassik analoquna malik olur. Ancaq kvant mexaniki sistemin simmetriya şərtləri kəsilməz çevrilmələrlə yanaşı diskret çevrilmələrlə də verilə bilər. Bu axırıncıları sonsuz kiçik çevrilmələrin cəmi kimi göstərmək mümkün olmadığından klassik fizikada heç bir saxlanma qanununa gətirmir. Kvant mexanikasında isə kəsilməz və diskret çevrilmələr eyni hüquqlu olduğundan onların hər ikisi müəyyən saxlanma qanunları ilə əlaqədar olur. Deməli, diskret çevrilmələrə uyğun saxlanma qanunlarının klassik analoqu yoxdur.

Yenə də fəzanın simmetriyası ilə əlaqədar olan qanunlardan biri

üzərində dayanaq. Zərrəciyin bütün koordinatlarının işarəsini eyni zamanda dəyişdikdə alınan

$$x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z \quad (15.1)$$

çevrilmə **güzgü əksi** və ya **fəza inversiya** çevrilməsi adlanır. Bu çevrilmə sağ sistemin koordinat oxlarının eyni zamanda istiqamətini dəyişdikdə onun sol sistemə (və əksinə) çevrilməsinə ekvivalentdir.

Daxilində elektromaqnit və nüvə qüvvələri təsir edən qapalı sistemin Hamilton operatoru bu çevrilməyə görə invariant qalır. Belə sistemlərdə baş verən fiziki hadisənin xarakteri sağ və ya sol koordinat sisteminin seçilməsindən asılı olmur (sağ və sol simmetriya). Bu invariantlıq sistem xarici sferik simmetrik sahədə olduğu və sahənin mərkəzi koordinat başlanğıcı (inversiya mərkəzi) üzərində düşdüyü halda da saxlanır. Sistemdə zəif qarşılıqlı təsir qüvvələri təsir etdikdə isə sistemin Hamilton operatoru bu çevrilməyə görə invariant qalmır. Bu fikir ilk dəfə 1956-cı ildə Li və Yanq tərəfindən söylənmişdi. Bu fərziyənin nə dərəcədə doğru olduğunu yoxlamaq üçün aparılan təcrübə tədqiqatları göstərdi ki, zəif qarşılıqlı təsirlə gedən proseslərdə sağ və sol simmetriya pozulur, yəni baxılan fiziki hadisənin bu sistemlərdə gedişi müxtəlif olur.

Fəza inversiya operatorunu \tilde{I} ilə işarə edək. Onun $\Psi(x, t)$ dalğa funksiyasına təsiri fəza koordinatlarının işarəsinin dəyişməsinə gətirir:

$$\tilde{I}\Psi(x, y, z, t) = \Psi(-x, -y, -z, t) \quad (15.2)$$

Ψ -in \tilde{I} operatorunun məxsusi funksiyası olduğunu fərz etsək, bu təsir, digər tərəfdən

$$\tilde{I}\Psi = \lambda\Psi(x, y, z, t) \quad (15.3)$$

şəklində yazılar. \tilde{I} inversiya operatorunun λ məxsusi qiymətlər spektrini tapmaq üçün (15.2) və (15.3) tənliklərinə \tilde{I} operatoru ilə bir də təsir edək:

$$\tilde{I}^2\Psi = \tilde{I}\Psi(-x, -y, -z, t) = \Psi(x, y, z, t), \quad (15.2')$$

$$\tilde{I}^2\Psi(x, y, z, t) = \lambda^2\Psi(x, y, z, t). \quad (15.3')$$

Bu tənliklərin müqayisəsindən $\lambda^2=1$, $\lambda=\pm 1$ alınır. Deməli, \tilde{I} operatorunun onun məxsusi funksiyasına təsiri ya funksiyanı dəyişmir, ya da onun yalnız işarəsini dəyişir. $\lambda_1=1$ qiymətinə uyğun dalğa funksiyası

inversiya dəyişməsinə görə **cüt**, $\lambda_2 = -1$ uyğun funksiya isə **tək** funksiya adlanır.

Dalğa funksiyasının bu xassəsi onun təsvir etdiyi zərrəciyin daxili xüsusiyyətlərindən asılı olur. Ona görə də $\tilde{I} \Psi = 1 \Psi$ kimi dalğa funksiyaları ilə təsvir olunan zərrəciklərin daxili cütlüyü **müsbət**, $\tilde{I} \Psi = -\Psi$ funksiyaları ilə təsvir olunan zərrəciklərin daxili cütlüyü isə **mənfi** adlanır.

İndi də qapalı sistemin verilmiş halının cütlüyünü təyin edək. Yuxarıda qeyd etdik ki, elektromaqnit və nüvə qarşılıqlı təsir hallarında və sistem xarici sferik simmetrik sahədə olduğu halda qapalı sistemin Hamilton operatoru fəza inversiya çevrilməsinə görə invariant qalır:

$$\tilde{I}\tilde{H} - \tilde{H}\tilde{I} = 0,$$

yəni \tilde{H} operatorunun məxsusi funksiyaları \tilde{I} operatorunun da məxsusi funksiyaları olur.

\tilde{I} inversiya operatorunun yuxarıdakına oxşar olaraq, məxsusi qiymətlərini tapsaq

$$\tilde{I}^2 \Psi_I = \Psi_I = I^2 \cdot \Psi_I$$

və $I = \pm 1$ alınar; burada $\Psi(x, t)$ inversiya operatorunun məxsusi funksiyasıdır. $I = 1$ olan sistemin halı cüt, onun cütlüyü müsbət, $I = -1$ olanda isə sistemin halı tək, cütlüyü isə mənfi adlanır. İversiya operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından və o Hamilton operatoru ilə kommutasiya etdiyindən halın cütlüyü hərəkət inteqralı olur. Bütün saxlanma qanunları kimi cütlüyün saxlanma qanunu da sistemin halının dəyişmə imkanlarını məhdudlaşdırır. Qapalı sistemin halı müəyyən cütlüyə malikdirsə, bu cütlük zamana görə saxlanır, yəni verilmiş hər hansı t_0 başlanğıc anda sistemin halı cütdürsə, zaman keçdikcə o, heç vaxt tək hala keçmir. Əksinə, sistemin halı tək olduqda o həmişə tək halda da qalır.

Asanlıqla göstərmək olar ki, inversiya çevrilmələrinə görə (13.6) hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatoru və onun proyeksiyalarına uyğun (13.7) operatorları invariant qalır. Başqa sözlə, \tilde{I} inversiya operatoru ilə \tilde{L}^2 hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatoru və məsələn, \tilde{L}_z operatoru kommutasiya edir:

$$\tilde{L}^2 \tilde{I} - \tilde{I} \tilde{L}^2 = 0 \quad \tilde{L}_z \tilde{I} - \tilde{I} \tilde{L}_z = 0.$$

Bu üç kəmiyyət sistemin eyni bir halını təyin edir, yəni onlar eyni

zamanda ölçülür. Digər tərəfdən, buradan çıxır ki, \tilde{L}^2 və \tilde{L}_z operatorlarının (14.33) məxsusi funksiyaları \tilde{I} operatorunun da məxsusi funksiyalarıdır, \tilde{I} operatoru üçün

$$\tilde{I}Y_l^m(\theta, \varphi) = I \cdot Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (15.4)$$

tənliyi ödənilir. Dekart koordinat sistemində $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$ inversiya çevrilmələri sferik koordinat sistemində

$$r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi \quad (15.5)$$

inversiya çevrilməsinə ekvivalentdir. (14.28)-də inversiya üçün əhəmiyyəti olmayan sabit vuruğu nəzərə alaraq,

$$\tilde{I}Y_l^m(\theta, \varphi) = Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = P_l^m(\cos(\pi - \theta))e^{im(\varphi + \pi)} \quad (15.6)$$

olar.

Burada $e^{im(\varphi + \pi)} = e^{im\varphi}e^{im\pi} = (-1)^m e^{im\varphi}$ və $\cos(\pi - \theta) = -\cos\theta$ olduğundan, birləşdirilmiş $P_l^m(x = \cos\theta)$ Lejandr polinomunun (14.26) ifadəsindən $P_l^m(-x) = (-1)^{l+m} P_l^m(x)$ alarıq. Bunları (15.6)-də nəzərə alsaq,

$$\tilde{I}Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^{l+m} Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (15.7)$$

olur. (15.4) və (15.7) -nin müqayisəsindən inversiya operatorunun məxsusi qiyməti

$$I = (-1)^l \quad (15.8)$$

olur. (l , m , l) halında olan zərrəciyin $\lambda = \pm 1$ kimi təyin olunan daxili cütlüyünü də nəzərə alsaq, onun baxılan halının cütlüyü

$$I = (-1)^l \lambda \quad (15.9)$$

kimi təyin olunur. Deməli, l -in cüt qiymətinə uyğun halın cütlüyü $\lambda = 1$ olanda müsbət, $\lambda = -1$ olanda mənfi olur; l -in tək qiymətlərində isə halın cütlüyü $\lambda = 1$ olanda mənfi, $\lambda = -1$ olanda müsbət olur.

Sistem qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklərdən təşkil olunduqda

sistemin baxılan halının cütlüyü zərrəciklərin uyğun hallarının cütlükləri hasilini kimi təyin olunur. Doğrudan da, belə sistemin dalğa funksiyası, §5-də göstərdiyimiz kimi, ayrı-ayrı zərrəciklərin dalğa funksiyaları hasilinə bərabər olduğundan, sistemin baxılan halının cütlüyü

$$I = (-1)^{\sum_i l_i} \prod_i \lambda_i$$

şəklində yazılır, burada l_i – i -ci zərrəciyin hərəkət miqdarı momenti ($L_i = \hbar \sqrt{l_i(l_i + 1)}$ mənada), λ_i – onun daxili cütlüyüdür.

Cütlüyün saxlanma qanunu yalnız elektromaqnit və nüvə qüvvələrinin təsiri ilə gedən fiziki hadisələrdə dəqiq ödənilir. Belə qapalı sistemin cütlüyü müsbət olan haldan cütlüyü mənfi olan hala və əksinə keçidi qadağan olunmuş olur. Elementar zərrəciklərin zəif qarşılıqlı təsiri ilə gedən çevrilmə proseslərində (məsələn, $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$, $\mu \rightarrow e + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$, $\pi \rightarrow \mu + \bar{\nu}_\mu$ və i.a. kimi çevrilmələrdə) isə cütlük saxlanmır, belə sistemlərin Hamilton operatoru inversiya çevrilməsinə görə invariant qalmır və onların sağ və sol koordinat sistemlərində gedişi müxtəlif olur. Deməli, cütlüyün saxlanma qanunu, təbiətin universal fiziki qanunu deyil, o, həmişə saxlanmır.

§16. Qeyri-müəyyənlik münasibəti (prinsipi)

Klassik fizikada bütün kəmiyyətlər bir-biri ilə kommutasiya edir. Kvant mexanikasında isə hər istənilən iki kəmiyyət üçün bu şərt ödənilmir. (11.32) və (13.12)–(13.14) münasibətlərindən görünür ki, radius vektorun, impulsun və hərəkət miqdarı momentinin bəzi komponentləri eyni zamanda dəqiq ölçülür (uyğun operatorlar kommutasiya edir), digər komponentləri isə eyni zamanda dəqiq ölçülə bilmir (uyğun operatorlar kommutasiya etmir). Bu axırıncı növ kəmiyyətlər kvant mexanikasında eyni zamanda yalnız müəyyən dəqiqliklə (xəta ilə) ölçülə bilər. Belə kəmiyyətlərə uyğun operatorlar arasındakı kommutasiya münasibətləri məlum olduqda, onların eyni zamanda ölçülməsində buraxılan xətlər arasında da müəyyən münasibət tapmaq olur. Bu münasibətlər qeyri-müəyyənlik münasibəti və ya **qeyri-müəyyənlik prinsipi** adlanır. Bu prinsip kommutasiya etməyən kəmiyyətlər eyni zamanda ölçüldükdə buraxılan xətlərin hasilinin aşağı sərhəddini təyin edir. Bu prinsipdən bir nəticə olaraq çıxır ki, qeyri-kommutativ kəmiyyətlərdən biri dəqiq ölçüldükdə, digəri haqqında heç bir müəyyən məlumat almaq mümkün olmur və

əksinə.

Eyni zamanda dəqiq ölçülə (məəyyən qiymət ala) bilməyən L və F fiziki kəmiyyətlərinə uyğun özünə qoşma operatorlar üçün

$$\check{L}\check{F} - \check{F}\check{L} = i\check{G} \quad (16.1)$$

münasibətinin ödənildiyini fərz edək.

Sistemin $\Psi(x, t)$ ixtiyari halında L və F fiziki kəmiyyətlərin

$$\bar{L} = \int \Psi^* \check{L} \Psi(dx), \bar{F} = \int \Psi^* \check{F} \Psi(dx)$$

orta qiymətlərini hesablayıb, onların köməyi ilə yeni

$$\Delta\check{L} = \check{L} - \bar{L} \quad \text{və} \quad \Delta\check{F} = \check{F} - \bar{F}$$

operatorlarını daxil edək. Asanlıqla göstərmək olar ki, $\Delta\check{L}$ və $\Delta\check{F}$ operatorları da özünə qoşma operatorlardır və onlar (16.1) münasibətini ödəyir:

$$\Delta\check{L}\Delta\check{F} - \Delta\check{F}\Delta\check{L} = \check{L}\check{F} - \check{F}\check{L} = i\check{G}. \quad (16.2)$$

Həmişə müsbət qiymət alan

$$I(\alpha) = \int |(\alpha\Delta\check{L} - i\Delta\check{F})\Psi|^2(dx) \geq 0 \quad (16.3)$$

inteqralını daxil edək, burada Ψ dalğa funksiyası, α – ixtiyari həqiqi parametrdir. $\Delta\check{L}$ və $\Delta\check{F}$ özünə qoşma operatorlar olduğundan (16.3) inteqralını

$$I(\alpha) = \int \Psi^* (\alpha\Delta\check{L} + i\Delta\check{F})(\alpha\Delta\check{L} - i\Delta\check{F})\Psi(dx) \geq 0$$

kimi yazaq. İnteqralaltı hasili açıb,

$$I(\alpha) = \alpha^2 \int \Psi^* (\Delta\check{L})^2 \Psi(dx) + \int \Psi^* (\Delta\check{F})^2 \Psi(dx) - \\ - i\alpha \int \Psi^* (\Delta\check{L}\Delta\check{F} - \Delta\check{F}\Delta\check{L})\Psi(dx) \geq 0.$$

Üçüncü inteqralda (16.2) bərabərliyini nəzərə alsaq, (6.4)-ə əsasən

$$I(\alpha) = \alpha^2 \overline{(\Delta L)^2} + \alpha \overline{G} + \overline{(\Delta F)^2} \geq 0$$

alınar. Axırıncı münasibəti

$$I(\alpha) = \overline{(\Delta L)^2} \left(\alpha + \frac{\overline{G}}{2\overline{(\Delta L)^2}} \right)^2 + \overline{(\Delta F)^2} - \frac{\overline{G}^2}{4\overline{(\Delta L)^2}} \geq 0 \quad (16.4)$$

kimi yazaq. α -nın ixtiyari qiymətində $I(\alpha) \geq 0$ qalması üçün

$$\overline{(\Delta L)^2} \overline{(\Delta F)^2} \geq \frac{\overline{G}^2}{4} \quad (16.5)$$

bərabərsizliyi ödənilməlidir.

(16.5) münasibəti L və F fiziki kəmiyyətləri üçün **qeyri-müəyyənlik münasibəti** adlanır. Bu münasibət L və F eyni zamanda ölçüldükdə buraxılan orta kvadratik xətalər hasilinin aşağı sərhəddini və ya minimal qiyməti təyin edir.

Xüsusi halda $\tilde{L} = \tilde{x}$ və $\tilde{F} = \tilde{p}_x$ götürsək (bu halda $\overline{G} = \hbar$ olur), (16.5)-dən Heyzenberqin məşhur qeyri-müəyyənlik münasibətini alarıq:

$$\overline{(\Delta p_x)^2} \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (16.6)$$

Buradan çıxır ki, zərrəciyin koordinatı dəqiq ölçüldükdə onun impulsunun ölçülməsində buraxılan xəta kifayət qədər böyük olur və əksinə. Sistemin baxılan halında, məsələn, impulsu müəyyən qiymətə malikdirsə ($\overline{(\Delta p_x)^2} = 0$), onun koordinatı (vəziyyəti) tamamilə qeyri-müəyyən qalır ($\overline{(\Delta x)^2} \rightarrow \infty$).

Doğrudan da, müəyyən impulsa malik olan zərrəciyin halı (11.18') müstəvi de-Broyl dalğası ilə təsvir olunur. Onun koordinatlarının paylanma ehtimalı sıxlığı isə $|\Psi_p(x, t)|^2 = \text{const}$ olur. Başqa sözlə, x -in $-\infty \leq x \leq +\infty$ intervalındakı bütün qiymətləri eyni ehtimallıdır və zərrəciyin fəzanın müxtəlif nöqtələrində olma ehtimalları bir-birinə bərabərdir. Eynilə, fəzanın müəyyən x_0 nöqtəsində olan zərrəcik müəyyən impulsa malik ola bilməz, belə zərrəcik üçün impulsun bütün qiymətləri eyni ehtimallı olur.

Doğrudan da, belə zərrəcik $\Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ funksiyası ilə təsvir

olunur (bax(11.7)) və onun impulsunun paylanma ehtimalı $|C_{x_0}(p)|^2$ ilə verilir. $C_{x_0}(p)$ -nin

$$C_{x_0}(p) = \int \Psi_p^*(x) \Psi_{x_0}(x) dx$$

ifadəsində $\Psi_{x_0}(x)$ -in qiymətini yazanda

$$C_{x_0}(p) = \int \Psi_p(x) \delta(x - x_0) dx = \Psi_p(x_0) = \text{const}$$

olar, yəni impulsun $-\infty \leq p \leq +\infty$ intervalındakı bütün qiymətləri eyni ehtimallıdır.

(16.6) münasibətindən alınır ki, kvant mexaniki sistem x və p_x fiziki kəmiyyətlərin hər ikisinin qeyri-müəyyən qiymət aldığı hallarda ola bilər və bu hallarda onların ölçülərindəki kvadratik orta xətlər arasındakı rabitə (16.6) ifadəsi ilə təyin olunur. Lakin onların hər ikisinin müəyyən qiymətə malik olduğu hallar ($\Delta x=0$, $\Delta p=0$) kvant mexaniki sistem üçün mümkündür deyildir.

Kvant mexanikasında impuls anlayışı klassik mənanı saxlamır. O, koordinatla, eyni zamanda ölçülə bilmədiyi kimi, $\bar{p} = m\dot{r}$ kimi də təyin olunmur.

\hbar -in qiyməti çox kiçik olduğundan qeyri-müəyyənlik münasibəti yalnız mikrosistemlər üçün mühümdür. Bəzi hallarda isə (kvaziklassik yaxınlaşmada, §32-yə bax) mikrosistemin kvant təsviri onun klassik təsvirindən çox az fərqlənir. Belə hallarda, təxmini olaraq, x və p_x -in eyni zamanda qiymət aldığı və impulsun koordinatdan asılı olduğunu qəbul etmək olar.

Buradan bir nəticə kimi alınır ki, kvant mexanikasında zərrəciyin trayektoriyası anlayışı mövcud deyildir. Zərrəciklər ya yalnız impulslarına və ya da yalnız koordinatlarına görə seçilə bilər. Deməli, kvant mexanikasında sistemin halı klassik fizikadakı kimi təsvir olunmur. Klassik fizikada sistemin hərəkət halını təyin etmək üçün baxılan (başlangıç) anda onun bütün koordinat və impulsları verilir, onun əsasında hərəkət tənlikləri vasitəsilə sistemin bütün sonrakı andakı hərəkət tərzini, yəni x və p_x -lərin zamanla asılılıq qanunu tapılır və sonra (x, p_x) fəzasında belə nöqtələrin həndəsi yeri – trayektoriyası qurulur. Kvant mexanikasında sistemin halını təyin etmək üçün isə, yuxarıda dediklərimizə əsasən, onu təşkil edən zərrəciklərin ya yalnız koordinatlarının və ya da yalnız impulslarının verilməsi kifayətdir. Beləliklə, kvant mexanikasında sistemin halı daha az sayda kəmiyyətlər vasitəsilə verilir, yəni klassik baxımdan, daha az təfəsilatla təsvir olunur.

Sistemin baxılan halında eyni zamanda müəyyən qiymətə malik olmayan fiziki kəmiyyətlər, yəqin ki, eyni bir cihazla ölçülə bilməz. Belə kəmiyyətləri ölçmək üçün yalnız koordinatları (x) və yalnız impulsları (p) ölçən iki müxtəlif növ cihazdan istifadə etmək lazımdır. Bununla əlaqədar olaraq iddia olunur ki, kvant mexanikasında mikrosistemin halı bir-birini inkar edən iki müxtəlif yolla təsvir olunur. Bu iki təsvir üsulu halın klassik mənada tam təsvirini təmin etmək üçün bir-birini tamamlayır. Kvant mexanikasında mövcud olan bu vəziyyətə Borun **tamamlama prinsipi** deyilir. Bora görə, baxılan cihaz operatorları bir-birilə kommutasiya etməyən kəmiyyətlərdən birini dəqiq ölçürsə, digəri haqqında heç bir məlumat verə bilmir və əksinə.

Qeyri-müəyyənlik münasibətinin köməyi ilə ölçüləri məhdud olan fəzada hərəkət edən zərrəciyin kinetik enerjisini (sürətini) qiymətləndirmək olar. Fərz edək ki, belə fəza ölçüləri l olan kubdur. Onda sistemin dalğa funksiyası yalnız bu kubun daxilində sıfırdan fərqli qalır, ondan kənarında isə sürətlə sıfıra yaxınlaşır. Zərrəciyin fəzada vəziyyətini tapmaq istəsək, buraxılan orta kvadratik xəta, yəqin ki, $(\Delta x)^2 = l^2$ olar və zərrəciyin impulsu $(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4l^2}$ dəqiqliyi ilə təyin olunur.

Ümumiliyi pozmadan hesabət sisteminin başlanğıcını $\bar{p} = 0$ nöqtəsində götürsək, $(\Delta p)^2 = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = \overline{p^2}$ və zərrəciyin orta kinetik enerjisi

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\overline{p^2}}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8ml^2} \quad (16.7)$$

olar. Həmin fəzanın ölçülərini getdikcə kiçildərək $l \rightarrow 0$ zərrəciyin fəzada lokalizə olunma dərəcəsini artırmaq istəsək, onun üzərində getdikcə artan iş görməli olarıq. Deməli, zərrəcik lokalizə edilmiş fəzanın ölçüləri kiçik olduqca, onun kinetik enerjisi böyük olur. Bu nəticə təcrübədə təsdiq olunur. Doğrudan da, atomun (ölçüləri $l \sim 10^{-8}$ sm) daxilində hərəkət edən elektronların kinetik enerjisi, (16.7)-yə uyğun olaraq, 100 eV, nüvənin (ölçüləri $l \sim 10^{-13}$ sm) daxilindəki nuklonun (proton və ya neytronun) enerjisi isə 10^6 eV və ya bir MeV ($MeV = 10^6$ eV) tərtibindədir.

§17. Müxtəlif sahələrdəki hərəkət üçün Şredinger tənliyi

§9-da göstərdik ki, kvant mexanikasının əsas tənliyi ümumi şəkildə

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \tilde{H} \Psi \quad (9.8)$$

kimi yazılır. Lakin həmin paraqrafda gətirilən mülahizələr sistemin \tilde{H} Hamilton operatorunun yalnız ümumi xassələrini aşkar etməyə imkan verir, analitik ifadəsinin tapılması məsələsi isə açıq qalmışdı.

Fiziki kəmiyyətə uyğun operatorun tapılması üçün kvant mexanikasında ümumi bir qayda yoxdur. « α -təsvirində» koordinat operatorunu təyin edəndə operatorun tərifindən və statistik orta qiymət anlayışından, impuls və hərəkət miqdarı momenti operatorlarının ifadəsini tapanda isə fəzanın bircins və izotrop olması xassələrindən istifadə etdik. Digər tərəfdən, göstərdik ki, koordinat və impuls operatorları məlum olarsa, uyğunluq prinsipindən istifadə edərək, hərəkət miqdarı momenti operatorunu tapmaq olar. Fiziki kəmiyyətlərə uyğun xətti və ermit operatorların bu axırncı qurulma yolu ümumi xarakter daşıyır və baxılan təsvirdə koordinat və impuls operatorları məlum olduqda kvant mexanikasında istifadə olunan operatorların tam sistemini qurmaq olur. Əlbəttə, daxil edilən bu və ya başqa postulatın (prinsipin) doğruluğu yalnız ondan çıxan nəticələrin təcrübədə təsdiq olunması ilə isbat oluna bilər.

Klassik mexanikada sistemin tam enerjisi kinetik və potensial enerjilərin cəminə bərabərdir. Tam enerjinin koordinat və impulsdan asılılığını göstərən ifadə isə sistemin Hamilton funksiyası adlanır.

$$H(q, p, t) = K(p) + U(q, t).$$

Buradan, uyğunluq prinsipinə görə, tam enerji operatoru kinetik enerji operatoru $K(p)$ ilə $U(q, t)$ potensial enerji operatorunun cəminə bərabər olar. Tam enerji operatorunun koordinat və impuls operatorları ilə verilmiş ifadəsinə isə kvant mexaniki sistemin Hamilton operatoru və ya hamiltonianı deyilir.

Sistemin Hamilton operatorunun analitik ifadəsi hər hansı bir təsvirdə tapılmış olsa, təsvir nəzəriyyəsinin köməyi ilə, onun istənilən başqa təsvirdə ifadəsini yazmaq elə bir çətinlik törətmir (§21-ə bax). Ona görə də burada biz, hamiltonianın yalnız koordinat təsvirindəki ifadəsini müəyyən etməklə kifayətlənəcəyik. Koordinat təsvirində kinetik enerji operatoru yalnız impuls operatorlarından

$$\tilde{K}(p) = \frac{1}{2m} \tilde{p}^2 = \frac{1}{2m} (\tilde{p}_x^2 + \tilde{p}_y^2 + \tilde{p}_z^2), \quad (17.1)$$

potensial enerji operatoru isə yalnız koordinat operatorlarından asılıdır

$$\tilde{U} = \tilde{U}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, \tilde{t}). \quad (17.2)$$

Onda Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \tilde{K}(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{p}_z) + \tilde{U}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, \tilde{t})$$

və ya

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m}(\tilde{p}_x^2 + \tilde{p}_y^2 + \tilde{p}_z^2) + \tilde{U}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, \tilde{t}) \quad (17.3)$$

kimi yazılar.

Koordinat təsvirində $\tilde{p}_i = -i\hbar\nabla_i$ və $\tilde{x}_i = x_i (i=1,2,3)$ olduğundan (§11-ə bax) potensial enerji operatoru \tilde{U} sadəcə $U(x,y,z,t)$ funksiyası üzərinə düşür və

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x, y, z, t). \quad (17.4)$$

Potensial enerji operatorunun şəkli, klassik fizikada təcrübədən götürülmüş potensial enerjiyə uyğun qurulur və sistemə təsir edən qüvvələr sahəsinin təbiətindən asılı olur. Potensial enerji operatoru \tilde{U} aşkar şəkildə zamandan asılı olmayan konservativ sistemlər üçün Şredinger tənliyi aşağıdakı kimi yazılır:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U \Psi. \quad (17.5)$$

Kvant mexanikasında impuls operatoru ilə koordinat operatoru kommutasiya etmədiyindən kinetik enerji ilə potensial enerji eyni zamanda qiymət almır və tam enerji kinetik və potensial enerjilərin cəmi kimi təyin oluna bilmir. Sistemin tam enerjisi bütövlükdə mənaya malik olur və yalnız bütöv də ölçülə bilər.

Sistemin tam enerjisinin ala biləcək qiymətlər çoxluğunun (spektrinin) xarakteri potensial enerji operatorunun şəklindən, yəni sistemi təşkil edən zərrəciklərin növündən və ona təsir edən qüvvə sahəsinin təbiətindən kəskin şəkildə asılıdır (IV və V fəsillərə bax).

Hamilton operatoru anlayışı qeyri-konservativ sistemlər üçün də ümumiləşdirilə bilər. Belə sistemlər üçün \tilde{U} operatoru aşkar şəkildə zamandan

asılı olur və bu halda $U(x,t)$ *qüvvə funksiyası* adlanır. Qüvvə funksiyası məlum olduqda $\vec{f} = -\vec{\nabla}U$ münasibətindən təyin olunan \vec{f} qüvvəsi zamandan asılı olur və qüvvə funksiyası sistemin potensial enerjisi üzərinə düşür. Bu halda Şredinger tənliyi:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(x,t) \Psi \quad (17.6)$$

kimi yazılır. Burada \tilde{H} operatoru sistemin tam enerjisini təmsil etmir və o, hərəkət inteqralı olmur, yəni saxlanmır. \vec{f} qüvvəsi zamandan asılı olmadıqda U funksiyası zamandan asılı olmur, o, sistemin potensial enerjisi üzərinə düşür və \tilde{H} operatoru sistemin tam enerjisini təmsil edir və enerji saxlanılır.

Konservativ sistemlərin halları **stasionar hallar** adlanır (bundan sonraki §-a bax). Qeyri-konservativ sistemlərin halları isə **qeyri-stasionar hallar** adlanır. Gələcəkdə biz bu iki növ halları bir-birindən fərqləndirəcəyik.

Hamilton operatoru üçün alınmış (17.5) və (17.6) ifadələri zərrəciyin, onun sürətindən asılı qüvvələr sahəsindəki hərəkəti üçün doğru deyildir. Bu növ yeganə qüvvə yüklü zərrəciyin xarici elektromaqnit sahəsində hərəkəti zamanı meydana çıxan Lorens qüvvəsidir. Belə hərəkətin Hamilton operatorunu yazmaq üçün yenə də uyğunluq prinsipinə müraciət edək. Elektromaqnit sahəsi nəzəriyyəsindən (elektrodinamikadan) məlumdur ki, xarici elektromaqnit sahəsində hərəkət edən zərrəciyin Hamilton funksiyası

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

şəklinə malikdir; burada \vec{p} - zərrəciyin ümumiləşdirilmiş impulsu, $\vec{A}(x, y, z, t)$ və $\varphi(x, y, z, t)$ - sahənin vektor və skalyar potensiallarıdır. Hamilton funksiyasının bu ifadəsinə daxil olan kəmiyyətləri uyğun operatorla əvəz edib, koordinat təsvirində $\vec{A}(x, t)$ və $\varphi(x, t)$ potensiallarına uyğun operatorların öz üzərinə düşdüyünü nəzərə alsaq, belə hərəkətin Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\tilde{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi \quad (17.7)$$

olar. Elektromaqnit sahəsində təsir edən qüvvələrdən (Lorens qüvvəsi)

əlavə $U(x, y, z, t)$ qüvvə funksiyası ilə təyin olunan başqa qüvvələrin də olduğunu fərz etsək, hamiltonianın ümumi şəkli

$$\check{H} = \frac{1}{2m} \left(\check{p} - \frac{e}{c} \check{A} \right)^2 + e\varphi + U \quad (17.7')$$

olur və ona uyğun Şredinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\check{p} - \frac{e}{c} \check{A} \right)^2 \Psi + e\varphi \Psi + U \Psi \quad (17.8)$$

kimi yazılır.

Hamilton operatorunun (17.4) və (17.7) ifadələri bir zərrəcikli sistemin xarici sahələrdəki hərəkəti üçün yazılmışdır. Zərrəciklər sistemi üçün hamiltonianın ifadəsini almaq üçün, yuxarıda olduğu kimi, uyğunluq prinsipindən istifadə edilir. Klassik mexanikada N zərrəcikli sistemin hamilton funksiyası

$$\check{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + U_i(\vec{r}_i) \right) + \sum_{i \neq k=1}^N U(\vec{r}_i, \vec{r}_k),$$

burada \vec{p}_i, m_i və \vec{r}_i -ci – zərrəciyin impulsu, kütləsi və radius vektoru, $U_i(\vec{r}_i)$ – həmin zərrəciyin xarici sahədəki qüvvə funksiyası, $U(\vec{r}_i, \vec{r}_k)$ – zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir enerjisidir. Buradan N -zərrəcikli sistemin hamiltonianı

$$\check{H} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U(r_i) \right) + \sum_{i \neq k=1}^N U(\vec{r}_i, \vec{r}_k) \quad (17.9)$$

və uyğun Şredinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)}{\partial t} = \left\{ \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U(r_i) \right) + \sum_{i \neq k} U(r_i, r_k) \right\} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t). \quad (17.10)$$

Yüklü N -zərrəcikli sistemin xarici elektromaqnit sahəsindəki hərəkətini

təsvir edən hamiltonianı almaq üçün (17.9) ifadəsi (17.7)-yə oxşar olaraq ümumiləşdirilməlidir.

Kvant mexaniki sistemin müxtəlif sahələrdə hərəkətini təsvir edən dalğa tənliyini almaq üçün yuxarıda aparılan əməliyyatları heç də Şredinger tənliyinin riyazi çıxarılışı kimi başa düşmək lazım deyildir. Şredinger tənliyi təcrübi faktların ümumiləşdirilməsi nəticəsidir. Klassik mexanikada Nyuton tənliyi, elektrodinamikada Maksvel tənlikləri çıxarılmadığı kimi, kvant mexanikasında da Şredinger tənliyi çıxarılmır. O, sadəcə postula edilir və onun doğruluğu ondan çıxan nəticələrin təcrübi nəticələrə uyğun gəlməsi ilə təsdiq olunur.

Kvant mexanikasında Şredinger tənliyi klassik mexanikada Nyuton tənliyinin rolunu oynayır. Onu həll etməklə kvant mexaniki sistemin hərəkət qanunu tapılır, yəni hər istənilən anda fəzanın istənilən nöqtəsində $\Psi(x,t)$ dalğa funksiyasının qiyməti təyin olunur. Bunun üçün Şredinger tənliyindən əlavə, tam təsvirətmə prinsipinə (§9-a bax) uyğun olaraq, $\Psi(x,t)$ -nin hər hansı başlanğıc, məsələn, $t=0$ anındakı $\Psi(x,0)$ qiyməti və sərhəd şərtləri verilməlidir. Sərhəd şərtlərinin verilməsi, ümumi şəkildə, dalğa funksiyasının üzərinə aşağıdakı üç şərtin qoyulmasına ekvivalentdir. Dalğa funksiyası sistemin kvant halını birqiymətli təsvir etməli, onun fiziki mənasına uyğun olaraq, ehtimal sıxlığı və ehtimal cərəyanı sıxlığı sonlu və kəsilməz qalmalı olduğundan, dalğa funksiyası və onun birinci tərtib törəmələri birqiymətli, kəsilməz və sonlu olmalıdır. Məhz bu şərtlər Şredinger tənliyinin yeganə həllini tapmağa imkan verir.

Zərrəciklər sayının, maddə miqdarının və yükün saxlanma qanunları Şredinger tənliyindən bir nəticə kimi alınır. Doğrudan da, kompleks qoşma dalğa funksiyasının ödədiyi

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + U \Psi^* \quad (17.11)$$

tənliyini sağdan Ψ -yə, (17.5) tənliyini isə soldan Ψ^* vurub, ikincidən birincini çıxsaq,

$$i\hbar(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi) + \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) = 0$$

alırıq. Digər tərəfdən,

$$\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi)$$

və

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* = \vec{\nabla}(\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*)$$

olduğunu nəzərə alsaq,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^* \Psi) + \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}(\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi) = 0$$

alırıq. Burada

$$\rho = \Psi^* \Psi \quad \text{və} \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi) \quad (17.12)$$

qəbul etsək, ρ – ehtimal sıxlığı, \vec{j} – ehtimal cərəyanı (seli) sıxlığı olur və axırncı tənlik kəsilməzlik tənliyi şəklinə düşür:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0. \quad (17.13)$$

ρ -nu zərrəciklər sıxlığı kimi başa düşsək, \vec{j} – 1 sm² səthdən bir saniyədə keçən zərrəciklər seli olar və (17.13) tənliyi zərrəciklər sayının saxlanma qanununu ifadə edir.

Eynilə, ρ və \vec{j} -ni zərrəciyin m kütləsinə və e yükünə vursaq,

$$\begin{aligned} \rho_m &= m\rho = m\Psi^* \Psi, \quad \rho_e = e\rho = e\Psi^* \Psi \\ \vec{j}_m &= m\vec{j} = \frac{i\hbar}{2} (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi) \\ \vec{j}_e &= e\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2m} (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi) \end{aligned} \quad (17.14)$$

uyğun olaraq, maddə miqdarının və yükün saxlanma qanunlarına gətirən kəsilməzlik tənliklərini alırıq:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_m = 0,$$

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_e = 0. \quad (17.15)$$

§18. Stasionar hallar

Bundan qabaqkı paraqrafda göstərdik ki, Hamilton operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı deyilsə, sistemin $U(x,t)$ qüvvə funksiyası onun $U(x)$ potensial enerjisi üzərinə düşür. Bu şərt adətən xarici sabit (bircins) sahələrdə hərəkət edən qapalı sistemlər üçün ödənilir. Belə sistemlər üçün (9.8) Şredinger tənliyini dəyişənlərə ayırmaq olur. Doğrudan da, (9.8) tənliyinin həllini $\Psi(x,t) = \Psi(x)f(t)$ şəklində axtarsaq,

$$i\hbar \frac{1}{f(x)} \frac{df}{dt} = \frac{\tilde{H}(x)\Psi(x)}{\Psi(x)}$$

alırıq. Bu bərabərlikdə sol tərəf yalnız zamandan, sağ tərəf isə yalnız koordinatlardan asılı olduğundan bərabərlik o zaman ödənilir ki, hər iki tərəf eyni bir sabitə bərabər olsun. Sabiti E ilə işarə etsək,

$$i\hbar \frac{df}{dt} = Ef \quad (18.1)$$

$$\tilde{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (18.2)$$

tənlikləri alınar. (18.1) tənliyi asanlıqla inteqrallanır:

$$f(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad (18.3)$$

burada C – inteqrallama sabitidir.

Operatorun məxsusi qiyməti anlayışından (18.2) tənliyində E sabiti \tilde{H} operatorunun məxsusi qiyməti, $\Psi(x)$ funksiyası isə onun məxsusi funksiyası olur.

\tilde{H} zamandan asılı olmadığından və özü ilə kommutasiya etdiyindən, (10.4) əsasən, yuxarıdakı növ sistemlər üçün onların enerjisi saxlanılır. Başqa sözlə, sistemin baxılan halında enerji müəyyən qiymətə malikdirsə, onun bu qiyməti zamana görə sabit qalır.

Kvant mexanikasında enerjisi müəyyən qiymətə malik olan hallar *stasionar hal* adlanır. Enerjinin spektrində enerjinin ən kiçik qiymətinə uyğun olan stasionar hala sistemin əsas halı deyilir.

Stasionar halların dalğa funksiyası kəsilməz spektr üçün

$$\Psi_E(x, t) = \Psi_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}, \quad (18.4)$$

diskret spektr üçün isə

$$\Psi_{E_n}(x, t) = \Psi_n(x, t) = \Psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (18.5)$$

şəklində yazılır.

Stasionar halların dalğa funksiyasının zamandan asılılığının aşkar şəkli məlum olduğundan, onlar üçün $\Psi(x, t)$ funksiyasının tapılması $\Psi_E(x)$ və ya $\Psi_n(x)$ funksiyalarının tapılmasına gəlir. Bu funksiyalar isə (18.2) tənliyinin həllindən tapılır. Ona görə də (18.2) tənliyi *stasionar halların Şredinger tənliyi* adlanır.

Stasionar hallara ən sadə misal olaraq zərrəciyin sərbəst hərəkətini (daha mürəkkəb hallara sonrakı fəsilə baxılacaqdır) göstərmək olar. Xarici sahənin potensial funksiyası $U(x, t) = 0$ olduqda zərrəciyin hərəkəti sərbəst hərəkət* adlanır. Sərbəst hərəkət üçün (18.2) tənliyi

$$\nabla^2 \Psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) = 0 \quad (18.6)$$

şəklinə düşür. Bu tənlik E -nin həqiqi və müsbət qiymətlərində bütün fəzada sonlu qalan həllə malikdir. $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 > 0$ qəbul etsək, (18.6) tənliyinin ümumi həlli

$$\Psi(x) = A e^{i\vec{k}\vec{r}} + B e^{-i\vec{k}\vec{r}}. \quad (18.7)$$

Sərbəst hərəkətdə tam enerjinin kinetik enerji üzərinə düşdüyünü, yəni $E = \frac{p^2}{2m}$ olduğunu nəzərə alsaq, $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ və \vec{k} – dalğa vektoru olur. Sərbəst hərəkət sonsuz fəzada baş verdiyindən (18.7) həlli bir həddə birləşdirmək olar:

*Əslində zərrəciyi başqa cisimlərin (sahələrin) təsirindən tam təcrid etmək mümkün deyildir. Ona görə də burada sərbəst hərəkətə ideal hərəkət kimi baxmaq lazımdır.

$$\Psi(x) = Ae^{ik\bar{r}} = Ae^{\frac{i}{\hbar}p\bar{r}}. \quad (18.8)$$

Bu ifadənin (11.18') ilə müqayisəsi göstərir ki, (18.8) funksiyası impuls operatorunun məxsusi funksiyasıdır ($A = (2\pi\hbar)^{-3/2}$). Beləliklə, sistemin stasionar hallarının dalğa funksiyası, sərbəst hərəkət halında

$$\Psi(x, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p\bar{r})} \quad (18.9)$$

olur. Müstəvi dalğa şəklində olan bu funksiya sistemin E enerjisinin və \bar{p} impulsunun eyni zamanda müəyyən qiymətə malik olduğu halları təsvir edir.

İmpuls kəsilməz dəyişdiyindən sərbəst hərəkətin enerji spektri kəsilməz olur və sıfırdan müsbət sonsuzluğa qədər qiymət alır. İmpulsun verilmiş mütləq qiymətinə onun istiqaməti ilə fərqlənən sonsuz sayda müxtəlif (18.9) dalğa funksiyası uyğun gəldiyindən, sistemin hər bir stasionar halı $\bar{p} = 0, E = 0$ halından başqa sonsuz tərtibdən cırlaşmış olur.

(18.4) və (18.5) ifadələrindən görünür ki, stasionar halların dalğa funksiyasının zamandan asılılığı harmonik qanunla verilir. Bu asılılıq stasionar hallar üçün aşağıdakı xassələrə gətirir.

1. Stasionar hallarda ehtimal sıxlığı və ehtimal cərəyanı sıxlığı zamandan asılı olmur. Dalğa funksiyasının (18.4) və ya (18.5) ifadəsini (17.12)-də

yerinə yazdıqda $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ və $e^{+\frac{i}{\hbar}Et}$ vuruqlarının hasili vahidə bərabər olduğundan

$$\begin{aligned} \rho_n(x, t) &= \Psi_n^*(x, t)\Psi_n(x, t) = \Psi_n^*(x)\Psi_n(x) = \rho_n(x, 0) \\ \vec{j}_n(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m}(\Psi_n(x)\vec{\nabla}\Psi_n^*(x) - \Psi_n^*(x)\vec{\nabla}\Psi_n(x)) = \vec{j}_n(x, 0) \end{aligned}$$

alınır.

2. Operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı olmayan fiziki kəmiyyətin stasionar hallardakı orta qiyməti zamana görə sabit qalır. Orta qiymətin (6.4) tərifindən

$$\begin{aligned} (\bar{L}(t))_{nn} &= \int \Psi_n^*(x, t)\bar{L}(x)\Psi_n(x, t)(dx) = \\ &= \int \Psi_n^*(x)\bar{L}(x)\Psi_n(x)(dx) = \bar{L}_{nn}(0) = \text{const.} \end{aligned}$$

3. İxtiyari L fiziki kəmiyyətin stasionar hallarda müəyyən L_k qiymətini alma ehtimalı $W(L_k)$ zamandan asılı olmur. §8-dən bildiyimiz kimi bu ehtimal

$$C_{nk}(t) = \int \Psi_n(x, t) \Psi_{L_k}^*(x) (dx) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \int \Psi_n(x) \Psi_{L_k}^*(x) (dx)$$

əmsalı modulunun kvadratı ilə təyin olunur (burada $\Psi_n(x, t) = \sum_k C_{nk}(t) \Psi_{L_k}(x)$ bərabərliyindən istifadə olunur):

$$W(L_k, t) = C_{nk}^*(t) C_{nk}(t) = |C_{nk}(t)|^2 = \left| \int \Psi_n(x, t) \Psi_{L_k}^*(x) (dx) \right|^2 = W(L_k, 0).$$

4. (9.8) tənliyi xətti diferensial tənlik olduğundan onun $\Psi(x, t)$ ümumi həlli, superpozisiya prinsipinə əsasən (18,4) və (18.5) xüsusi həllərinin ixtiyari kombinasiyası şəklində yazıla bilər. Enerji spektri diskret olanda

$$\Psi(x, t) = \sum_k C_k \Psi_k(x, t) = \sum_k C_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} \Psi_k(x), \quad (18.10)$$

kəsilməz olanda isə

$$\Psi(x, t) = \int C(E) \Psi_E(x, t) dE = \int e^{-\frac{i}{\hbar} E t} C(E) \Psi_E(x) dE \quad (18.11)$$

olur.

Sistemin halı (18.10) və ya (18.11) funksiyaları ilə təyin olunarsa, müəyyən halın enerjisindən danışmaq olmur. Onlar üçün yalnız enerjinin orta qiymətinin fiziki mənası qalır və o zamandan asılı olmur:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \int \Psi^*(x, t) \hat{H} \Psi(x, t) (dx) = \\ &= \int C^*(E') C(E) e^{-\frac{i}{\hbar} (E - E') t} \Psi_{E'}^*(x) \hat{H}(x) \Psi_E(x) (dx) dE' dE. \end{aligned}$$

(18.2)-dən istifadə edib, $\int \Psi_{E'}^*(x) \Psi_E(x) (dx) = \delta(E - E')$ olduğunu nəzərə alsaq (8.9-a bax),

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \int C^*(E')C(E)Ee^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} dE dE' \delta(E-E') = \\ &= \int C^*(E)C(E)E dE = \text{const}\end{aligned}$$

olar. Lakin onlar üçün ehtimal sıxlığı zamanın funksiyası olur. (18.10)-dan

$$\rho(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = \sum_{n, m} C_n^* C_m \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t}$$

Beləliklə, (18.10) və (18.11) halları üçün stasionarlıq şərti ödənilmir.

Enerjinin təyində (ölçülməsində) buraxılan xəta (yəni qeyri-müəyyənlik) enerjinin orta qiymətindən kifayət qədər kiçik olarsa, sistemin belə halları adətən *kvazistasionar hallar* adlanır. (18.10) və (18.11) halları belə hallardır.

5. Operatoru Hamilton operatoru ilə kommutasiya edən fiziki kəmiyyətlər enerji ilə eyni zamanda müəyyən qiymət ala bildiyindən, stasionar hallar yalnız enerji ilə yox, eyni zamanda başqa fiziki kəmiyyətlərlə də xarakterizə oluna bilər. Belə kəmiyyətlər impuls, hərəkət miqdarı momenti (kvadratı), onun proyeksiyası və bunlar kimi başqa kəmiyyətlərdir. Stasionar hallar içərisində elə hallara təsadüf etmək olar ki, onların hamısı üçün enerjinin qiyməti eyni, onunla eyni zamanda ölçülə bilən fiziki kəmiyyətlərin qiyməti isə müxtəlif olsun. Sistemin belə halları (enerji səviyyələri) *cırılmış hallar* adlanır. Kvant mexanikasında sistemin hər bir halı uyğun dalğa funksiyası ilə verildiyindən enerjinin müəyyən bir qiymətinə (yəni cırılmış səviyyəyə) yeganə bir dalğa funksiyası yox, cırılmanın tərtibi (cırılmış səviyyənin tərkibinə daxil olan halların sayı) qədər bir-birindən xətti asılı olmayan müxtəlif dalğa funksiyası uyğun gələr. Eyni bir cırılmış hala uyğun dalğa funksiyalarının ixtiyari xətti kombinasiyası şəklində verilmiş dalğa funksiyası da enerjinin həmin qiymətinə uyğun olar. Başqa sözlə, cırılmış səviyyənin məxsusi funksiyalarının seçilməsi birqiymətli deyildir, belə ki, xətti kombinasiyaya daxil olan sabitləri istənilən şəkildə seçməklə eyni bir səviyyə üçün istənilən sayıda müxtəlif dalğa funksiyası almaq olar. Cırılmış səviyyənin ixtiyari şəkildə seçilmiş dalğa funksiyaları, ümumiyyətlə, ortoqonal olmur. Xətti kombinasiyaları uyğun şəkildə seçməklə, olduqca müxtəlif yollarla ortoqonallaşdırıla bilən funksiyalar sistemi almaq olar.

6. Sistemin stasionar hallarının enerjisi diskret olduqda, yəni stasionar hallar (18.5) funksiyası ilə verildikdə onun hərəkəti **finit** olur: bütövlükdə sistemin hərəkəti məhdud (sonlu) fəzada baş verir, sistemin özü və ya onun hər hansı bir hissəsi sonsuzluqda ola bilmir. Bu onunla əlaqədardır ki, diskret spektrin (18.5) məxsusi funksiyalarının modulunun kvadratından bütün

fəza üzrə götürülmüş $\int |\Psi_n(x,t)|^2(dx)$ inteqralı sonlu qalır (§9-un (9.6) münasibətinə bax). Digər tərəfdən, bu inteqralın sonlu qalması üçün $|\Psi_n(x,t)|^2 - 1$ x artdıqca azalmalı və sonsuzluqda sıfıra bərabər olmalıdır. Buradan x -in sonsuz qiymət alma ehtimalı sıfır olur, sistem sonsuzluğa gedə bilmir, onun hərəkətinin baş verdiyi fəza həmişə məhdud qalır. Əks teorem də doğrudur: kvant mexaniki sistemin hərəkəti sonlu (məhdud) fəzada baş verirsə, onun stasionar hallarının enerji spektri həmişə diskret olur (bax İV və V fəsillər).

Sistemin stasionar halları kəsilməz spektrin (18.4) məxsusi funksiyaları ilə təsvir olunduqda, $\int |\Psi_E(x,t)|^2(dx)$ inteqralı dağılır ((8.9) və (8.10) münasibətlərinə bax). $|\Psi_E(x,t)|^2 - 1$ baxılan halda koordinatların müxtəlif qiymətlərinin ehtimal sıxlığını təyin etmir, yalnız onunla mütənəşib olur və sonsuzluqda sıfıra bərabər olmur. Ona görə də sistemin sonsuzluqda olma ehtimalı sıfırdan fərqli qalır və sistemin hərəkəti sonsuz (qeyri-məhdud) fəzada baş verir. Sistemin belə hərəkətinə **infinet** hərəkət deyilir, başqa sözlə, kəsilməz spektrin stasionar hallarına infinet hərəkət uyğun gəlir. Burada əks teorem də doğrudur. Sistemin hərəkəti qeyri-məhdud fəzada baş verirsə, onun stasionar hallarının enerji spektri kəsilməz olur.

7. Stasionar hallarda istənilən \tilde{F} operatorunun \tilde{H} operatoru ilə kommutasiyasının orta qiyməti həmişə sıfıra bərabərdir. Doğrudan da, məsələn, diskret spektrdə

$$\int \Psi_n^* (\tilde{H}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{H}) \Psi_n(dx) = \sum_n (HF - FH)_{nn} = \sum_{n,n'} H_{nn'} F_{n'n} - F_{nn'} H_{n'n},$$

burada $H_{nn'} = \int \Psi_n^* \tilde{H} \Psi_{n'}(dx) = E_{n'} \int \Psi_n^* \Psi_{n'}(dx) = E_{n'} \delta_{n'n}$ olduğunu nəzərə alsaq və $\delta_{nn'}$ simvolu vasitəsilə n' üzrə cəmi götürsək,

$$\int \Psi_n^* (\tilde{H}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{H}) \Psi_n(dx) = \sum_n E_n (F_{nn} - F_{nn}) = 0 \quad (18.12)$$

olar.

8. İmpuls və koordinat operatorlarının xassələri ilə tanış olduqda göstərdik ki, \tilde{p}_i ilə \tilde{x}_i operatorları bir-biri ilə kommutasiya etmir. Onlardan hər biri ermit operatorudur. Lakin onların hasili olan $\sum \tilde{p}_i \tilde{x}_i$ və ya $\sum \tilde{x}_i \tilde{p}_i$ operatorları isə ermit deyildir, belə ki, hasilin ermit olması üçün onda iştirak

edən operatorlar kommutasiya etməlidir.

§7-də göstərildiyi kimi belə halda

$$\tilde{F} = \frac{1}{2} \sum_i (p_i x_i + x_i p_i) = \frac{1}{2} (\tilde{p}\tilde{r} + \tilde{r}\tilde{p}) \quad (18.13)$$

operatoru həmişə ermit operatorudur.

Stasionar hallarda \tilde{F} ilə \tilde{H} -in kommutasiyası (18.12)-yə əsasən

$$\int \Psi^* (\tilde{H}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{H})\Psi(dx) = i\hbar \int \Psi^* \frac{\tilde{p}^2}{m} \Psi(x)(dx) - \int \Psi^* \tilde{r}\tilde{\nabla} V(r)\Psi(dx) \quad (18.14)$$

olmalıdır.

(18.14)-də birinci inteqral sistemin K kinetik enerjisinin orta qiymətinin iki mislidir. Sahənin $V(r)$ potensial funksiyasının koordinatlardan asılılığı $V=cr^n$ şəklində olan hallarda $\tilde{r}\tilde{\nabla} V = nV$ olur və ikinci inteqral sistemin potensial enerjisinin orta qiymətinin n -ə hasilidir. Beləliklə (18.14), münasibətindən

$$2\bar{K} = n\bar{V} \quad (18.15)$$

alınır. (18.15) münasibəti **Virial teoremi** adlanır.

Məsələn, zərrəcik nöqtəvi yükün Kulon (sferik simmetrik) sahəsində hərəkət etdikdə (bax §40) $n=-1$, $\bar{K} = -\frac{1}{2}\bar{V}$; üç ölçülü izotrop harmonik ossilyator üçün isə $n=2$, $\bar{K} = \bar{V}$ alınır (bax §43).

§ 19. Kvant tənliklərindən klassik tənliklərə keçid

Kvant nəzəriyyəsi klassik fizikada meydana çıxan müxtəlif çətinliklərin həlli yollarının axtarılması nəticəsində meydana çıxmışdı. Ona görə də klassik mexanika kvant mexanikasından xüsusi bir hal kimi alınmalıdır. Bunu göstərək.

Kvant mexanikasının əsasını iki tənlik təşkil edir. Onlardan biri Şredinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \tilde{H} \Psi(x,t), \quad (9.8)$$

ikincisi isə hərəkət tənliyidir

$$\ddot{L} = \frac{d\dot{L}}{dt} = \frac{\partial \dot{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\ddot{H}\dot{L}]. \quad (10.4')$$

Əvvəlcə (10.4') tənliyinə ekvivalent olan klassik tənlikləri tapaq. Bunun üçün bir dəfə $\dot{L} = \dot{x}_i$, digər dəfə isə $\dot{L} = \dot{p}_i$ ($i=1,2,3$) fərz edək. Koordinat və impuls operatorları zamandan aşkar şəkildə asılı olmadığından onlar üçün (10.4') tənliyi

$$\ddot{x}_i = \frac{d\dot{x}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\ddot{H}\dot{x}_i], \quad \ddot{p}_i = \frac{d\dot{p}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\ddot{H}\dot{p}_i] \quad (19.1)$$

kimi yazılar.

Ümumiliyi pozmadan fərz etmək olar ki, kvant mexaniki sistemin hərəkəti (17.3) Hamilton operatoru ilə verilir. Bizim məqsədimiz üçün onu

$$\ddot{H} = \frac{1}{2m} \sum_k \dot{p}_k^2 + U(x, t)$$

şəklində yazaq. \dot{x}_i koordinat operatorunun $U(x, t)$ ilə və impulsun müxtəlif indeksli operatorlarının isə bir-birilə kommutasiya etdiyini nəzərə alsaq, (19.1) tənlikləri

$$\frac{d\dot{x}_i}{dt} = \dot{x}_i = \frac{i}{2m\hbar} \sum_k (\dot{p}_k^2 x_i - x_i \dot{p}_k^2) \quad (19.2)$$

$$\frac{d\dot{p}_i}{dt} = \dot{p}_i = \frac{i}{\hbar} (\ddot{U}(x, t) \dot{p}_i - \dot{p}_i \ddot{U}(x, t))$$

şəklinə düşər.

Birinci tənliyin sağ tərəfini

$$\dot{p}_k^2 x_i - x_i \dot{p}_k^2 = \dot{p}_k (\dot{p}_k x_i - x_i \dot{p}_k) + (\dot{p}_k x_i - x_i \dot{p}_k) \dot{p}_k$$

kimi dəyişəndən sonra (11.32) yerdəyişmə münasibətlərini nəzərə alıb k üzrə cəmi δ_{ik} simvolu vasitəsilə götürsək,

$$\frac{d\bar{x}_i}{dt} = \frac{\bar{p}_i}{m}, \quad \frac{d\bar{p}_i}{dt} = -\frac{\partial \bar{U}(x,t)}{\partial x_i} \quad (i=1,2,3) \quad (19.3)$$

alınar.

Buradan görünür ki, sürət operatoru ilə impuls operatoru və təcil operatoru ilə qüvvə funksiyası operatoru arasındakı (19.3) münasibətləri onlara uyğun fiziki kəmiyyətlər arasındakı münasibətlər kimidir (uyğunluq prinsipi). İkinci iddianı daha aydın görmək üçün birinci tənlikdən bir də zamana görə törəmə alıb, ikinci tənliyi nəzərə alaraq

$$m \frac{d^2 \bar{x}_i}{dt^2} = m \ddot{\bar{x}}_i = -\frac{\partial \bar{U}(x,t)}{\partial x_i}. \quad (19.4)$$

Bu, Nyuton tənliyinə uyğun operator tənlikdir.

(19.3) və (19.4) tənliklərini sol tərəfdən $\Psi^*(x,t)$ -yə, sağ tərəfdən isə $\Psi(x,t)$ vurub, x -in bütün dəyişmə oblastı üzrə inteqral alsaq,

$$\int \Psi^* \frac{d\bar{x}_i}{dt} \Psi(dx) = \frac{1}{m} \int \Psi^* \bar{p}_i \Psi(dx), \quad (19.5)$$

$$\int \Psi^* \frac{d\bar{p}_i}{dt} \Psi(dx) = - \int \Psi^* \frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} \Psi(dx)$$

və

$$m \int \Psi^* \frac{d^2 \bar{x}_i}{dt^2} \Psi(dx) = - \int \Psi^* \frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} \Psi(dx) \quad (19.6)$$

olar. Fiziki kəmiyyətin orta qiyməti tərifindən

$$\bar{\bar{x}}_i = \frac{\bar{p}_i}{m}; \quad \bar{\bar{p}}_i = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} \quad (19.7)$$

və

$$m \bar{\bar{x}}_i = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} \quad (19.8)$$

olarıq. (19.5), (19.6) və ya (19.7), (19.8) münasibətləri **Erenfest teoremləri** adlanır.

(19.3) və (19.4) tənlikləri operator şəklində, (19.7) və (19.8) tənlikləri isə fiziki kəmiyyətlərin orta qiyməti üçün bizə, uyğun olaraq, klassik me-

xanikadakı Hamilton tənliklərini və Nyuton tənliyini xatırladır. Ona görə də onlara kvant Hamilton tənlikləri və kvant Nyuton tənliyi deyilir.

Bildiyimiz kimi, klassik mexanikada Nyuton tənliyi

$$m\ddot{x}_i = -\frac{\partial U(x,t)}{\partial x_i} \quad (19.9)$$

şəklində yazılır, burada x_i –zərrəciyin klassik koordinatlarıdır. Kvant mexanikasında isə zərrəciyin klassik koordinatları rolunu \bar{x}_i kəmiyyətləri oynayır. Deməli, kvant mexanikasında Nyuton tənliyi

$$m\ddot{\bar{x}}_i = -\frac{\partial U(\bar{x},t)}{\partial \bar{x}_i} \quad (19.10)$$

şəklində malik olmalıdır. Lakin (19.10) tənliyi əslində (19.8) tənliyinin üzərinə düşür. Onların nə dərəcədə bir-birinə uyğun olduğunu müəyyən edək.

(19.8) tənliyinin sol tərəfindəki \bar{x}_i - in ifadəsində inteqral koordinatlara, törəmə isə zamana görə alınır. x_i və t qeyri - asılı dəyişənlər olduğundan, inteqral ilə törəmənin növbəsini dəyişmək, yəni $\ddot{\bar{x}} = \bar{\ddot{x}}$ götürmək olar (bax §10). Onda (19.8) tənliyinin (19.10)-nun üzərinə düşməsi üçün sağ tərəflər bərabər olmalıdır. Lakin belə bərabərlik, ümumiyyətlə, ödənilmir. Onun ödənilməsinə təmin edən şərtləri tapaq.

$\Psi(x,t)$ – dalğa funksiyasının \bar{x}_i -in yaxın ətrafındakı kiçik oblastda sıfırdan fərqli olduğunu fərz edək. Onda sistemin cari koordinatı $x_i = \bar{x}_i + \eta_i$ kimi təyin olunur. Sistemin belə hallarına *dalğa paketi* deyilir. \bar{x}_i isə dalğa paketi mərkəzinin koordinatları olur. Burada $\eta_i = x_i - \bar{x}_i = \Delta x_i$ və $(dx) = (d\eta)$ olduğundan

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{x}_i} = \int \Psi^* (\bar{x}_i + \eta_i, t) \frac{\partial U(\bar{x}_i + \eta_i, t)}{\partial \bar{x}_i} \Psi (\bar{x}_i + \eta_i, t) (d\eta)$$

olar. $U(x)$ – in həmin oblastda x -ə görə kifayət qədər yavaş dəyişdiyini fərz etsək, $\frac{\partial U(\bar{x} + \eta)}{\partial \bar{x}_i}$ funksiyasını \bar{x}_i nöqtəsi ətrafında η -nin üstlərinə görə sıraya ayırmaq olar:

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial \bar{x}_i} = \frac{\partial U(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}_i} \int \Psi * \Psi d\eta_i + \frac{\partial^2 U(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}_i^2} \int \Psi * \eta_i \Psi d\eta_i + \\ + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 U(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}_i^3} \int \Psi * \eta_i^2 \Psi d\eta_i$$

Birinci integral vahidə, ikincisi sıfıra ($\bar{\eta}_i = \Delta \bar{x}_i = 0$), üçüncüsü isə $\bar{\eta}_i^2 = (\Delta x_i)^2$ bərabər olduğundan, (19.8) kvant Nyuton tənliyi

$$m \ddot{\bar{x}}_i = - \frac{\partial U(\bar{x}_i)}{\partial \bar{x}_i} - \frac{1}{2} \frac{\partial^3 U(\bar{x}_i)}{\partial \bar{x}_i^3} (\Delta x_i)^2 \quad (19.11)$$

şəklinə düşər. Bu tənliyin (19.10)-nun üzərinə düşməsi üçün, yəqin ki,

$$\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}_i} \gg \frac{1}{2} \left| \frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}_i^3} \right| (\Delta x_i)^2 \quad (19.12)$$

şerti ödənilməlidir. Bu zaman (19.11) tənliyi bütün kütləsi dalğa paketi mərkəzində toplanmış klassik zərrəciyin hərəkətini təsvir edər.

$U(x, t)$ potensial funksiyası x -ə görə yavaş dəyişdikcə və dalğa paketi dar, yəni $(\Delta x_i)^2$ kiçik olduqca, (19.12) şərti yaxşı ödənilər. Ancaq $(\Delta x_i)^2$ kiçik olduqda, qeyri-müəyyənlik münasibətindən, impulsun qiymətinin təyinindəki $(\Delta p_i)^2$ qeyri-müəyyənlik böyük olur və impuls və eləcə də kinetik enerjinin klassik mənası pozulur. Ona görə də (19.12) şərti (19.10) və (19.11) tənliklərinin sağ tərəflərinin bərabər olması üçün lazımi şərt olub, kafi deyildir.

Paket dar $(\Delta x_i)^2$ kiçik olduqca zərrəciyin orta potensial enerjisi, kvant mexanikasında dalğa paketi mərkəzində olan maddi nöqtənin potensial enerjisinə bərabərdir. Doğrudan da, sıfırıncı tərtib həddə nisbətən $\eta_i = \Delta x_i$ və $\eta_i^2 = (\Delta x_i)^2$ və daha yüksək tərtibdən kiçik hədləri atsaq,

$$\bar{U} = \int \Psi * (\bar{x} + \eta) U(\bar{x} + \eta) \Psi(\bar{x} + \eta) d\eta = U(\bar{x})$$

olar.

Lakin bunu kinetik enerji üçün demək olmaz:

$$\frac{\overline{p_i^2}}{2m} = \frac{1}{2m} \overline{(p_i - \bar{p}_i + \bar{p}_i)^2} = \frac{1}{2m} \overline{(\bar{p}_i + \Delta p_i)^2} = \frac{\bar{p}_i^2}{2m} + \frac{\overline{(\Delta p_i)^2}}{2m} \neq \frac{\bar{p}_i^2}{2m}.$$

$\frac{\overline{p_i^2}}{2m}$ ilə $\frac{\bar{p}_i^2}{2m}$ enerjilərinin bir-birinə təxmini də olsa bərabər olması üçün (qeyri-müəyyənlik münasibətinə görə)

$$\frac{\bar{p}_i^2}{2m} \gg \frac{\overline{(\Delta p_i)^2}}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x_i)^2} \quad (19.13)$$

olmalıdır. Beləliklə, (19.8) tənliyinin (19.10) klassik Nyuton tənliyi üzərinə düşməsi üçün (19.12) və (19.13) şərtləri eyni zamanda ödənilməlidir. Bu isə yavaş dəyişən xarici sahələrdə hərəkət edən böyük impulsu zərrəciklər üçün mümkün olur, yəni kvant mexaniki sistemin belə hərəkəti klassik hərəkətə yaxın olur.

İndi də Şredinger tənliyinə ekvivalent olan klassik tənliklərin tapılması ilə məşğul olaq. Bu halda Şredinger tənliyində $\Psi(x,t)$ -ni kvant mexanikasının klassik oblast üçün yazılmış

$$\Psi(x,t) = ae^{\frac{i}{\hbar}S}$$

dalğa funksiyası ilə əvəz edək. a əmsalının ümumi şəkildə x,t -nin funksiyası olduğunu nəzərə alıb (17.1) tənliyinə daxil olan törəmələri hesablasaq,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a \frac{\partial S}{\partial t}) e^{\frac{i}{\hbar}S},$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^2 a + \frac{2i}{\hbar} \bar{\nabla} a \bar{\nabla} S + \frac{i}{\hbar} a \nabla^2 S - \frac{a}{\hbar^2} (\bar{\nabla} S)^2 \right] e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

Bu ifadələri (17.1) tənliyində yazanda

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 a - \frac{i\hbar}{m} \vec{\nabla} a \vec{\nabla} S - \frac{i\hbar}{2m} a \nabla^2 S + \frac{1}{2m} a (\vec{\nabla} S)^2 + U \quad (19.14)$$

alarıq. Bunları Şredinger tənliyində yerinə yazıb, iki xəyali ədədin bərabərliyi şərtindən

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + U(x, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 a = 0 \quad (19.14')$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{m} \vec{\nabla} a \vec{\nabla} S + \frac{a}{2m} \nabla^2 S = 0 \quad (19.15)$$

tənliklərini alarıq. (19.14') tənliyində \hbar^2 ilə mütənasib kiçik həddi nəzərə almasaq, klassik mexanikada təsir üçün yazılmış Hamilton–Yakobi tənliyini alarıq:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + U(x, t) = 0. \quad (19.16)$$

Buradan görünür ki, kvant mexanikasından klassik mexanikaya keçmək üçün $\hbar \rightarrow 0$ yaxınlaşdırmaq lazımdır. Lakin asanlıqla göstərmək olar ki*, klassik mexanika \hbar -ın sıfırıncı tərtibi ilə yox, birinci tərtibi ilə mütənasib hədlər dəqiqliyi ilə doğrudur.

(19.15) tənliyinin fiziki mahiyyətini aydınlaşdırmaq üçün onun hər həddini $2a$ -ya vurub, onu

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \left(a^2 \frac{\vec{\nabla} S}{m} \right) = 0 \quad (19.17)$$

şəklində yazaq. Burada $a^2 = \Psi^* \Psi$ – zərrəciyin fəzanın hər hansı nöqtəsində olma ehtimal sıxlığı, $\frac{\vec{\nabla} S}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v}$ – zərrəciyin klassik sürəti,

$a^2 \vec{v} = \Psi^* \Psi \vec{v}$ isə ehtimal sıxlığı cərəyanı (seli) olduğundan, (19.17) tənliyi kəsilməzlik tənliyi olur, yəni ehtimal sıxlığının «yerdəyişməsi» klassik mexanika qanunları ilə baş verir və fəzanın hər bir nöqtəsində onun sürəti \vec{v} -yə bərabər olur.

* Bax [1], səh. 117.

III FƏSİL

TƏSVİR NƏZƏRİYYƏSİ ELEMENTLƏRİ

§20. Dalğa funksiyası müxtəlif təsvirlərdə

Biz yuxarıda gördük ki, klassik mexanikada sistemin baxılan halını təyin edən fiziki kəmiyyətlərin hamısı kvant mexanikasında eyni zamanda müəyyən qiymət almır. Kvant mexanikasında sistemin halını təyin etmək üçün onların eyni zamanda ölçülə bilən yalnız bir qismi götürülür, yəni hal, klassik təsvirə nisbətən daha az təfəsilatla təsvir olunur. Sistemin halı məsələn, koordinat və onların ixtiyari funksiyası olan $f(x)$ (məsələn, $U(x)$ potensial enerji) kəmiyyətlərin ölçülməsi ilə təyin olunursa, həmin halda impuls və onun ixtiyari funksiyası olan (məsələn, $K(p)$) kinetik enerji) kəmiyyətləri ölçülə bilmir. Beləliklə, kvant mexanikasında sistemin halını təyin (təsvir) etmək üçün, klassik mexanikada olduğu kimi, yalnız bir yoldan istifadə olunmur. Burada eyni bir hal müxtəlif yollarla təsvir oluna bilər. Hər eyni zamanda ölçülə bilən kəmiyyətlər çoxluğu bu təsvir yollarından biri olur. Bu səbəbdən, kvant mexanikasında sistemin halını təyin etmək üçün iki qrup ölçü cihazından istifadə olunur. Bu cihazların bir qrupu, digər qrup cihazların ölçə bilmədiyi əlamətlərinə görə sistemi xarakterizə edir və əksinə (tamamlama prinsipi). Halın təyin edilməsi üçün istifadə olunan müxtəlif təsvirlər tam ekvivalentdir. Onlardan hər hansı birinin seçilməsi baxılan məsələnin həlli üçün hansının daha əlverişli olması ilə müəyyən olunur. Təsvirlərin ekvivalentliyindən çıxır ki, bir təsvirdən həmişə digərinə keçmək mümkündür.

Bundan əvvəlki paraqraflarda göstərdik ki, sistemin ümumi və müəyyən halları uyğun olaraq Ψ və Ψ_L (və ya $\Psi_{L_n} = \Psi_n$) funksiyaları ilə təsvir olunur, burada L və ya n halın indeksidir, o halı təyin edən fiziki kəmiyyətlər çoxluğunu və ya kvant ədədlər çoxluğunu (V fəslə bax) göstərir.

Sistemin halının koordinat təsviri $\Psi(x,t)$, impuls təsviri $C(p)$, enerji təsviri $C(E)$ və i.a. ilə təsvir olunduğu qeyd edilmişdir. Dalğa funksiyalarının argumenti (x, p, E və i.a.) təsvirin indeksi adlanır. Buradan koordinat təsviri – « x -təsviri», impuls təsviri – « p -təsviri», enerji təsviri – « E -təsviri» və i.a. adlanır. Dediklərimizdən alınır ki, (8.8) ifadəsi ilə verilmiş $C(E)$ və $C(p)$ ($L=p, E$ qəbul edildikdə) funksiyaları sistemin uyğun təsvirdə verilmiş ümumi dalğa funksiyaları olur. Sistemin müəyyən halının dalğa funksiyasını müxtəlif təsvirlərdə yazmaq üçün isə dalğa funksiyası baxılan halın indeksi ilə təmin edilir. Məsələn, $\Psi_L(x), \Psi_{L_n}(x) = \Psi_n(x), C_L(p), C_{L_n} = C_n(p), C_L(E)$ və i.a. funksiyaları sistemin müəyyən L və ya n (L_n) halının müxtəlif təsvirdəki funksiyaları olur.

Vektor hesabından məlumdur ki, hər hansı \vec{a} vektorunun üç ölçülü fəzada seçilmiş ixtiyari istiqamət üzrə proyeksiyasını tapmaq üçün \vec{a} -nı həmin istiqamətdəki \vec{e} vahid vektora skalyar vurmaq lazımdır: $(\vec{a}\vec{e}) = a_e$, burada $a_e - \vec{a}$ -nın \vec{e} istiqamətindəki proyeksiyası adlanır. Üç ölçülü fəza, bildiyimiz kimi, məsələn, dekart koordinat sistemində oxlar üzrə götürülmüş qarşılıqlı ortoqonal olan üç vahid vektorla xarakterizə olunur: $\vec{e}_1 = \vec{i}, \vec{e}_2 = \vec{j}, \vec{e}_3 = \vec{k}$. Çox ölçülü abstrakt fəzalarda da onların sayı fəzanın ölçüsünə bərabərdir. Məsələn, n -ölçülü fəza $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n$ vektorları ilə təyin olunur və onlar baxılan fəzanın **bazis vektorları** adlanır. Adətən bazis vektorlar çoxluğu ortoqonal vektorlar sistemi təşkil edir.

$(\vec{a}\vec{e})$ skalyar hasilə \vec{e} vektorunun \vec{a}^o ($\vec{a} = a\vec{a}^o$) istiqamətindəki proyeksiyası kimi də baxmaq olar. \vec{a}^o vahid vektorların sayı da \vec{a} vektor fəzanın ölçüsü ilə təyin olunur. $\{\vec{e}_i\}$ və $\{\vec{a}_i^o\}$ vektorları çoxluğu birinci halda \vec{e} vektor fəzani, ikinci halda isə \vec{a} vektor fəzani əmələ gətirir.

Eynilə bunun kimi, sistemin müəyyən halını təyin edən $\Psi_L(x)$ funksiyasına $\Psi(x,t)$ kompleks vektorun $C(L)$ kompleks vektorlar fəzasında götürülmüş vahid vektorla skalyar hasil və ya $\Psi(x,t)$ -nin həmin vektor istiqamətindəki proyeksiyası kimi baxmaq olar. x və L kəsilmədən (L_n -diskret) dəyişdiyindən $\{\Psi_L(x)\}$ və $\{C(L)\}$ vektorlar çoxluğu sayılı bilməyən ($\{C(L_n)\}$ sayılı bilən) çoxluq olur.

$\Psi(x)$ və ya $C(L)$ dalğa funksiyaları **hal vektorları** adlanır. Superpozisiya prinsipinə görə, bu vektorları cəmləmək və ya hər hansı kompleks skalyar kəmiyyətə vurmaqla yeni vektorlar alınır. $\{\Psi_L(x)\}$ və ya $\{C(L)\}$ vektorları çoxluğu x -ə və ya L -ə görə sonsuz ölçülü abstrakt kompleks vektor fəzası təşkil edir. Belə (Ψ^*, Ψ) skalyar hasilə təyin olunmuş sonsuz ölçülü vektor fəzaya funksional *Hilbert fəzası* deyilir.

Hər bir $\Psi(x,t)$ hal vektoruna* kompleks qoşma $\Psi^*(x,t)$ hal vektoru qarşı qoyulur. $\{\Psi^*(x,t)\}$ hal vektorları çoxluğu vektorlar fəzasında *qoşma Hilbert fəzası* təşkil edir. Sistemin halı ya $\Psi(x,t)$ və ya da $\Psi^*(x,t)$ hal vektoru ilə təsvir olunur. Bu səbəbdən onlar təbiətə müxtəlif vektorlardır və buna görə də bir-birilə cəmlənə bilmir. $\tilde{L} = \tilde{L}^+$ ermit operatoru $\Psi(x,t)$ vektoruna soldan, $\Psi^*(x,t)$ vektoruna isə sağdan təsir edir:

$$\tilde{L}\Psi(x,t) = \varphi(x,t) \quad (20.1)$$

* Bir təsvirdə verilmiş hal vektoru (dalğa funksiyası) haqqında söylənilən bütün fikirlər istənilən başqa təsvirdə verilmiş hal vektoru üçün də öz qüvvəsini saxlayır.

$$(\bar{L}\Psi)^+ = (\Psi^+ \bar{L}^*) = \varphi^+(x, t)$$

Superpozisiya prinsipinə görə $\Psi(x, t)$ və $C\Psi(x, t)$ hal vektorları eyni bir halı təyin etdiyindən (§5-ə bax), kvant mexaniki sistemin halı $\Psi(x, t)$ -vektorunun qiyməti ilə yox, onun Hilbert fəzasındakı istiqaməti ilə xarakterizə olunur. Buna görə də hal vektoru vahidə normalanır, yəni Ψ^* vektoru ilə Ψ vektorunun (Ψ^*, Ψ) skalyar hasilı vahidə bərabər olur:

$$(\Psi^*, \Psi) = \int \Psi^* \Psi (dx) = 1 \quad (20.1')$$

Adi üç ölçülü fəzada hər bir vektor, ixtiyari şəkildə seçilmiş $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3$ ortoqonal vahid bazis vektorlar sistemində öz koordinatları ilə təyin olunduğu kimi, Hilbert fəzasında da hal vektoru «öz koordinatlarının» qiyməti – bazis dalğa funksiyaları ilə təyin olunur. Hilbert fəzasında bazis vektorlar sistemi və ya tam bazis funksiyaları sistemi seçilir. İstənilən ermit operatorunun məxsusi funksiyalar çoxluğu ortonormalanmış tam funksiyalar sistemi təşkil etdiyindən, istənilən belə çoxluq bazis funksiyalar sistemi kimi istifadə oluna bilər.

Fərz edək ki, $\tilde{F}\Psi_F = F\Psi_F$ tənliyinin həlli olan $\Psi_F(x)$ məxsusi funksiyalar çoxluğu bizə məlumdur və bu $\{\Psi_F(x)\}$ çoxluğu tam sistem təşkil edir. Yuxarıda dediklərimizə əsasən bu çoxluq bazis funksiyalar sistemi kimi seçilə bilər. Digər tərəfdən, superpozisiya prinsipinə görə sistemin istənilən $\Psi(x, t)$ və ya müəyyən halının $\Psi_L(x, t)$ funksiyasını verilmiş operatorun məxsusi funksiyaları üzrə götürülmüş sıra şəklində göstərmək olar: diskret spektr halında

$$\Psi(x) = \sum_{F_n} C(F_n) \Psi_{F_n}(x), \quad (20.2)$$

$$\Psi_L(x) = \sum_{F_n} C_L(F_n) \Psi_{F_n}(x); \quad (20.3)$$

kəsilməz spektr halında isə

$$\Psi(x) = \int C(F) \Psi_F(x) dF, \quad (20.4)$$

$$\Psi_L(x) = \int C_L(F) \Psi_F(x) dF \quad (20.5)$$

olar. Burada $C(F)$ və ya $C_L(F)$ (eləcə də $C(F_n)$ və $C_L(F_n)$) əmsallar çoxluğu sistemin ümumi və müəyyən halının F təsvirindəki dalğa funksiyaları olur

və onlar (8.4) və (8.8) əsasən uyğun olaraq

$$C_n = C(F_n) = \int \Psi_{F_n}^*(x, t) \Psi(x, t) (dx); \quad C(F) = \int \Psi_F^*(x, t) \Psi(x, t) (dx), \quad (20.6)$$

$$C_L(F_n) = \int \Psi_L(x) \Psi_{F_n}^*(x, t) (dx); \quad C_L(F) = \int \Psi_L(x) \Psi_F^*(x) (dx) \quad (20.7)$$

kimi təyin olunur.

Beləliklə, (20.2)-(20.5) bərabərlikləri F -təsvirindən x -təsvirinə, (20.6)-(20.7) bərabərlikləri isə əksinə x -təsvirindən F -təsvirinə keçidi xarakterizə edir. \tilde{F} operatoru ixtiyari ermit operatoru olduğundan bu bərabərliklər koordinat təsvirindən istənilən operator təsvirinə və əksinə keçidləri ifadə edir. Məsələn, \tilde{F} operatoru sistemin \tilde{H} Hamilton operatoru üzərinə düşərsə, onlar enerji və ya E -təsvirindən, \tilde{p} impuls operatoru üzərinə düşərsə – impuls və ya p -təsvirindən koordinat təsvirinə və əksinə keçidləri göstərir.

\tilde{H} və \tilde{p} operatorlarının koordinat təsvirində verilmiş və $\tilde{H} \Psi_E(x) = E \Psi_E(x)$, $\tilde{p} \Psi_p(x) = p \Psi_p(x)$ tənliklərinin həlli olan $\Psi_E(x)$ və $\Psi_p(x)$ məxsusi funksiyalarını bazis funksiyaları kimi seçib, məxsusi funksiyalar spektrinin diskret olduğunu ($\Psi_p(x)$ -nin spektri həmişə kəsilməzdir) qəbul etsək, (20.2)-(20.7) ifadələrinə əsasən E və p -təsvirlərindən x -təsvirinə keçid üçün

$$\Psi(x, t) = \sum_n C(E_n) \Psi_{E_n}(x, t) = \sum C_n \Psi_n(x, t), \quad (20.8)$$

$$\Psi_L(x) = \sum_{E_n} C_L(E_n) \Psi_{E_n}(x)$$

və

$$\Psi(x) = \int C(p) \Psi_p(x) (dp), \quad (20.9)$$

$$\Psi_L(x) = \int C_L(p) \Psi_p(x) (dp);$$

x -təsvirindən E - və p -təsvirlərinə keçid üçün isə

$$C(E_n) = \int \Psi_{E_n}^*(x) \Psi(x, t) (dx) \quad (20.10)$$

$$C_L(E_n) = \int \Psi_{E_n}^*(x) \Psi_L(x, t) (dx)$$

və

$$C(p) = \int \Psi_p^*(x, t) \Psi(x, t) (dx)$$

(20.11)

$$C_L(p) = \int \Psi_p^*(x, t) \Psi_L(x, t) (dx)$$

alarıq. Burada $C(E_p)$, $C_L(E_p)$ və $C(p)$, $C_L(p)$ əmsalları, uyğun olaraq, enerji və impuls təsvirlərindəki dalğa funksiyalarıdır.

Baxılan təsvirdə verilmiş dalğa funksiyaları normalanmış olarsa, keçilmiş təsvirdəki dalğa funksiyaları da normalanmış olur. Məsələn, fərz edək ki, koordinat təsvirində dalğa funksiyaları normalanmışdır:

$$\int \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) (dx) = 1.$$

Misal üçün (20.9) ifadəsindən

$$\int C^*(p') C(p) (dp') (dp) \int \Psi_p^*(x, t) \Psi_p(x, t) (dx) = 1$$

alarıq. İmpuls operatorunun Ψ_p məxsusi funksiyaları üçün alınmış (11.19) normalanma şərtindən və \mathcal{E} -funksiyanın (8.11) xassəsindən istifadə etsək,

$$\int C^*(p') C(p) \delta(p' - p) (dp') (dp) = \int C^*(p) C(p) (dp) = 1$$

olar, yəni p -təsvirinin $C(p)$ dalğa funksiyaları da normalanma şərtini ödəyir.

Eyni sözləri müəyyən halın dalğa funksiyaları üçün də demək olar, yəni $\Psi_L(x, t)$ funksiyaları üçün

$$\int \Psi_L^*(x) \Psi_L(x) (dx) = 1$$

şərti ödənilirsə, $C_L(r)$ -lər üçün də həmin şərt ödənilir:

$$\int C_L^*(p) C_L(p) (dp) = 1.$$

E və p -təsvirlərinin dalğa funksiyalarının fiziki mənası və başqa xassələri §8-də verilmişdir.

§21. Operatorlar müxtəlif təsvirlərdə

§20-də dalğa funksiyalarının müxtəlif təsvirlərdəki ifadələrini tapdıq və bir təsvirdə verilmiş dalğa funksiyasından ixtiyari başqa təsvirdəki dalğa funksiyasına keçməyi təmin edən münasibətləri müəyyən etdik. İndi də bu işi operatorlar üçün görək. Əvvəlcə operatorları müxtəlif təsvirlərdə ifadə etməyi öyrənək, sonra isə onun bir təsvirdə verilmiş ifadəsi ilə digər təsvirdəki ifadəsi arasındakı əlaqəni tapaq.

İxtiyari $\tilde{L}(x)$ operatorunun koordinat təsvirində verildiyini fərz edək. Bu halda \tilde{L} operatoru, yəqin ki, koordinatların və onlara görə törəmələrin funksiyası olar: $\tilde{L}(x, -i \frac{\partial}{\partial x}, \dots)$. Belə operator koordinat təsvirində verilmiş dalğa funksiyasına təsir etdikdə, onu həmin təsvirdəki digər funksiyaya çevirir:

$$\varphi(x, t) = \tilde{L}(x)\Psi(x, t). \quad (21.1)$$

Hər hansı ixtiyari $\tilde{F}(x)$ operatorunun $\{\Psi_F(x, t)\}$ və ya $\{\Psi_{F_n}\} = \{\Psi_n\}$ məxsusi funksiyaların tam sistemi məlumdursa, sistemin istənilən funksiyası həmin operatorun məxsusi funksiyalarının ixtiyari xətti kombinasiyası (superpozisiyası) şəkildə göstərilə bilər: $\tilde{F}(x)$ operatorunun diskret spektrə malik olduğu hala baxaq:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sum_n C_n \Psi_n(x, t), \\ \varphi(x, t) &= \sum_m b_m \Psi_m(x, t). \end{aligned} \quad (21.2)$$

Burada (20.6)-ya görə $\{C_n\}$ və $\{b_m\}$ çoxluqları F təsvirindəki dalğa funksiyalarıdır.

(21.2) ifadələrini (21.1)-də yazıb, \tilde{L} -in yalnız x -dəyişəninə təsir etdiyini nəzərə alsaq,

$$\sum_m b_m \Psi_m(x, t) = \sum_n C_n \tilde{L}(x)\Psi_n(x, t).$$

Bu tənliyi sol tərəfdən $\Psi_k^*(x, t)$ -funksiyasına vurub, x -in bütün dəyişmə oblastı üzrə inteqrallasaq,

$$b_k = \sum_n L_{kn} C_n \quad (21.3)$$

alınar, burada $\int \Psi_k^*(x,t) \Psi_n(x,t) (dx) = \delta_{kn}$ olduğu nəzərə alınmış və

$$L_{kn} = \langle k | L | n \rangle = \int \Psi_k^* L \Psi_n (dx) \quad (21.4)$$

işarəsi qəbul olunmuşdur. $\{C_n\}$ və $\{b_m\}$ çoxluqları F -təsvirində verilmiş Ψ və φ funksiyalarına uyğun funksiyalar sistemi olduğundan (21.1) və (21.3) tənlikləri müxtəlif təsvirlərdə verilmiş eyni bir tənlikdir. (21.1) tənliyində $\tilde{L}(x)$ operatorunun oynadığı rolu (21.3) tənliyində $\{L_{kn}\}$ çoxluğu oynayır. Deməli, $\{L_{kn}\}$ çoxluğu F -təsvirində verilmiş $\tilde{L}(x)$ operatoru olur. Diskret spektr halında $\{L_{kn}\}$ çoxluğu adətən sonsuz (və ya sonlu) sətir və sütunlara malik cədvəl şəklində göstərilir və o **matrisa** adlanır. Belə cədvəl (matrisa) \underline{L} və ya $|L_{kn}|$ kimi işarə olunur*:

$$\underline{L} = |L_{kn}| = \begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \dots & L_{1k} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & \dots & L_{2k} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{n1} & L_{n2} & \dots & L_{nk} & \dots \end{vmatrix} \quad (21.5)$$

Bu cədvəlin hər bir L_{ik} elementi (ümumiyyətlə kompleks) **matrisa elementi** adlanır. Matrisa elementi, göründüyü kimi, iki indeksə malikdir, birinci indeks cədvəldə sətirin, ikinci indeks isə sütunun nömrəsini göstərir. Cədvəlin sətir və sütunlarının sayı bərabər olarsa, belə matrisa **kvadrat matrisa** adlanır. Ümumiyyətlə matrisanın sətir və sütunlarının sayı bərabər olmaya da bilər.

İndeksləri eyni olan L_{ij} matrisa elementlərinə **diaqonal elementlər** deyilir. Belə elementlərdə sətir nömrəsi sütun nömrəsinə bərabər olur. Yalnız diaqonal elementləri sıfırdan fərqli olan

* Bəzən baxılan matrisaya uyğun determinantı hesablamaq lazım olur. (21.4) matrisasına uyğun determinant $\|L_{kn}\|$ kimi işarə olunacaqdır.

$$|L_{kn}| = \begin{vmatrix} L_{11} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & L_{22} & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & L_{kk} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad (21.6)$$

matrisa **diaqonal matrisa** adlanır. Diaqonal matrisaya ən yaxşı misal **vahid matrisa** ola bilər. Vahid matrisanın elementləri

$$\delta_{ik} = \int \Psi_i^* \Psi_k (dx) = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases} \quad (21.7)$$

kimi təyin olunur və vahid matrisa

$$I = |\delta_{ik}| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 1 \end{vmatrix} \quad (21.8)$$

şəklində yazılır.

Bütün elementləri sıfıra bərabər olan matrisa **sıfır matrisa** adlanır və

$$\underline{0} = |0| = \begin{vmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{vmatrix} \quad (21.8')$$

kimi yazılır.

İstənilən ermit operatorun tam sistem təşkil edən $\{\Psi_i\}$ məxsusi funksiyalar çoxluğu üçün (21.7) şərti həmişə ödənildiyindən (21.8) vahid matrisa istənilən təsvirdə vahid qalır. Buradan çıxır ki, vahid matrisa bütün matrisalar ilə kommutasiya edir.

Koordinat təsvirində olduğu kimi, istənilən başqa təsvirdə də verilmiş matrisa (operator) ilə yanaşı törəmə matrisaları (operatorları) bilmək lazım olur. Törəmə matrisalardan əvvəlcə **transpozisiya olunmuş** matrisanı göstərək. Bu matrisa verilmiş $|L_{mn}|$ matrisadan sətir və sütunların qarşılıqlı yerdəyişməsi ilə alınır. Transpozisiya olunmuş \tilde{L} – matrisanın elementi \underline{L} matrisanın uyğun elementindən indekslərin yerdəyişməsi ilə alınır.

$$(\tilde{L})_{mn} = L_{nm}. \quad (21.9)$$

Verilmiş \underline{L} matrisası ilə ona kompleks qoşma \underline{L}^* matrisanın matrisa elementləri bir-birinə kompleks qoşma olur və matrisa *kompleks qoşma matrisa* adlanır:

$$(L_{mn})^* = \left(\int \Psi_m^* \tilde{L} \Psi_n(dx) \right)^* = \int \Psi_m \tilde{L}^* \Psi_n^*(dx) = L_{mn}^*. \quad (21.10)$$

Transpozisiya olunmuş (21.9) matrisasından kompleks qoşma götürsək, alınan matrisa *qoşma matrisa* adlanır:

$$(\tilde{L})_{mn}^* = L_{nm}^+. \quad (21.11)$$

Qoşma matrisa baxılan \underline{L} matrisasına bərabər olduqda, yəni

$$(\tilde{L}_{mn})^* = \tilde{L}_{nm}^* = L_{nm}^+ = L_{nm} \quad (21.12)$$

matrisa *ermit matrisa* olur.

İndi də baxılan matrisanı öz təsvirində yazmağı öyrənək. Yuxarıda gördük ki, koordinat təsvirində verilmiş $\tilde{L}(x)$ operatorunu \tilde{F} operatoru təsvirində yazmaq üçün (21.4) ifadəsinə daxil olan $\Psi_n(x)$ funksiyaları \tilde{F} operatorunun məxsusi funksiyaları olmalıdır. Buradan alınır ki, hər istənilən matrisa öz təsvirində yazıla bilər. Bunun üçün (21.4) ifadəsinə daxil olan $\Psi_n(x)$ funksiyaları $\tilde{L}(x)$ operatorunun məxsusi funksiyaları olmalıdır. Bu halda (21.4) ifadəsi

$$L_{kn} = \int \Psi_k^* \tilde{L} \Psi_n(dx) = L_n \int \Psi_k^* \Psi_n(dx) = L_n \delta_{kn} \quad (21.13)$$

şəklini alır. Onda (21.8)-ə əsasən \underline{L} matrisası

$$\underline{L} = |L_{kn}| = L_n \delta_{kn} = \begin{vmatrix} L_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & L_2 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & L_k \end{vmatrix} \quad (21.13')$$

olar. Deməli, hər bir matrisa öz təsvirində diaqonal matrisa ilə ifadə olunur və onun diaqonal elementləri baxılan operatorun məxsusi qiymətləri üzərinə düşür.

\tilde{L} operatorunu, məsələn, enerji təsvirində yazmaq üçün Hamilton operatorunun məxsusi funksiyaları verilməlidir. \hat{H} -in diskret spektrə malik olduğunu fərz etsək, (21.5) matrisası enerji təsvirində verilmiş $\tilde{L}(x)$ operatoru olar və i.a.

\tilde{F} operatorunun kəsilməz spektrə malik olduğu hala baxaq. Bu halda $\{\Psi_F(x)\}$ çoxluğu F indeksinə görə sayıla bilməyən çoxluq təşkil etdiyindən (21.1) tənliyinə daxil olan $\Psi(x,t)$ və $\varphi(x,t)$ funksiyaları üçün (21.2) superpozisiya münasibətləri

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \int C(F)\Psi_F(x)dF, \\ \varphi(x,t) &= \int b(F)\Psi_F(x)dF\end{aligned}\quad (21.14)$$

şəklində yazılar. Burada $C(F)$ və $b(F)-F$ -təsvirində verilmiş funksiyalar olur.

(21.14) ifadələrini (21.1)-də yazıb, alınan bərabərliyi soldan $\Psi_{F'}^*(x)$ funksiyasına vurandan sonra x -in bütün dəyişmə oblastı üzrə inteqrallasaq və $\Psi_F(x)$ funksiyası üçün (8.9) ortonormalalma şərtini nəzərə alsaq,

$$b(F') = \int L_{F'F} C(F) dF \quad (21.15)$$

alınır. Burada

$$L_{F'F} = \int \Psi_{F'}^*(x) \tilde{L}(x) \Psi_F(x) (dx) \quad (21.16)$$

işarə olunmuşdur. $\{L_{F'F}\}$ çoxluğu F -təsvirində verilmiş $\tilde{L}(x)$ operatoru olur. O, F' və F indekslərinin kəsilmədən dəyişən funksiyasıdır. Onu (21.5) cədvəli şəklində göstərmək mümkün deyildir. Buna baxmayaraq bu halda da $|L_{F'F}|$ matrisa, $L_{F'F}$ isə matrisa elementi adlanır.

Diskret spektrə uyğun matrisaların yuxarıda sadaladığımız bütün xassələri kəsilməz spektrə uyğun matrisalar üçün də qüvvədə qalır.

Məsələn, $\tilde{L}(x)$ operatorunu öz təsvirində yazaq. Bu halda, $\Psi_F(x)$ funksiyaları, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi $\tilde{L}(x)$ operatorunun məxsusi funksiyaları olmalıdır, yəni $\tilde{L}(x)\Psi_F(x) = L(F)\Psi_F(x)$. Onda (21.16)

$$L_{F'F} = L(F) \int \Psi_{F'}^*(x) \Psi_F(x) (dx) = L(F) \delta(F' - F) \quad (21.17)$$

şəklinə düşər. Bu ifadə diskret spektrdə (21.13) bərabərliyini xatırladır, lakin δ_{nk} simvolu əvəzində burada $\delta(F'-F)$ funksiya durur. δ -funksiya yalnız $F \Leftarrow F$ -də sıfırdan fərqli qaldığından (§11-ə bax), $\delta(F'-F)$ kəsilməz spektrdə vahid matrisa, $|L_{F'F}|$ isə diaqonal matrisa olur.

$\tilde{L}(x)$ operatorunu, məsələn, impuls təsvirində yazmaq üçün \tilde{F} operatorunun $\tilde{p} = -i\hbar \nabla$ impuls operatoru üzərinə düşdüyünü qəbul etmək kifayətdir. İmpuls operatoru kəsilməz spektrə malikdir. $\{\Psi_p(x)\}$ məxsusi funksiyalar sistemi və $\{\tilde{p}\}$ məxsusi qiymətlər spektri kəsilməzdir (§11-ə bax). İmpuls təsviri üçün (21.14) bərabərlikləri

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int C(p) \Psi_p(x) (dp) \\ \varphi(x, t) &= \int b(p) \Psi_p(x) (dp) \end{aligned} \quad (21.18)$$

şəklində olur, burada $\Psi_p(x)$ funksiyası (11.8') ilə verilir. $C(p)$ və $b(p)$ – impuls təsvirində verilmiş $\Psi(x)$ və $\varphi(x)$ funksiyaları olur, onlar arasında əlaqə (21.15)-ə əsasən

$$b(p) = \int L_{p'p} C(p') (dp') \quad (21.19)$$

və

$$L_{p'p} = \int \Psi_{p'}^*(x) \tilde{L}(x) \Psi_p(x) (dx) \quad (21.20)$$

olur. $\{L_{p'p}\}$ çoxluğu impuls təsvirində verilmiş $\tilde{L}(x)$ operatorudur.

(21.16) və (21.17) ifadələri bizə kvant mexanikasında ən çox istifadə olunan koordinat və impuls operatorlarını qarşılıqlı təsvirlərdə ifadə etməyə və eləcə də müxtəlif fiziki kəmiyyətlərə uyğun digər operatorları bu təsvirlərdə (yəni matrisa şəklində) yazmağa imkan verir.

Əvvəlcə $\tilde{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ impuls operatorunu öz təsvirində yazaq. Bunun

üçün (21.16)-da $\tilde{F} = \tilde{L} = \tilde{p}$ götürək. Onda (12.11) və (12.14)-ə əsasən

$$p_{p'p} = \int \Psi_{p'}^*(x) \tilde{p} \Psi_p(x) (dx) = p \int \Psi_{p'}^*(x) \Psi_p(x) (dx) = p \delta(p - p') \quad (21.21)$$

alarıq. Gözləndiyi kimi, impuls operatoru öz təsvirində diaqonal matrisa ilə ifadə olunur.

İmpuls operatorunun x -təsvirindəki şəklini tapmaq üçün (21.15) tənliyində $\tilde{F} = \tilde{x}$, $\tilde{L} = \tilde{p}$ götürək, koordinat təsvirində $b = \varphi(x)$ və $C = \Psi(x)$ olduğunu nəzərə alsaq, bu tənlik

$$\varphi(x') = \int p_{x'x} \Psi(x) (dx) \quad (21.22)$$

şəklinə düşər. Asanlıqla göstərmək olar ki, axırıncı tənliyə daxil olan $p_{x'x}$ operatoru

$$p_{x'x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \quad (21.23)$$

şəklində olmalıdır. Bunu isbat etmək üçün $p_{x'x}$ -in (21.23) ifadəsini (21.22)-də yazıb, axırıncını hissə-hissə inteqrallayaq:

$$\begin{aligned} \varphi(x') = i\hbar \int \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \Psi(x) (dx) &= [\delta(x - x') \Psi(x)]_{-\infty}^{\infty} - \\ &- i\hbar \int \delta(x - x') \frac{\partial \Psi}{\partial x} (dx). \end{aligned}$$

δ -funksiya yalnız $x = x'$ nöqtəsində sıfırdan fərqli qaldığından $[\delta(x - x') \Psi(x)]_{-\infty}^{\infty} = 0$ olar. Axırıncı inteqral isə (8.11')-ə əsasən δ -funksiya vasitəsilə götürülə bilər:

$$\varphi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = \tilde{p} \Psi(x), \quad (21.24)$$

yəni \tilde{p} üçün (21.1) tənliyi alınır. Deməli, impuls operatoru koordinat təsvirində (21.23) şəklindədir.

İndi də \tilde{x} operatorunun öz təsvirində və impuls təsvirindəki şəklini tapmaq. (21.16)-da $\tilde{F} = \tilde{L} = \tilde{x}$ götürüb (12.3) və (12.3')-i nəzərə alsaq,

$$x_{xx'} = \int \Psi_x^*(x'') \tilde{x} \Psi_{x'}(x'') dx'' = x' \int \Psi_x^*(x'') \Psi_{x'}(x'') (dx'') = x' \delta(x - x') \quad (21.25)$$

alarıq, deməli \tilde{x} operatoru öz təsvirində diaqonal matrisadır.

(21.16)-ya görə \tilde{x} operatoru impuls təsvirində

$$x_{pp'} = \int \Psi_p^*(x) \tilde{x} \Psi_{p'}(x) (dx) = \int \Psi_p^*(x) x \Psi_{p'}(x) (dx)$$

kimi ifadə olunur. $\Psi_p(x)$ -in məlum (12.13) və (12.21) ifadələrindən istifadə edib, impulsa görə törəmə ilə koordinata görə götürülmüş inteqralın növbəsinə dəyişsək, x -in impuls təsvirində ifadəsi

$$x_{pp'} = i\hbar \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial}{\partial p} \int e^{i(p-p')x} (dx) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p-p') \quad (21.26)$$

olar.

(21.21), (21.23), (21.24) və (21.26) ifadələrinin köməyi ilə istənilən fiziki kəmiyyətə uyğun operatoru koordinat və ya impuls təsvirində yazmaq olar. İki misal göstərək.

Potensial enerji operatoru koordinat təsvirində

$$\langle x | V | x' \rangle = V_{xx'} = V(x') \delta(x-x'), \quad (21.27)$$

impuls təsvirində

$$\langle p | V | p' \rangle = V_{pp'} = V(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}) \delta(p-p'). \quad (21.28)$$

\tilde{H} Hamilton operatoru koordinat təsvirində

$$\langle x | H | x' \rangle = H_{xx'} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \delta(x-x') + V(x') \delta(x-x'), \quad (21.29)$$

impuls təsvirində

$$\langle p | H | p' \rangle = H_{pp'} = \frac{p^2}{2\mu} \delta(p-p') + V(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}) \delta(p-p'). \quad (21.30)$$

Qarşılıqlı təsir enerjisi koordinatların funksiyası olan sistemlərin tədqiqi üçün kvant mexanikasında koordinat təsvirindən istifadə olunur. Bu təsvirdə qarşılıqlı təsir funksiyası ona uyğun operatorun üzərinə düşür, kinetik enerji operatoru isə sadə şəkə malik olur (§11-ə bax).

Elektromaqnit, zəif və ya güclü qarşılıqlı təsirdə olan zərrəciklər sisteminə gedən səpilmə, doğulma, udulma, çevrilmə (dağılma) və i.a. proses-

lərin tədqiqi üçün isə impuls təsviri istifadə olunur. Bunun səbəbi ondan ibarətdir ki, belə sistemlərdə zərrəciyi fəzada lokalizə etmək, yəni vəziyyətini dəqiq təyin etmək mümkün olmur, lakin enerji və ya impulsu isə dəqiq ölçülə bilir.

§22. Matrisalar üzərində əməliyyatlar

Matrisalar üzərində aparıla bilən əməliyyatlar (matrisalar cəbri) ilə tanış olaq.

a) Matrisaların toplanması

\tilde{C} operatoru \tilde{L} və \tilde{F} operatorlarının

$$\tilde{C} = \tilde{L} + \tilde{F} \quad (7.1)$$

cəmi kimi təyin olunarsa, \tilde{C} -yə uyğun matrisa da \tilde{L} və \tilde{F} uyğun matrisaların cəminə bərabər olur.

(7.1) bərabərliyini sol tərəfdən Ψ_m^* , sağ tərəfdən isə Ψ_n vurub, x -in bütün dəyişmə oblastı üzrə inteqrallasaq,

$$\int \Psi_m^* \tilde{C} \Psi_n(dx) = \int \Psi_m^* \tilde{L} \Psi_n(dx) + \int \Psi_m^* \tilde{F} \Psi_n(dx)$$

və ya (21.7)-yə əsasən

$$C_{mn} = L_{mn} + F_{mn} \quad (22.1)$$

olar. Bu münasibət iki (və ya ikidən çox) matrisanın toplanması qaydasını verir: yekun matrisanın hər bir elementi toplanan matrisaların uyğun elementləri cəminə bərabərdir.

(22.1)-dən alınır ki, yalnız rəngləri eyni olan, yəni sətir və sütunların sayı bərabər olan matrisalar toplanma bilər:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} \end{pmatrix}$$

Toplanan matrisalar bir-birinə bərabər olarsa, yekun matrisa onlardan birinin uyğun mislinə bərabər olur. İki matrisa o vaxt bir-birinə bərabər

hesab olunur ki, onların uyğun elementləri bərabər olsun, yəni $L_{ik}=F_{ik}$ olduqda $|L|=|F|$ olur. Doğrudan da, $a_{ik}=b_{ik}$ olarsa,

$$|a_{ik}| + |b_{ik}| = 2|a_{ik}| = 2|b_{ik}|$$

alınır.

b) Matrisaların vurulması

\tilde{C} operatoru \tilde{L} və \tilde{F} operatorlarının

$$\tilde{C} = \tilde{L}\tilde{F} \quad (22.1')$$

hasilini kimi təyin olunursa, $|C|$ matrisası $|L|$ və $|F|$ matrisalarının hasilinə bərabər olur. Matrisaların vurulması qaydasını tapaq. Bunun üçün (22.1') münasibətini (22.1)-ə oxşar olaraq

$$C_{mn} = \int \Psi_m^* \tilde{C} \Psi_n(dx) = \int \Psi_m^* \tilde{L} \tilde{F} \Psi_n(dx) = \int \Psi_m^* \tilde{L} (\tilde{F} \Psi_n)(dx) \quad (22.2)$$

şəklində yazsaq.

\tilde{F} -in Ψ_n -ə təsiri hər hansı φ_n funksiyasına gətirir, φ_n -i isə Ψ_k funksiyaların ixtiyari kombinasiyası şəklində göstərilə bilər:

$$\varphi_n = \tilde{F} \Psi_n = \sum a_{nk} \Psi_k,$$

bunu soldan $\Psi_{k'}^*(x)$ -ə vurub x üzrə inteqrallasaq,

$$\int \Psi_{k'}^* \tilde{F} \Psi_n(dx) = F_{k'n} = \sum_k a_{nk} \int \Psi_{k'}^* \Psi_k(dx) = \sum_k a_{nk} \delta_{kk'} = a_{nk'}$$

alırıq, onda

$$\tilde{F} \Psi_n(x) = \sum_k F_{kn} \Psi_k \quad (22.3)$$

olar. Bunu (22.2)-də yazsaq,

$$C_{mn} = \sum_k \int \Psi_m^* \tilde{L} \Psi_k(dx) F_{kn} = \sum_k L_{mk} F_{kn}$$

və ya

$$C_{mn} = \sum_k L_{nk} F_{kn} \quad (22.4)$$

alınar.

(22.4) ifadəsi iki matrisanın vurulma qaydasını ifadə edir. Bu qaydanı ifadə etmək üçün fərz edək ki, (22.4)-ə daxil olan matrisalar iki sətir sütunlu (2 rənqli) matrisalardır, yəni indeksləri 1,2 qiymətlərini alır. Bu hal üçün $|C|$ matrisasının matrisa elementlərini hesablayaq:

$$C_{11} = \sum_{k=1,2} L_{1k} F_{k1} = L_{11} F_{11} + L_{12} F_{21},$$

$$C_{12} = \sum_k L_{1k} F_{k2} = L_{11} F_{12} + L_{12} F_{22}$$

və i.a. Burada C_{11} , C_{12} və L_{11} , L_{12} $|C|$ və $|L|$ matrisalarının birinci sətir elementləri, F_{11} , F_{21} və F_{12} , F_{22} isə $|F|$ -in, uyğun olaraq birinci və ikinci sütun elementləridir. Buradan iki matrisanın vurulma qaydasını belə ifadə etmək olar: $|C|$ matrisanın C_{mn} elementini tapmaq üçün $|L|$ matrisanın m -sətir elementlərini $|F|$ matrisanın n -sütunun uyğun elementlərinə vurub toplamaq lazımdır.

(22.4)-dən çıxır ki, $|L|$ və $|F|$ matrisalarını o vaxt $|LF|$ ardıcılığı ilə vurmaq olar ki, $|L|$ matrisanın sütunları sayı $|F|$ matrisanın sətirlər sayına bərabər olsun. Onda $|C|$ hasil matrisanın sütunları sayı $|L|$ -in sütunları sayına, sətirləri sayı isə $|F|$ -in sətirləri sayına bərabər olar. $|L|$ və $|F|$ kvadrat matrisalar olanda $|C|$ də həmin tərtibdən (rənqdan) kvadrat matrisa olur.

Matrisaların hasili, operatorların hasili kimi, ümumiyyətlə kommutativ deyildir: $|LF| \neq |FL|$. Doğrudan da

$$(LF)_{mn} = \sum_k L_{mk} F_{kn}, \quad (FL)_{mn} = \sum_k F_{mk} L_{kn} \quad (22.5)$$

bərabərlikləri ümumi halda bir-birinin üzərinə düşmür, belə ki, (22.5) ifadələrinin birincisində $|L|$ -in sətir elementləri $|F|$ -in sütun elementlərinə vurulduğu halda, ikinci ifadədə isə $|F|$ -in sətir elementləri $|L|$ -in sütun elementlərinə vurulur. Aşağıdakı misal bunu əyani şəkildə nümayiş etdirir. Tutaq ki,

$$|L| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad |F| = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Onda

$$|LF| = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}, \quad |FL| = \begin{pmatrix} 7 & 2 \\ 9 & 4 \end{pmatrix},$$

yəni $|LF| \neq |FL|$ -dir. $|LF|=|FL|$ olanda matrisalar kommutativdir deyəcəyik.

(22.1) və (22.4) münasibətlərindən alınır ki, matrisaların hasili distributiv xassəyə malikdir:

$$|L(|F| + |C|) = |LF| + |LC|. \quad (22.6)$$

Matrisaların hasili həmçinin assosiativ xassəyə də malikdir.

$$\tilde{L}(\tilde{F}\tilde{C}) = (\tilde{L}\tilde{F})\tilde{C}. \quad (22.7)$$

(22.4) münasibəti vasitəsilə üç və çox matrisaların hasili olan matrisanı tapmaq olar. Tutaq ki, $\tilde{C} = \tilde{L}\tilde{F}\tilde{Q}$ bərabərdir. (22.4)-ə görə \tilde{C} -nin elementləri

$$C_{mn} = (LFQ)_{mn} = \sum_k (LF)_{mk} Q_{kn} = \sum_{k,i} L_{mi} F_{ik} Q_{kn} \quad (22.8)$$

kimi hesablanır. İstənilən sayda matrisaların hasilindən təşkil olunmuş matrisanın elementləri də buna oxşar olaraq tapılır:

$$\begin{aligned} \tilde{C} &= \tilde{L}\tilde{F}\tilde{Q}\tilde{A}\dots\tilde{D}, \\ C_{mn} &= \sum L_{mk} F_{kl} Q_{lj} A_{jr} \dots D_{fn}. \end{aligned} \quad (22.9)$$

Matrisaların hasili olan matrisaya ermit qoşma matrisanı tapmaq üçün operatorların hasilinə uyğun qoşma operatoru təyin edən (8.12) və ya (8.14) münasibətlərini əsas götürmək olar. $|C| = |LF|$ və ya $|C| = |LFQA\dots D|$ matrisalarına ermit qoşma matrisalar

$$\begin{aligned} |C^+| &= |(LF)^+| = |F^+||L^+|, \\ C_{mn}^+ &= (F^* L^*)_{mn} = \sum (F^*)_{mk} (L^*)_{kn} \end{aligned} \quad (22.10)$$

və

$$|C^+| = |D^* \dots A^* Q^* F^* L^*|,$$

$$C_{mn}^+ = \sum (D^*)_{m^1} \dots (A^*)_{lk} (Q^*)_{kj} (F^*)_{jr} (L^*)_{rn} \quad (22.11)$$

kimi təyin olunur.

İndi də tez-tez təsadüf edilən bəzi matrisaların seçilməsi qaydası ilə tanış olaq.

(21.8) ilə verilmiş sıfırncı matrisa, hər baxılan halda, onun hər hansı başqa matrisaya vurulması qanunundan təyin olunur. $|O|$ matrisası elə seçilir ki,

$$|O||L| = 0 \text{ və ya } |L||O| = 0 \quad (22.12)$$

olsun. Deməli, $|O|$ matrisasının sətir və sütunlarının sayı $|L|$ matrisasının sətir və sütunlarının sayı ilə təyin olunur. Ona görə də (22.12)-də birinci və ikinci bərabərliklərdəki sıfırncı matrisanın sətir və sütunlarının sayı ümumiyyətlə müxtəlifdir.

Bunun kimi də hər baxılan hal üçün (21.8) ifadəsi ilə verilmiş $|I|$ vahid matrisa təyin oluna bilər. Vahid matrisa

$$|I||L| = |L| \text{ və } |F||I| = |F| \quad (22.13)$$

münasibətlərdən seçilir. Buradan çıxır ki, $|I|$ vahid matrisa kvadrat matri-sadır. Onun tərtibi (ranqı - sətir və ya sütunların sayı) $|L|$ -matrisanın sütun-ları sayına, $|F|$ matrisanın sətirləri sayına bərabərdir.

Cəbrdə vahidin oynadığı rolu matrisa hesabında vahid matrisa oynayır. Məlumdur ki, ixtiyari C sabit ədədi vahidin misli kimi göstərmək olar. Buna oxşar, C sabit ədədinə uyğun matrisa vahid matrisanın C misli kimi göstərilə bilər. Başqa sözlə, C ədədinə uyğun matrisanın elementləri

$$C_{ik} = C\delta_{ik} \text{ və ya } |C| = C|I| \quad (22.14)$$

kimi təyin olunur. Bu matrisanı ixtiyari $|L|$ matrisasına vurub, (22.4) və (22.13) bərabərliklərini və δ_{ik} simvolunun xassəsini nəzərə alsaq,

$$(CL)_{mn} = (CIL)_{mn} = \sum_k C\delta_{mk}L_{kn} = CL_{mn}$$

və ya

$$C|L_{ik}| = |CL_{ik}| \quad (22.15)$$

olar. Deməli, C sabit ədədi matrisaya vurmaq üçün onu matrisanın hər

bir elementinə vurmaq lazımdır.

$|L|$ matrisası qeyri-sinqulyar olduqda, ona tərs matrisa qurula bilər. $|L|$ -ə tərs matrisanı $|L^{-1}|$ kimi işarə etsək, o

$$|L||L^{-1}| = \mathbb{I} \text{ və ya } |L^{-1}||L| = \mathbb{I} \quad (22.16)$$

tənlərlərindən təyin olunur. Tərs matrisanın elementlərini tapmaq üçün, onun (22.16) təyinindən alınan

$$\sum_k L_{mk}(L^{-1})_{kn} = \delta_{mn}; \quad \sum_k (L^{-1})_{mk} L_{kn} = \delta_{mn} \quad (22.17)$$

xətti tənlilər sistemini həll etmək lazımdır. Bu sistem o vaxt həll oluna bilər ki, $|L|$ -ə uyğun determinant sıfırdan fərqli qalsın ($\det|L| \neq 0$). Onda tərs matrisanın hər bir elementi

$$(L^{-1})_{ik} = \frac{\min(L)_{ik}}{\det|L|} \quad (22.18)$$

kimi tapılır.

İxtiyari matrisanın determinantını tapmaq üçün əvvəlcə o, müəyyən sayda sətir və sütunlarını pozmaqla kvadrat matrisa şəklinə salınır. Sonra isə alınmış kvadrat cədvəldəki ədədlərin adi qayda üzrə determinantı hesablanır.

Matrisanın determinantı sıfır bərabər olduqda, belə matrisa **sinqulyar matrisa** adlanır və o, tərs matrisaya malik olmur.

Hasildə iştirak edən matrisalar qeyri-sinqulyar olarsa, yəni onların hər biri tərs matrisaya malikdirsə, $|LFD\dots|$ hasil matrisaya uyğun tərs matrisa

$$|(LFD\dots)^{-1}| = \dots|D|^{-1}|F|^{-1}|L|^{-1} \quad (22.19)$$

kimi tapılır. Doğrudan da (22.19)-u sağdan ardıcıl olaraq əvvəlcə L -ə, sonra F -ə, daha sonra D -yə və i.a. vurub, hər dəfə (22.16) münasibətlərini nəzərə alsaq,

$$|(LFD\dots)^{-1}| \cdot |LFD\dots| = 1 \quad (22.20)$$

alınır. Deməli, (22.16)-ya görə $|(LFD\dots)^{-1}|$ matrisası $|LFD\dots|$ -yə tərs matrisa olur.

$|L^+| = |L^{-1}|$ şərti ödənilən matrisalar unitar matrisa adlanır. (22.16)-dan L -

in unitarlıq şərti

$$|L^+|L| = |L|L^+ = I \quad (22.21)$$

olur.

Hasildə iştirak edən matrisalar unitardır, hasil matrisa da unitar olur. (22.10) və (22.16)-dan

$$(|LF|)^+ = |F^+||L^+| = |F^{-1}||L^{-1}| = (|LF|)^{-1}$$

olur, yəni $|LF|$ – hasili üçün unitarlıq şərti ödənilir.

Sadə matrisalarla yanaşı matrisaların funksiyası olan $f(L)$ kimi mürəkkəb matrisalara da təsadüf olunur.

Matrisaların toplanması və vurulması qaydaları məlum olduqda, belə matrisalarla işləmək, yəqin ki, çətin olmaz. Məsələn, $|e^L|$ kimi mürəkkəb matrisa

$$|e^L| = |I| + |L| + \frac{|L|^2}{2!} + \frac{|L|^3}{3!} + \dots$$

şəkilli matrisalar sırasına ekvivalentdir və matrisaların toplanma və vurulma qaydalarına əsasən, yəqin ki, bu sıranı həmişə hesablamaq olar.

$|e^L|$ şəkilli mürəkkəb matrisada $|L|$ ermit matrisa olarsa, ($|L|^+ = |L|$), $|e^{iL}|$ – də unitar matrisa olur. Bildiyimiz kimi, unitar matrisa üçün $|e^{iL}|^+ = |e^{iL}|^{-1}$ şərti ödənməlidir. Doğrudan da $|e^{iL}|^{-1} = |e^{-iL}|$ və $|L|^+ = |L|$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$|e^{iL}|^+ = \left\{ |I| + i|L| + \frac{i^2}{2}|L^2| + \frac{i^3}{3!}|L^3| + \dots \right\}^+ = 1 - i|L| - \frac{|L^2|}{2!} + \frac{i}{3!}|L^3| + \dots = |e^{-iL}|$$

olur, deməli $|e^{iL}|$ unitar matrisadır.

Biz yuxarıda gördük ki, hər hansı C sabit skalyar kəmiyyəti, diaqonal elementləri C ədədinə bərabər diaqonal matrisa şəklində göstərilə bilər. İndi də hal vektorunun matrisa təsvirini tapaq.

Bunun üçün (21.3) tənliyindən istifadə edək

$$b_k = \sum_n L_{kn} c_n. \quad (21.3)$$

Bu tənlikdə b_k və c_n dalğa funksiyaları və ya Hilbert fəzasında verilmiş

vektorlardır. Tənliyin sağ tərəfində matrisanın vektora hasili durur. Bu hasili açmaq qaydasını tapmaq üçün k və n -in 1,2 qiymətləri aldığıni fərz edək. Onda (21.3) tənliyindən

$$b_1 = L_{11}c_1 + L_{12}c_2 = \sum_{n=1,2} L_{1n}c_n, \quad (22.22)$$

$$b_2 = L_{21}c_1 + L_{22}c_2 = \sum_{n=1,2} L_{2n}c_n$$

kimi sistem alırıq. Buradan görünür ki, L_{11} , L_{12} və L_{21} , L_{22} elementləri $|L|$ -in birinci və ikinci sətir elementləridir. Matrisaların yuxarıda verilmiş vurulma qaydasına (sətrin sütuna hasili) görə c_1 və c_2 elementləri vektora uyğun matrisanın birinci sütun elementləri olmalıdır.

Sistemin hər iki tənliyində yalnız c_1 və c_2 elementləri iştirak etdiyindən, fərz etmək olar ki, bu matrisanın yalnız birinci sütun elementləri sıfırdan fərqli, qalan elementləri isə sıfıra bərabərdir. Doğrudan da, asanlıqla yoxlamaq olar ki, (22.22) sistemini matrisa təsvirində yazmaq olar:

$$\begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ b_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 & 0 \\ c_2 & 0 \end{pmatrix}$$

Yalnız bir sütun və ya bir sətir elementləri sıfırdan fərqli olan matrisalar bir sütunlu və ya bir sətirli matrisalar adlanır və aşağıdakı şəkildə yazılır:

$$b = \begin{vmatrix} b_1 & 0 & 0 \dots \\ b_2 & 0 & 0 \dots \\ b_3 & 0 & 0 \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix}; \quad c = \begin{vmatrix} c_1 & 0 & 0 \dots \\ c_2 & 0 & 0 \dots \\ c_3 & 0 & 0 \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix} \quad (22.23)$$

Buradan görünür ki, (21.6) tənliyi matrisa şəklində

$$|b| = |L| |c| \quad (22.24)$$

kimi yazılar. Burada $|b|$ və $|c|$ (22.23)-də, $|L|$ isə (21.8)-də verilmiş matrisalardır.

(22.24) oxşar (21.1) tənliyini də matrisa şəklində yazmaq olar:

$$|\varphi\rangle = |L\Psi\rangle. \quad (22.25)$$

Burada $|L\rangle$ yenə də (21.8)-də verilmiş matrisə, φ və Ψ isə

$$\varphi = |\varphi\rangle = \begin{vmatrix} \varphi_1 & 0 & 0 & \dots \\ \varphi_2 & 0 & 0 & \dots \\ \varphi_3 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix} \quad (22.26)$$

$$\Psi = \begin{vmatrix} \Psi_1 & 0 & 0 & \dots \\ \Psi_2 & 0 & 0 & \dots \\ \Psi_3 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix} \quad (22.27)$$

şəklindəki bir sütunlu matrisələrdir.

Aydındır ki, (22.23) və (22.26), (22.27) matrisələrə ermit qoşma matrisələr bir sətirli matrisələr olar: məsələn, Ψ -yə qoşma matrisə

$$\Psi^+ = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* & \Psi_3^* & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* & \Psi_3^* & \dots \end{vmatrix} \quad (22.28)$$

olar.

Deməli, Hilbert fəzasında verilmiş vektor bir sütunlu (bir sətirli) matrisə şəklində ifadə olunur və matrisənin vektora vurulması əməliyyatı matrisənin matrisəyə vurulması qaydası ilə icra edilir. Hər hansı matrisəni bir sütunlu (sətirli) matrisəyə vurduqda bir sütunlu (sətirli) matrisə alınır.

Aşağıdakı matrisələri fərqləndirirlər: $|L^*\rangle = |L\rangle$ olduqda matrisə **həqiqi matrisə**, $|L^*\rangle = |-L\rangle$ olduqda **mövhumli (xəyali) matrisə** $|\tilde{L}\rangle = |L\rangle$ olduqda

da – simmetrik matrisa, $|\tilde{L}| = |-L|$ olduqda – antisimmetrik matrisa, $|L^+| = |L|$ olduqda – ermit matrisa, $|L^+| = |-L|$ olduqda – antiermit matrisa və nəhayət $|L^+| = |L^{-1}|$ olduqda isə unitar matrisa adlanır.

§23. Unitar çevrilmələrin elementar nəzəriyyəsi

Kvant mexaniki sistemin halını xarakterizə edən Ψ dalğa funksiyası sonsuz ölçülü Hilbert fəzasında götürülmüş vektordur. Bu baxımdan, sistemin xassələrini xarakterizə edən hər bir L fiziki kəmiyyətinə $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$ kimi tam sistem təşkil edən bazis vektorlar (bazis funksiyalar) çoxluğu və ya həmin ölçülü koordinat oxları sistemi uyğundur. Deməli, bir tərəfdən Ψ_1, Ψ_2, \dots , funksiyalar çoxluğu Hilbert fəzasında koordinat oxları üzrə götürülmüş ort vektorlardır, digər tərəfdən isə \tilde{L} operatorunun L_1, L_2, \dots qiymətlərinə uyğun tam məxsusi funksiyalar sistemidir.

Hilbert fəzasında ixtiyari L və F fiziki kəmiyyətlərinə uyğun $\Psi(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots)$ və $\varphi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots)$ kimi iki vektorun verildiyini fərz edək. Başqa sözlə tutaq ki, \tilde{L} operatoruna uyğun Ψ_1, Ψ_2, \dots məxsusi funksiyalar və L_1, L_2, \dots məxsusi qiymətlər spektrləri (L -təsviri) və \tilde{F} operatoruna uyğun $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ məxsusi funksiyalar və F_1, F_2, \dots məxsusi qiymətlər spektrləri (F -təsviri) bizə məlumdur*. Bu təsvirlərin birindən digərinə qarşılıqlı keçid qaydası ilə tanış olaq.

§22-də koordinat təsvirindən ixtiyari başqa bir təsvirə (və əksinə) keçid qaydası ilə tanış olduq. Həmin qaydanı ixtiyari iki təsvir arasındakı keçid üçün ümumiləşdirək.

Hər bir operator öz təsvirində diaqonal matrisa ilə ifadə olunduğundan L -təsvirindən F -təsvirinə keçid $|L|$ matrisası diaqonal olan təsvirdən ($L_{mn} = L_n \delta_{mn}$) F matrisa diaqonal olan ($F_{\alpha\beta} = F_\beta \delta_{\alpha\beta}$) təsvirə keçmək deməkdir. Hilbert fəzasında bu keçid $\{\Psi_n\}$ bazis (ort) vektorların yaratdığı koordinat sistemindən $\{\varphi_\alpha\}$ bazis (ort) vektorların yaratdığı koordinat sistemine keçiddən başqa bir şey deyildir.

Keçid düsturlarını almaq üçün φ_α funksiyasını Ψ_n funksiyalarının kombinasiyası şəklində göstərək

* Bu §-da bütün düsturlar operatorların diskret spektrə malik olduğu hal üçün çıxarılır. Onlarda cəm aparılan indekslərə uyğun hallar üzrə inteqrala keçsək, kəsilməz spektrə uyğun düsturlar almış olarıq.

$$\varphi_\alpha(x) = \sum S_{n\alpha} \Psi_n; \quad \varphi_\beta^+ = \sum_k \Psi_k^+ S_{\beta k}^+. \quad (23.1)$$

$S_{n\alpha}$ əmsallarının ifadəsini tapmaq üçün (23.1)-i soldan Ψ_k^* funksiyasına vurub, x -in bütün dəyişmə oblastı üzrə inteqrallayaq:

$$\int \Psi_k^*(x) \varphi_\alpha(x) (dx) = \sum_k S_{k\alpha} \int \Psi_k^*(x) \Psi_k(x) (dx) = \sum_k S_{k\alpha} \delta_{k'k} = S_{k'\alpha}$$

və ya

$$S_{k\alpha} = \int \Psi_k^*(x) \varphi_\alpha(x) (dx) \quad (23.2)$$

olar.

$|S| = |S_{k\alpha}|$ matrisası L -təsvirindən F -təsvirinə keçidi təmin edir və o, **keçid matrisası** adlanır. Burada hər iki operatorun diskret spektrə malik olduğu qəbul edilmişdir, S matrisasının hər iki α və k indeksləri diskret dəyişir. Operatorlardan biri, məsələn, \tilde{L} diskret \tilde{F} isə kəsilməz spektrə malik olduqda $S_{k\alpha}$ üçün (23.2) ifadəsi saxlanılır. Lakin indekslərdən α kəsilməz, k isə diskret qiymətlər alır. Hər iki operator kəsilməz spektrə malik olduqda isə (23.1)-də cəm k üzrə inteqrala keçir:

$$\varphi_\alpha(x) = \int S_{k\alpha} \Psi_k(x) (dk) \quad (23.3)$$

və $|S|$ keçid matrisasının hər iki indeksi kəsilməz dəyişir.

S keçid matrisasının xassələri ilə tanış olaq.

Fərziyyəmizə görə $\{\Psi_n(x)\}$ və $\{\varphi_\alpha(x)\}$ çoxluqları tam sistem təşkil edir. Ona görə (23.1)-dən

$$\int \varphi_\alpha^+(x) \varphi_\beta(x) (dx) = \delta_{\alpha\beta} = \sum_{kk'} S_{\alpha k'} S_{k\beta} \int \Psi_k^*(x) \Psi_k(x) (dx),$$

burada $\int \Psi_k^* \Psi_k (dx) = \delta_{k'k}$ və

$$\delta_{\alpha\beta} = \sum_{kk'} S_{\alpha k'}^+ S_{k\beta} \delta_{k'k} = \sum_k S_{\alpha k'}^+ S_{k\beta} = (S^+ S)_{\alpha\beta} \quad (23.4)$$

olar. Burada sol tərəfdə I vahid matrisanın elementi, sağ tərəfdə isə iki S^+ və S matrisaların hasilindən alınan matrisanın uyğun elementi durur. İki

matrisanın bərabərliyi şərtindən (23.4)-ü matrisa şəkildə

$$S^+ S = I \quad (23.5)$$

kimi yazmaq olar.

Ψ_n funksiyalarını φ_α funksiyalarının kombinasiyası şəkildə göstərmiş olsaydıq, (23.5) əvəzinə

$$S S^+ = I \quad (23.6)$$

alardıq.

(23.5) və (23.6) münasibətləri göstərir ki, $|S|$ keçid matrisası unitar matrisadır: $|S^+| = |S^{-1}|$. Bir təsvirdən digər təsvirə unitar matrisalar vasitəsilə aparılan keçid və ya Hilbert fəzasında bir koordinat sistemindən digər koordinat sisteminə keçid **unitar çevrilmə** və ya **kanonik çevrilmə** adlanır.

Ψ və φ funksiyaları bir sütunlu matrisa olduğundan (§22-yə bax) (23.1) unitar çevrilməni

$$\varphi = S \Psi \quad (23.7)$$

φ -dən Ψ -yə əks keçidi isə

$$S^+ \varphi = S^+ S \Psi \text{ və ya } \Psi = S^+ \varphi \quad (23.8)$$

kimi yazmaq olar.

Eyni bir $\Psi(x)$ vektorunun müxtəlif koordinat sistemlərində (L və F -təsvirlərində) götürülmüş komponentləri arasındakı əlaqəni müəyyən etmək olar. Bu əlaqə

$$\Psi(x) = \sum_k C_k \Psi_k(x) = \sum_\alpha C_\alpha \varphi_\alpha(x) \quad (23.8')$$

bərabərliyindən tapıla bilər. Burada $\{S_k\}$ L -təsvirində, $\{S_\alpha\}$ isə F -təsvirində verilmiş vektordur. (23.1)-dən $\varphi_\alpha(x)$ -in ifadəsini burada yazsaq,

$$\sum_k C_k \Psi_k(x) = \sum_{\alpha,i} C_\alpha S_{i\alpha} \Psi_i(x)$$

alırıq. Bu bərabərliyin hər iki tərəfini soldan $\Psi_n^*(x)$ -ə vurub, x üzrə inteqrallasaq,

$$C_n = \sum_{\alpha} S_{n\alpha} C_{\alpha} \quad (23.9)$$

alınar (burada $S_{n\alpha}$ – (23.2) ilə verilmişdir). (23.9)-dan görünür ki, ixtiyari $\Psi(x)$ funksiyasının müxtəlif təsvirlərdəki ifadələrin birindən digərinə keçmək də unitar $|S|$ matrisası ilə aparılır, yəni (23.9) keçidi unitar (kanonik) çevrilmədir.

$C=|C_k|$ və $C'=|C_{\alpha}|$ matrisaları bir sütunlu matrisalar olduğundan (23.9) çevrilməsi

$$\begin{aligned} C &= S C' \\ C' &= S^+ C \end{aligned} \quad (23.10)$$

kimi yazıla bilər.

(23.1) və ya (23.7) unitar çevrilmə vasitəsilə hal vektoru bir təsvirdən digər təsvirə keçirildikdə, operatorlar da yeni təsvirə keçirilməlidir. Ona görə koordinat təsvirində verilmiş hər hansı $\check{D}(x)$ operatorunu L -təsvirdən F -təsvirə (və ya əksinə) keçirən unitar çevrilməni tapaq.

$\check{D}(x)$ operatorunu əvvəlcə L və F -təsvirlərində yazaq. (21.7)-yə uyğun olaraq, o, L -təsvirində

$$D_{nk} = \int \Psi_n^*(x) \check{D}(x) \Psi_k(x) (dx), \quad (23.11)$$

F -təsvirində isə

$$D_{\alpha\beta} = \int \varphi_{\alpha}^*(x) \check{D}(x) \varphi_{\beta}(x) (dx) \quad (23.12)$$

olar.

φ_{α}^* və φ_{β} -funksiyalarının (23.1) ilə verilmiş ifadələrini (23.12)-də yazıb, (21.11)-i nəzərə alsaq,

$$D_{\alpha\beta} = \sum_{k'k} S_{\alpha k'}^+ \int \Psi_{k'}^*(x) \check{D}(x) \Psi_k(x) d(x) S_{k\beta}$$

alarıq. (23.11)-ə əsasən bu bərabərlik

$$D_{\alpha\beta} = \sum_{k'k} S_{\alpha k'}^+ D_{k'k} S_{k\beta} \quad (23.13)$$

şəklini alar. $\tilde{D}(x)$ operatorunu L -təsvirində $D' = |D_{kk}|$, F -təsvirində $D'' = |D_{\alpha\beta}|$ kimi işarə etsək, (23.13) ifadəsi

$$D'' = S^+ D' S, \quad (23.14)$$

F -təsvirindən L -təsvirinə keçid isə

$$D' = S D'' S^+ \quad (23.15)$$

olar. Deməli, dalğa funksiyası (23.7) kanonik çevrilməsi vasitəsilə bir təsvirdən başqa təsvirə keçirsə, operatorlar da (23.14) və ya (23.15) qanunları ilə yeni təsvirə keçir.

(23.11)-in (23.14) ilə müqayisəsindən görünür ki, (23.11)-ə, $\tilde{D}(x)$ operatorunu x -təsvirindən L -təsvirinə keçirən unitar çevrilmə kimi baxmaq olar. Doğrudan da, $\tilde{D}(x)$ operatorunu (21.27)-yə uyğun olaraq, x -təsvirində yazaq:

$$D_{x'x} = D(x')\delta(x - x'). \quad (23.16)$$

(23.11)-də $\tilde{D}(x)$ operatorunu (23.16)-dan alınan

$$\tilde{D}(x) = \int D_{x'x}(dx') = \int \tilde{D}(x')\delta(x - x')(dx') \quad (23.17)$$

ifadəsi ilə əvəz etsək,

$$D_{nk} = \int \Psi_n^+(x') D_{x'x} \Psi_k(x)(dx)(dx') \quad (23.18)$$

olar. $\Psi_n^+(x') = S_{nx'}^+$, $\Psi_k(x) = S_{xk}$ qəbul edib, S matrisasının x və x' indekslərinin kəsilməz dəyişdiyini nəzərə alsaq, (23.18) bərabərliyini (23.14) şəklində yazmaq çətin olmaz. Beləliklə, dalğa funksiyaları $|S|$ unitar matrisanın matrisa elementləri olur.

Bütün yuxarıda dediklərimizdən çıxır ki, hər bir fiziki kəmiyyətə (23.14) unitar çevrilmə ilə biri digərinə keçən sonsuz sayda operator uyğun gəlir. Başqa sözlə, aralarındakı rabitə (23.14) və ya (23.15) münasibətləri ilə verilən bütün operatorlar eyni bir fiziki kəmiyyətə uyğundur.

Operatorların aşağıdakı xassələri unitar (kanonik) çevrilməyə görə invariant qalır.

1) Verilmiş operator bir təsvirdə ermitdirsə, bütün başqa təsvirlərdə də ermit olur. Fərz edək ki, $\check{D}(x)$ operatoru L -təsvirində ermitdir $D^+ = D'$. Onda (23.14) və (22.11)-dən

$$(D'')^+ = (S^+ D' S)^+ = S^+ D''^+ S = S^+ D' S = D'' \quad (23.19)$$

olur, yəni \check{D}'' operatoru da (F -təsvirində) ermitdir.

2) Unitar çevrilmədən sonra alınan $\check{L}', \check{F}', \check{C}', \dots$ operatorlar cəbri əvvəlki $\check{L}, \check{F}, \check{C}, \dots$ operatorlar cəbri üzərinə düşür. Operatorların toplanması və vurulması əməliyyatları çevrilmədən əvvəl

$$C = L + F, \quad D = LF \quad (23.20)$$

kimi yazılırsa, unitar çevrilmədən sonra da öz şəklini saxlayır. Doğrudan da bunları soldan S^+ , sağdan isə S -ə vuraq. Onda (23.14), (23.5) və (23.6) münasibətlərinə əsasən onları

$$S^+ C S = S^+ L S + S^+ F S; \quad S^+ D S = S^+ L F S = S^+ L S S^+ F S$$

və ya

$$C \Leftarrow L + F', \quad D \Leftarrow L F' \quad (23.20')$$

olar.

3) Operatorlar arasındakı kommutativlik münasibətləri unitar çevrilməyə görə invariantdır.

$$\check{L}\check{F} - \check{F}\check{L} = i\check{G} \quad (23.21)$$

olarsa, çevrilmədən sonra

$$S^+ \check{L}\check{F} S - S^+ \check{F}\check{L} S = i S^+ \check{G} S,$$

(23.5,6)-ya görə

$$S^+ \check{L} S S^+ \check{F} S - S^+ \check{F} S S^+ \check{L} S = i S^+ \check{G} S$$

və ya

$$L'F' - F'L' = iG' \quad (23.21')$$

alınar və i.a.

4) Operatorun məxsusi qiymətlər spektri kanonik çevrilməyə görə invariantdır.

$$\tilde{L}\Psi = L \cdot \Psi \quad (23.22)$$

bərabərliyini soldan S -ə vuraq:

$$S\tilde{L}\Psi = L \cdot S\Psi$$

və ya

$$S\tilde{L}S^+S\Psi = L \cdot S\Psi.$$

(23.1) və (23.14) -ə görə

$$\tilde{L}'\varphi = L \cdot \varphi$$

olur. Deməli, \tilde{L} və \tilde{L}' operatorları eyni L məxsusi qiymətlər spektrinə malik olur.

5) Unitar çevirmə vasitəsi ilə ixtiyari matrisanı diaqonal matrisaya çevirmək olar. Tutaq ki, unitar çevrilmədən sonra $|L'|$ matrisası diaqonal matrisadır. Belə unitar $|S|$ matrisanı tapaq. Bunun üçün $L' = S^+LS$ ifadəsini

$$SL' = LS,$$

yaxud

$$\sum_{\alpha} S_{k\alpha} L'_{\alpha\beta} = \sum_n L_{kn} S_{n\beta}$$

şəklində yazaq. L' -in diaqonal olduğunu nəzərə alsaq, $L'_{\alpha\beta} = L'_{\beta}\delta_{\alpha\beta}$

$$\sum_{\alpha} S_{k\alpha} L'_{\alpha}\delta_{\alpha\beta} = \sum_n L_{kn} S_{n\beta}$$

və ya

$$\sum_n L_{kn} S_{n\beta} = L'_{\beta} S_{k\beta} \quad (23.23)$$

alınar. Burada β fiksə edilmiş indeks olduğundan $S_{k\beta}$ əvəzində S_k götürə bilərik. Onda (23.23) tənliyi

$$\sum_n L_{kn} S_n = L \cdot S_k \quad (23.24)$$

Bu tənlik (21.3) tənliyini xatırladır. Onların bir-birinin üzərinə düşməsi üçün $S_n = C_n$, $S_k = C_k$ götürmək lazımdır.

Beləliklə, ixtiyari $|L|$ matrisanı diaqonal matrisaya çevirən $|S|$ unitar matrisa bir sətir və ya bir sütun matrisa şəklinə malik hal vektoru (dalğa funksiyası) üzərinə düşür.

6) Matrisanın diaqonal elementləri cəmi (bu cəm şpur adlanır və Sp kimi işarə olunur) unitar çevrilməyə görə invariantdır. Bunu isbat etmək üçün $L' = S^+ L S$ bərabərliyinin hər iki tərəfindən şpur götürək. Onda (22.4) və (23.4) əsasən

$$\begin{aligned} SpL' &= \sum_{\alpha} L'_{\alpha\alpha} = \sum_{\alpha} (S^+ L S)_{\alpha\alpha} = \sum_{\alpha k} S_{\alpha k}^+ L_{k\alpha} S_{k\alpha} = \\ &= \sum_{lk} L_{lk} \sum_{\alpha} S_{k\alpha} S_{\alpha l}^+ = \sum_{l,k} L_{lk} \delta_{kl} = \sum_k L_{kk} = SpL \end{aligned} \quad (22.25)$$

olar, yəni unitar çevrilmə matrisasının şpurunu dəyişmir.

§ 24. Matrisa şəklində verilmiş operatorların məxsusi qiymətləri, məxsusi funksiyaları və fiziki kəmiyyətin orta qiyməti

Tutaq ki, Ψ dalğa funksiyası (hal vektoru) koordinat təsvirində verilmiş $\tilde{L}(x)$ operatorunun məxsusi funksiyasıdır, yəni, o

$$\tilde{L} \Psi = L \cdot \Psi \quad (24.1)$$

tənliyini ödəyir. İndi də (24.1) tənliyini hər hansı \tilde{F} operatoru təsvirində yazaq. Fərz edək ki, \tilde{F} operatoru diskret spektrə malikdir və $\{\Psi_k(x)\}$ çoxluğu onun məxsusi funksiyalar spektridir. Bu çoxluq tam sistem təşkil etdiyindən

$$\Psi(x, t) = \sum_k C_k(t) \Psi_k(x, t) \quad (24.2)$$

yazmaq olar. Bildiyimiz kimi (§20-yə bax) C_k - L -operatorunun \tilde{F} -təsvirindəki dalğa funksiyasıdır.

Ψ -nin (24.2) ifadəsini (24.1)-də yazsaq,

$$\sum C_k \tilde{L}(x) \Psi_k(x, t) = L \cdot \sum C_k \Psi_k(x, t)$$

alınar. Axırıncı bərabərliyi sol tərəfdən $\Psi_k'(x, t)$ -yə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallayaq. Onda $\int \Psi_k'(x) \Psi_k(x) dx = \delta_{kk}$ və $L_{kk} = \int \Psi_k' \tilde{L}(x) \Psi_k(x) dx$ olduğunu nəzərə alsaq, (24.1) tənliyi

$$\sum_k L_{kk} C_k = L C_k,$$

və ya

$$\sum_k (L_{kk} - L \delta_{kk}) C_k = 0 \quad (24.3)$$

şəklinə düşər. Burada $|L_{kk}|$ matrisası F təsvirində verilmiş \tilde{L} operatorudur.

(24.3) tənliyi C_k dəyişənlərinə görə bircins xətti cəbri tənliklər sistemi-dir (k -ə 1, 2, 3 və i.a. qiymətləri verməklə bu sistemi asanlıqla aşkar şəkildə yazmaq olar). Bu sistemin sıfırdan fərqli həllə malik olması üçün C_k -lərin əmsallarından düzəlmiş determinant sıfır bərabər olmalıdır:

$$\|L_{kk} - L \delta_{kk}\| = \begin{vmatrix} L_{11} - L_1 & L_{12} & L_{13} \dots \\ L_{21} & L_{22} - L & L_{23} \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ L_{i1} & L_{i2} \dots & L_{ii} - L \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0 \quad (24.4)$$

(24.4) tənliyi L -dəyişəninə görə sonsuz tərtibli tənlikdir. Onu həll etsək, L üçün sonsuz sayda

$$L_1, L_2, \dots, L_p, \dots$$

köklər alırıq. $\{L_j\}$ çoxluğu L fiziki kəmiyyətinin məxsusi qiymətləri, yəni onun spektri olur. Asanlıqla isbat etmək olar ki, \bar{L} operatoru ermit olduqda belə tənliyin kökləri həqiqi olur. Lakin onların bəziləri bir-birinin üzərinə düşə bilər. Belə halda sistemin halı cırlaşmış olur.

Bu köklərdən hər hansı birini, məsələn $L=L_j$ -ni (24.3)-də yazandan sonra alınmış

$$\sum_k L_{jk} C_k = L_j C_j \quad (24.5)$$

sistemi C_k dəyişənlərinə görə həll etsək, L_j məxsusi qiymətinə uyğun $C_1=C_1(L_j)$, $C_2=C_2(L_j)$,... məxsusi funksiyalar çoxluğunu alırıq. Bu çoxluq bir sütunlu matrisa kimi yazılır:

$$C_{kj} = \begin{vmatrix} C_1(L_j) \\ C_2(L_j) \\ \dots\dots\dots \\ C_i(L_j) \\ \dots\dots\dots \end{vmatrix} \quad (24.6)$$

Bildiyimiz kimi C_{kj} funksiyasını istənilən başqa təsvirdə də yazmaq olar. Məsələn, baxılan təsvirdən koordinat təsvirinə keçid (24.2)-yə əsasən,

$$\Psi_j(x,t) = \sum_k C_{kj} \Psi_k(x,t) \quad (24.7)$$

çevrilməsi ilə əldə edilir. $\Psi_j(x,t)$ -koordinat təsvirində $L=L_j$ halına uyğun funksiyadır.

(24.5)-dən görünür ki, (24.4) tənliyinin kökləri diaqonal matrisa təşkil edir. Doğrudan da, (24.5) tənliyinin eynilik kimi ödənilməsi üçün

$$L_{jk} = L_j \delta_{jk} \text{ və ya } |L_{jk}| = \begin{vmatrix} L_1 & 0 & 0 & \dots\dots\dots \\ 0 & L_2 & 0 & \dots\dots\dots \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ 0 & 0 & \dots L & 0 & \dots \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \end{vmatrix},$$

yəni $|L_{jk}|$ diaqonal matrisa olmalıdır. Deməli, matrisa şəklində verilmiş operatorun məxsusi qiymətlərini tapmaq üçün onu diaqonal matrisa şəklinə salmaq, yəni diaqonallaşdırmaq lazımdır. Yəqin ki, bu əməliyyatı unitar çevirmə vasitəsi ilə aparmaq olar. Operatorun məxsusi qiymətlər spektri unitar çevirməyə görə invariant olduğundan (§23 bax), elə unitar çevirmə seçmək olar ki, ixtiyari təsvirdə verilmiş matrisa yeni təsvirdə diaqonal olsun. Belə unitar çevirməni biz 23-cü §-da tapmışdıq, ona görə də biz bu məsələ üzərində dayanmayacağıq.

Bir mühüm teorem isbat edək. İxtiyari təsvirdə verilmiş iki \tilde{L} və \tilde{F} operatorları kommutasiya edirsə ($\tilde{L}\tilde{F} - \tilde{F}\tilde{L} = 0$), onlara uyğun matrisaları eyni bir kanonik (unitar) çevirmə vasitəsi ilə diaqonal şəkllə salmaq olar.

Fərz edək ki, $|L|$ matrisa unitar çevrilmədən sonra $|L'|$ diaqonal matrisaya gətirilmişdir:

$$|L'| = S^+LS = \begin{vmatrix} L_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & L_2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & L_i & 0 \end{vmatrix}$$

F matrisası üzərində də həmin əməliyyatı aparaq:

$$|F'| = S^+FS.$$

F' diaqonal olduğunu əvvəlcədən söyləmək mümkün deyildir. Lakin operatorlar cəbri unitar çevirməyə görə invariant olduğundan (§23 bax) $\tilde{L}'\tilde{F}' - \tilde{F}'\tilde{L}' = 0$ olmalıdır.

Burada L' matrisasının $L'_{ik} = L_i\delta_{ik}$ diaqonallıq şərtini nəzərə alsaq,

$$(L'F' - F'L')_{ik} = \sum_j (L'_{ij}F'_{jk} - F'_{ij}L'_{jk}) = (L_i - L_k)F'_{ik} = 0$$

olur. $i \neq k$ olduqda $L_i \neq L_k$ olduğundan $F'_{ik} = 0$, $i = k$ olduqda isə $F'_{ii} \neq 0$ olmalıdır, yəni $|F'|$ matrisası da diaqonal matrisadır.

L_k məxsusi qiymətlər içərisində bir neçəsi bir-birinin üzərinə düşə bilər. Onda L -in bu qiymətinə bir neçə dalğa funksiyası uyğun gəlir. Belə qrup dalğa funksiyaları üçün qeyri-diaqonal F'_{ik} matrisa elementləri ümumiyyətlə

lə sifra bərabər olmur. Ancaq belə qrup dalğa funksiyalarının xətti kombinasiyası L -in həmin qiymətinə uyğun məxsusi funksiya olduğundan, bu kombinasiyanı elə seçmək olar ki, qeyri-diaqonal F'_{ik} matrisa elementləri sifra bərabər olsun. Beləliklə, bu halda da $|F'|$ matrisası diaqonallaşdırıla bilər.

Yuxarıda deyilənlər operatorun kəsilməz spektrə malik olduğu hala, başqa sözlə, operatorun kəsilməz matrisalarla ifadə olunan təsvirlər halına da ümumiləşdirilə bilər. Bu halda \tilde{F} operatorun məxsusi funksiyaları $\Psi_F(x, t)$ kimi işarə olunduğundan (24.2) ifadəsi

$$\Psi(x, t) = \int C(F)\Psi_F(x, t)dF, \quad (24.2')$$

(24.3) tənliyi isə

$$\int L_{FF}C(F)(dF) = LC(F') \quad (24.3')$$

kimi inteqral tənlik şəklində yazılar, burada $L_{FF} = \int \Psi_F^* \tilde{L} \Psi_F(dx)$ -dir. Beləliklə, \tilde{L} operatorunun məxsusi qiymətlərinin və məxsusi funksiyalarının tapılması məsələsi (24.1) diferensial tənliyinə ekvivalent olan (24.3') – inteqral tənliyinin həllinə gətirilir.

Nəhayət fiziki kəmiyyətin orta qiymətinin hesablanması üzərində dayanacaq. Koordinat təsvirində \bar{L} -in orta qiyməti

$$\bar{L} = \int \Psi^x(x, t)\tilde{L}(x)\Psi(x, t)(dx)$$

kimi təyin olunur. Burada $\Psi^x(x, t)$ və $\Psi(x, t)$ funksiyalarını onların (24.2) ifadələri ilə əvəz etsək, F -təsvirində L -in orta qiyməti

$$\bar{L} = \sum_{k'k} C_{k'}^x L_{k'k} C_k$$

ifadəsi ilə hesablanır.

§ 25. Şredinger, Heyzenberq və qarşılıqlı təsir (Dirak) təsvirləri

Hal vektorunu və operatorları bir təsvirdən digər təsvirə keçirmək üçün §24-də istifadə olunan unitar (kanonik) çevrilmələr hal vektorunun və ope-

ratorların şəklini dəyişirsə də sistemin halının dəyişməsinə səbəb olmur. Bu çevrilmələr sistemin baxılan andakı eyni bir halını müxtəlif təsvirlərdə ifadə edir. Sistemin halının zamana görə dəyişməsi isə Şredinger tənliyi ilə verilir. Hər hansı $t=0$ anında sistemin $\Psi(x,0)$ hal vektoru məlum olduqda, Şredinger tənliyini həll edərək sistemi istənilən t anında təsvir edən $\Psi(x,t)$ hal vektorunu tapmaq olur.

Sistemin halının zamana görə dəyişməsini unitar çevrilmə vasitəsi ilə də təsvir etmək olar. Bu, bir neçə yolla edilir. Onların üzərində dayanacaq.

a) Şredinger təsviri. Şredinger təsviri elə təsvirə deyilir ki, sistemin halının zamana görə dəyişməsi hal vektorunun zamana görə dəyişməsi ilə təyin olunur, fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorlar isə aşkar şəkildə zamandan asılı olmur.

Dalğa funksiyası Hilbert fəzasında verilmiş vektor olduğundan, bu təsvir, Hilbert fəzasında tərənəmz qalan bazis vektorlarına görə hal vektorunun dönməsi (fırlanması) kimi təsəvvür olunur.

Bu təsvirdə hal vektorunun zamandan asılılığı, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, Şredinger tənliyi ilə təyin olunur. $\Psi(x,t)$ -nin zamandan bu asılılığını unitar çevrilmə ilə verək.

Hal vektorunu başlanğıc $t=t_0$ anında verilmiş $\Psi(x,t_0)$ qiymətindən hər hansı t anındakı $\Psi(x,t)$ qiymətinə keçirən unitar çevrilməni $S(t,t_0)$ ilə işarə etsək, bu keçidi

$$\Psi(x,t) = S(t,t_0)\Psi(x,t_0) \quad (25.1)$$

kimi yazmaq olar. Buradan görünür ki, (25.1) bərabərliyinin t_0 anında ödənilməsi üçün

$$S(t_0,t_0)=1 \quad (25.2)$$

olmalıdır.

Dalğa funksiyaları (hal vektorları) həmişə (t -nin istənilən qiymətində) normalanma şərtini ödədiyi üçün $S(t,t_0)$ operatoru unitar olmalıdır.

Doğrudan da (25.1)-dən

$$\begin{aligned} \int \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)(dx) &= \int (S^*\Psi^+(x,t_0))^+ S\Psi(x,t_0)(dx) = \\ &= \int \Psi^+(x,t_0)S^+ S\Psi(x,t_0)(dx) = \int \Psi^+(x,t_0)\Psi(x,t_0)(dx) = 1 \end{aligned}$$

bərabərliyi

$$S^+(t, t_0)S(t, t_0) = 1 \quad (25.3)$$

unitar şərti daxilində ödənilir.

$S(t, t_0)$ unitar operatorun aşkar şəklini tapaq. Ψ -nin (25.1) ifadəsini Şredinger tənliyində yazsaq,

$$i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} \Psi(x, t_0) = \tilde{H}S(t, t_0)\Psi(x, t_0)$$

yaxud

$$\left(i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} - HS \right) \Psi(x, t_0) = 0$$

alınar. Bu tənliyə uyğun operator tənlik

$$i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = \tilde{H}S \quad (25.4)$$

olar. \tilde{H} aşkar şəkildə zamandan asılı deyilsə, (25.4) tənliyinin həlli, formal olaraq, (25.2)-yə görə

$$S(t, t_0) = S(t_0, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_0)} \quad (25.5)$$

şəklində yazıla bilər.

Beləliklə, sistemin halının zamana görə dəyişməsi (25.1) və (25.5)-dən

$$\Psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_0)} \Psi(x, t_0) \quad (25.6)$$

funksiyası ilə təyin olunar. Burada $e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_0)}$ operatorunun $\Psi(x, t_0)$ təsiri, ona uyğun sonsuz sıranın $\Psi(x, t_0)$ təsiri kimi təyin olunur.

Şredinger təsvirində operatorlar aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından $\frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} = 0$ və (10.4') hərəkət tənliyi

$$\ddot{L} = \frac{d\dot{L}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\ddot{H}\ddot{L}] \quad (25.7)$$

şəklində yazılır.

Qeyd edək ki, burada «təsvir» sözünü, ona §24-də verilən mənadan daha geniş mənada başa düşmək lazımdır. Burada təsvir dedikdə halın zamana görə dəyişməsinin təsvir üsulu (qaydası) başa düşülür. Yuxarıda isə sistemin eyni bir halının müxtəlif yollarla təsvir olunması nəzərdə tutulurdu. Ona görə də unitar çevrilmələr vasitəsi ilə biri digərindən alınan koordinat, impuls, enerji və i.a. təsvirləri əslində Şredinger və ya Heyzenberq koordinat təsviri, Şredinger və ya Heyzenberq impuls təsviri və i.a. kimi başa düşmək lazımdır.

Misal üçün (25.7) tənliyini Şredinger enerji təsvirində, yəni \ddot{H} matrisasının diaqonal olduğu təsvirdə yazaq:

$$(\dot{L})_{mn} = \frac{i}{\hbar} [HL]_{mn} = \frac{i}{\hbar} \sum_k (H_{mk} L_{kn} - L_{mk} H_{kn}).$$

$H_{mn} = E_n \delta_{mn}$ diaqonallıq şərtini nəzərə alsaq,

$$(\dot{L})_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n) L_{mn} = i\omega_{mn} L_{mn} \quad (25.8)$$

alarq, burada

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar} (E_m - E_n).$$

(25.8) tənliyində $(\dot{L})_{mn}$ və L_{mn} matrisalarının heç biri aşkar şəkildə zamandan asılı deyildir.

b) Heyzenberq təsviri. Bu təsvirdə sistemin halının zamana görə dəyişməsi hal vektorundan operatorlara keçirilir. Hal vektorunun özü isə zamandan asılı olmur. Bu təsvir Hilbert fəzasında tərpənməz qalan hal vektoruna nəzərən bazis vektorlarının dönməsi kimi təsəvvür olunur.

Heyzenberq təsvirində hal vektorunu $\varphi(x)$, Şredinger təsvirində isə $\Psi(x, t)$ kimi işarə etsək, (25.6) unitar çevrilməyə Heyzenberq təsvirindən Şredinger təsvirinə keçid kimi baxmaq olar

$$\Psi(x, t) = S\Psi(x, t_0) = S\varphi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\ddot{H}(t-t_0)} \varphi(x). \quad (25.6')$$

Əksinə, Şredinger təsvirindən Heyzenberq təsvirinə keçidi almaq üçün (25.6')-i S^+ -ya vurub, S üçün (25.3) unitarlıq şərtini nəzərə almaq lazımdır. Onda

$$\varphi(x) = S^{-1}\Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{H}(t-t_0)}\Psi(x, t) \quad (25.9)$$

alınar.

Hal vektorları bir təsvirdən digərinə keçirsə, operatorlar da köhnə təsvirdən yeni təsvirə keçirilməlidir. Fiziki kəmiyyətlərin orta qiymətinin müxtəlif təsvirlərdə invariant qalması şərtindən və ya §23-də verilmiş ümumi qaydaya əsasən, ixtiyari \tilde{L} operatoru üçün bu keçid

$$\tilde{L}^h(t) = S^+\tilde{L}^u S = e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{H}(t-t_0)}\tilde{L}^u e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{H}(t-t_0)} \quad (25.10)$$

şəklində olar, burada „ h » və „ u » işarələri operatorun uyğun olaraq Heyzenberq və Şredinger təsvirində verildiyini göstərir. Şredinger təsvirində operator zamandan asılı deyilsə, Heyzenberq təsvirində o, zamandan asılı olur və bu asılılıq (25.10) qanunu ilə verilir. $t=t_0$ olduqda $S(t_0, t_0) = S^{-1}(t_0, t_0) = 1$ olduğundan başlanğıc anda hal vektorları və operatorlar hər iki təsvirdə bir-birinin üzərinə düşür.

(25.10)-dan çıxır ki, sistemin Hamilton operatoru da hər iki təsvirdə eynidir. Doğrudan da, (25.10)-da $\tilde{L} = \tilde{H}$ götürsək, \tilde{H} ilə $e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{H}(t-t_0)}$ operatorları həmişə kommutasiya etdiyindən $\tilde{H}^h = \tilde{H}^u$ olur.

Heyzenberq təsvirində hərəkət tənliyini almaq üçün (25.10)-dan t -yə

görə törəmə götürək: $\frac{\partial \tilde{L}^u}{\partial t} = 0$ olduğundan

$$\frac{\partial \tilde{L}^h}{\partial t} = \frac{\partial S^+}{\partial t} \tilde{L}^u S + S^+ \tilde{L}^u \frac{\partial S}{\partial t}$$

olar. (25.5)-dən alınan $\frac{\partial S^+}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\tilde{H}S^+$ və $\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\tilde{H}S$ ifadələri və (25.10)-nu nəzərə alsaq,

$$\frac{\partial \tilde{L}^h}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\tilde{H} \tilde{L}^h - \tilde{L}^h \tilde{H}) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{H} \tilde{L}^h] \quad (25.11)$$

hərəkət tənliyini alırıq. (25.11) tənliyinin sol tərəfində operatorun bilavasitə zamana görə törəməsi durur. Ona görə də $\frac{\partial \tilde{L}}{\partial t}$ törəməsi burada L fiziki

kəmiyyətinə uyğun \tilde{L} operatorunun bilavasitə zamana görə törəməsinə ifadə edir. Halbuki, Şredinger təsvirində buna uyğun (25.7) tənliyi, müxtəlif fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorlar arasındakı əlaqəni ifadə edir.

(25.10) və (25.11) ifadələrindən çıxır ki, Hamilton operatoru ilə kommutasiya edən operatorlar zamana görə dəyişmir və onların Heyzenberq təsvirindəki ifadəsi Şredinger təsvirindəki ifadəsi üzərinə düşür. Yəqin ki, onlar hərəkət inteqrallarına uyğun operatorlar olar.

c) Qarşılıqlı təsir təsviri. Bu təsviri kvant mexanikasına ilk dəfə Dirak daxil etmişdir. Xarici sahələrlə və ya başqa sistemlərlə qarşılıqlı təsirdə olan kvant mexaniki sistemin \tilde{H} Hamilton operatorunu sərbəst (qarşılıqlı təsirdə olmayan) sistemlərin \tilde{H}_0 Hamilton operatoru ilə \tilde{V} qarşılıqlı təsir operatorunun

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{V} \quad (25.12)$$

cəmi şəklində yazmaq mümkün olduğu hallarda, sistemin halının zamana görə dəyişməsinə qarşılıqlı təsir təsvirində vermək daha əlverişli olur.

Bu zaman Şredinger təsvirində verilmiş $\Psi(x, t)$ hal vektorundan qarşılıqlı təsir təsvirində verilmiş $\Phi(x, t)$ hal vektoruna keçid

$$\Phi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} \Psi(x, t) \quad (25.13)$$

kanonik çevrilməsi ilə yerinə yetirilir.

Yuxarıdakılara uyğun olaraq operator üçün kanonik keçid

$$\tilde{L}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} \tilde{L}^w e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \quad (25.14)$$

şəklində yazılır.

(25.13) və (25.14)-dən görünür ki, $t=t_0$ başlanğıc anda bu təsvirlərdə hal vektorları və operatorlar bir-birinə bərabər olur: $\Phi(x, t_0) = \Psi(x, t_0)$,

$\tilde{L}(t_0) = \tilde{L}^w$. Eynilə bunun kimi (25.14)-dən $\tilde{H}_0 = H_0^w$ alınır.

(25.9) və (25.10) düsturlarından fərqli olaraq (25.13) və (25.14) çevrilmələrinə sistemin tam Hamilton operatoru yox, sərbəst sistemin \tilde{H}_0 Hamilton operatoru daxil olur.

Bu təsvirdə sistem zamandan asılı $\Phi(t)$ hal vektoru ilə xarakterizə olunur və fiziki kəmiyyətlərə zamandan asılı $\tilde{L}(t)$ operatorları qarşı qoyulur. Başqa sözlə, qarşılıqlı təsir təsviri, Hilbert fəzasında hal vektorunun və bazis vektorlarının dönməsi kimi təsəvvür olunur. Qarşılıqlı təsir təsviri müəyyən mənada Şredinger və Heyzenberq təsvirləri arasında yerləşən aralıq təsvirdir. Şredinger və Heyzenberq təsvirləri onun iki xüsusi halı kimi alınır.

İndi də $\Phi(t)$ hal vektorunun və $\tilde{L}(t)$ operatorunun zamana görə dəyişmə qanunlarını tapaq. (25.13)-dən

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\hbar \tilde{H}_0 e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \Psi(x,t) + e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

burada $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \tilde{H} \Psi = (H_0 + V) \Psi$ olduğunu və (25.14) nəzərə alsaq;

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} V^w e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} \Phi(t)$$

və ya

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = V(t) \Phi(t) \quad (25.15)$$

alınar. Burada $V(t)$ (25.14)-ə uyğun olaraq

$$V(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \tilde{V}^w e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} \quad (25.16)$$

qarşılıqlı təsir təsvirində verilmiş qarşılıqlı təsir operatorudur.

Beləliklə, $\Phi(t)$ hal vektoru Şredinger tənliyini ödəyir. Lakin tənliyə \tilde{H} tam Hamilton operatoru yox, yalnız qarşılıqlı təsir operatoru $\tilde{V}(t)$ daxil olur.

İndi də hərəkət tənliyini tapaq. Bunun üçün $\frac{\partial \tilde{L}^w}{\partial t} = 0$ şərti daxilində (25.14) ifadəsindən zamana görə törəmə alaıq:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} H_o e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_o(t-t_o)} \tilde{L}^w S - \frac{i}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_o(t-t_o)} \tilde{L}^w \tilde{H}_o e^{-\frac{i}{\hbar} H_o(t-t_o)} = \\ &= \frac{i}{\hbar} (\tilde{H}_o S L^w S^+ - S L^w S^+ \tilde{H}_o) \text{ və ya } \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\tilde{H}_o \tilde{L}] \end{aligned} \quad (25.17)$$

olur. Buradan görünür ki, qarşılıqlı təsir təsvirində operatorun zamana görə dəyişməsi Heyzenberq təsvirində olduğu kimidir. Lakin burada tənliyə tam Hamilton operatoru əvəzində qarşılıqlı təsirdə olmayan sistemin \tilde{H}_o operatoru daxil olur. Beləliklə, qarşılıqlı təsir təsvirində hal vektorunun və operatorun zamana görə dəyişmə qanunlarının birinə tam Hamilton operatorunun bir hissəsi, digərinə isə ikinci hissəsi daxil olur.

Biz yuxarıda Şredinger təsvirindən qarşılıqlı təsir təsvirinə keçidin üzərində dayandıq. İndi də Heyzenberq təsvirindən bilavasitə qarşılıqlı təsir təsvirinə keçək. (25.13)-də $\Psi(x,t)$ -ni onun (25.6) və ya (25.6') ifadəsi ilə əvəz etsək,

$$\Phi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_o(t-t_o)} e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_o)} \Psi(x,t_o) = e^{\frac{i}{\hbar} H_o(t-t_o)} e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_o)} \varphi(x)$$

alarıq, bu keçidi

$$\Phi(t) = S(t,t_o) \varphi(x,t_o) \quad (25.18)$$

kimi yazmış olsaq, Heyzenberq-qarşılıqlı təsir təsvirləri arasındakı keçidi təmin edən unitar operator

$$S(t,t_o) = e^{\frac{i}{\hbar} H_o(t-t_o)} e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_o)}, \quad S(t_o,t_o) = 1 \quad (25.19)$$

olur. (25.18)-də $\varphi(x)$ zamana görə sabit qaldığından kvant-mexaniki sistemin halının zamana görə dəyişməsi (25.19) operatoru ilə tam təyin olunur.

(25.18) ifadəsində $t=t_o$ götürsək, qarşılıqlı təsirdə verilmiş $\Phi(t)$ hal vektoru, Heyzenberq təsvirindəki $\Psi(0)$ hal vektoru üzərinə düşür. Belə isə (25.18) kanonik çevrilmə yalnız qarşılıqlı təsir təsvirində yazıla bilər:

$$\Phi(t) = S(t, t_0)\Phi(t_0). \quad (25.18')$$

Bu bərabərliyə qarşılıqlı təsir təsvirində t_0 anında verilmiş $\Phi(t_0)$ hal vektorunu həmin təsvirdə t anındakı $\Phi(t)$ vektoruna keçirən kanonik çevrilmə kimi baxmaq olar.

(25.19) ifadəsindən $S(t, t_0)$ zamana görə dəyişmə qanununu tapaq:

$$i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = -H_0 S + e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} (\tilde{H}_0 + \tilde{V}^w) e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_0)}.$$

\tilde{H}_0 ilə $e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)}$ operatorları kommutasiya etdiyindən

$$i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} V^w e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_0(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t-t_0)}$$

və ya (25.16)-ya əsasən

$$i\hbar \frac{\partial S}{\partial t} = VS \quad (25.20)$$

alınır. Deməli, $S(t, t_0)$ unitar operatoru ilə $\Phi(t)$ hal vektorunun ödədiyi tənliklər (bax: 25.15), yəni onların zamana görə dəyişmə qanunları eyni olur. Bu, (25.18)-dən də bilavasitə görünür, $\varphi(x, t_0)$ zamana görə sabit qaldığından $\Phi(t)$ və $S(t, t_0)$ kəmiyyətləri t -yə görə eyni qanunla dəyişməlidir.

Kvant mexaniki sistemin halının zamana görə dəyişməsinin $(t, t_0) \rightarrow (-\infty, +\infty)$ intervalında baş verdiyini fərz etsək, (25.18') bərabərliyi

$$\Phi(\infty) = S(\infty, -\infty)\Phi(-\infty) \quad (25.21)$$

şəklində yazılar. Burada $S(\infty, -\infty)$ operatoru sistemin $t = -\infty$ verilmiş halını $t = +\infty$ -dakı halına keçirir. Belə operator kvant elektrodinamikada S matrisa adlanır.

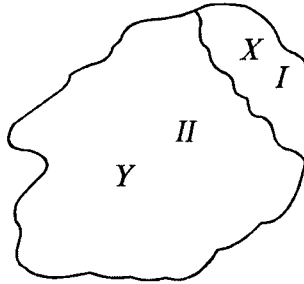
§26. Sıxlıq matrisası, sistemin halının sıxlıq matrisası ilə təsviri

Biz indiyə qədər kvant mexaniki sistemi $\Psi(x, t)$ dalğa funksiyası ilə təsvir edirdik. Fərz edək ki, sistem hər baxılan anda müəyyən haldadır və onun hərəkəti tam və dəqiq verilir. Yuxarıda gördüyümüz kimi, belə təsvirdən o zaman istifadə etmək olar ki, $\Psi(x, t)$ hər hansı operatorun məxsusi funksiyası olsun, yəni sistem müəyyən dalğa funksiyasına malik olsun. Bu

halda sistem tam təsvir olunur, yəni onun ixtiyari halını təyin edən və eyni zamanda ölçülə bilən fiziki kəmiyyətlərin hamısı hesablanabilir.

Sistemin elə hallarına da təsadüf olunur ki, onlara müəyyən dalğa funksiyası qarşı qoymaq və baxılan anda sistemin hər hansı müəyyən halda olduğuna hökm vermək mümkün deyildir. Daha aydın desək, ola bilsin ki, baxılan anda sistemin hansı halda olduğu məlum olmasın, yalnız onun ala biləcəyi hallar ardıcılığının hər birində ayrılıqda olma ehtimalı verilsin. Bu zaman sistem tam təsvir oluna bilmir, çünki halın təyin edilməsi üçün eyni zamanda ölçülə bilən asılı olmayan fiziki kəmiyyətlərin sayı, tam təsvirdəki maksimal saydan az olur. Sistemin belə halları, aşağıda görəcəyimiz kimi, **sıxlıq matrisası** adlanan matrisa ilə təsvir olunur. Kvant mexanikasında sistemin dalğa funksiyası ilə təsvir olunan hallarına **təmiz hallar**, sıxlıq matrisası ilə təsvir olunan hallarına isə **qarışıq hallar** deyilir.

Müəyyən halda olan qapalı sistem götürək və onun hər hansı kiçik hissəsinə tədqiq olunan sistem kimi baxaq (şəkil 5). Adətən I hissənin (tədqiq olunan sistemin) ölçüləri II hissənin ölçülərinə nisbətən olduqca kiçik götürülür. Onda I hissənin halının istənilən dəyişmələri II hissənin temperaturunun dəyişməsinə səbəb olmur (statistik fizikada belə sistemlərə termostatda olan sistemlər deyilir).



Şəkil 5

I hissənin koordinatlar çoxluğunu X , II hissənin koordinatlar çoxluğunu Y ilə işarə etsək, qapalı sistemin dalğa funksiyasını $\Psi(X, Y, t)$ kimi yazabilirik. Qapalı sistemin hissələri həmişə qarşılıqlı təsirdə olduğundan, yəni istilik enerjisi mübadiləsində və ya biri digəri üzərində iş görə bildiyindən $\Psi(X, Y, t)$ funksiyasını yalnız X -dən və Y -dən asılı iki funksiyanın hasilində göstərmək mümkün deyildir. Ona görə də tədqiq olunan sistem dalğa funksiyaya malik olur. Yuxarıda qeyd etdik ki, belə hallarda sistem sıxlıq matrisası (operatoru) ilə təsvir olunur. Bunu göstərək.

Fərz edək ki, L tədqiq olunan sistemə məxsus hər hansı fiziki kəmiyyətdir. Ona uyğun \tilde{L} operatoru yalnız X koordinatlarına təsir edir. Qa-

palı sistemin baxılan halında L -in orta qiymətini hesablamıq istəsək, yəqin ki,

$$\bar{L} = \int \Psi^*(X, Y, t) \bar{L}(X) \Psi(X, Y, t) (dX)(dY) \quad (26.1)$$

olar.

§21-də göstərdik ki, koordinat təsvirində verilmiş hər ixtiyari $\bar{L}(x)$ - operatoru öz təsvirində

$$L_{x'x} = L(x') \delta(x' - x) \quad (26.2)$$

kimi təyin edilmiş $L_{x'x}$ matrisası ilə əvəz edilə bilər. Onda (26.1) bərabərliyi

$$\bar{L} = \int \Psi^*(X, Y, t) L_{x'x} \Psi(X', Y, t) (dX')(dX)(dY) \quad (26.3)$$

şəklində yazılar. Buna inanmaq üçün burada $L_{x'x}$ -i öz ifadəsi ilə əvəz edib, X' üzrə inteqral almaq kifayətdir:

$$\rho(X', X, t) = \rho_{xx} = \int \Psi^*(X, Y, t) \Psi(X', Y, t) dY, \quad (26.4)$$

matrisası daxil edək. Onda

$$\bar{L} = \int \rho_{x'x} L_{x'x} (dX)(dX') \quad (26.5)$$

alınar.

Elementləri (26.4) bərabərliyi ilə təyin olunan matrisaya uyğun $\bar{\rho}$ operatoruna sistemin **sıxlıq operatoru**, $|\rho_{x'x}|$ matrisanın özünə isə **sıxlıq matrisası** deyilir. Sıxlıq matrisası fizikaya 1926-c ildə Fon Neyman və Landau tərəfindən daxil edilmişdir. Sıxlıq matrisanın (26.4) təyinindən görünür ki, o, kvant mexanikasında istifadə olunan operatorlar sinifində daxildir; $\rho(X', X)$ matrisası ermit matrisadır:

$$\rho(X', X, t) = \rho^*(X, X', t) \quad (26.6)$$

Onun diaqonal elementləri

$$\rho(X, X, t) = \rho_{xx}(t) = \int \Psi^*(X, Y, t) \Psi(X, Y, t) (dY) \quad (26.7)$$

baxılan sistemin koordinatlarının paylanma funksiyasını (ehtimal sıxlığını) təyin edir. Doğrudan da, (26.7) ifadəsi, II sistemin istənilən halında I sistemin koordinatlarının $\{X\}$ çoxluğu ilə təyin olunduğunu göstərən ehtimal sıxlığıdır.

ρ_{xx} və L_{xx} matrisalarında indekslərin (x və x') kəsilməz dəyişdiyini nəzərə alsaq, (26.5) ifadəsini

$$\bar{L} = \int \rho_{xx} L_{xx} (dX)(dX') = \int (\rho L)_{xx} (dX) = \text{Sp}(\rho L), \quad (26.7')$$

kimi yazmaq olar, yəni fiziki kəmiyyətin \bar{L} orta qiyməti $|\rho L|$ matrisasının diaqonal elementlərinin cəminə bərabər olur.

Buradan çıxır ki, sistemin sıxlıq matrisası məlum olarsa, onun istənilən fiziki kəmiyyətin orta qiymətini hesablamaq olar. Aşağıda görəcəyik ki, $\rho(X, X', t)$ matrisası məlum olanda sistemin müxtəlif hallarının ehtimalını da tapmaq mümkün olur. Sıxlıq matrisası, təyininə görə görünür kimi, qapalı sistemin II hissəsinin (termostatın) koordinatlarından asılı deyildir, lakin, o, qapalı sistemin bütövlükdə halından asılıdır. Statistikanın məlum olduğu kimi, bu asılılıq termostatın $\theta = kT$ (k -Bolsman sabiti, T -sistemin mütləq temperaturu) temperaturunun sıxlıq matrisasına daxil olması ilə təyin olunur ((26.26) bax).

I və II sistemlər arasındakı qarşılıqlı təsirin nəzərə alınmayacaq dərəcədə zəif olduğunu fərz etsək, $\Psi(X, Y, t)$ funksiyasını yalnız X -dən və yalnız Y -dən asılı olan $\Psi(X, t)$ və $\varphi(Y)$ funksiyalarının hasilində yazmaq olar:

$$\Psi(X, Y, t) = \Psi(X, t)\varphi(Y). \quad (26.8)$$

$\varphi(Y)$ funksiyaları üçün normalanma şərtinin ödədiyini qəbul etsək, sıxlıq matrisası

$$\rho(X, X', t) = \Psi(X, t)\Psi(X', t), \quad (26.9)$$

olar. Burada $\Psi(X, t)$ – I sistemin dalğa funksiyasıdır. Deməli, bu fərziyyə daxilində baxılan sistem dalğa funksiyasına malik olur və biz $\rho(X, X', t)$ - təsvirindən $\Psi(X, t)$ təsvirinə keçmiş oluruq. Buradan görünür ki, sistemin halının sıxlıq matrisası ilə təsviri daha ümumi kvant mexaniki təsvirdir. Halın $\Psi(X, t)$ funksiyası ilə təsviri isə sıxlıq matrisasının (26.9) şəklində verilmiş xüsusi halına uyğundur.

(26.4), (26.7) və (26.9) ifadələrinin hamısında sıxlıq matrisası koordinat təsvirində verilmişdir. Ədəbiyyatda daha çox işlənən onun həmin təsvirdəki başqa bir ifadəsini də göstərək. Bunun üçün $\rho(X, X', t)$ sıxlıq matrisasını ix-

tiyari operatorun $\Psi_k(X, t)$ funksiyalarının ixtiyari kombinasiya şəklində göstərək. Sıxlıq matrisasının (26.4) və (26.9) ifadələrindən görünür ki, bu sıra $\Psi_k(X, t)$ funksiyaları üzrə götürülmüş iki qat sıra olar:

$$\rho(X, X', t) = \sum_{i,k} a_{ik} \Psi_i^*(X, t) \Psi_k(X', t) \quad (26.10)$$

Sıxlıq matrisası ermit olduğundan, a_{ik} əmsalları da, yəqin ki, ermitlik şərtini ödəməlidir:

$$a_{ik} = a_{ki}^*$$

(26.2) və (26.5) ifadələrindən görünür ki, fiziki kəmiyyətin orta qiyməti diaqonal sıxlıq matrisası ilə təyin olunur. Digər tərəfdən sıxlıq matrisası (26.9) ifadəsi ilə verildikdə, yəni sistem dalğa funksiyası ilə təsvir edildikdə (26.10) ifadəsindəki a_{ik} əmsalları, yəqin ki, a_i ilə a_k əmsallarının hasilinə bərabər olar. $\Psi(X', t)$ və $\Psi^*(X, t)$ ayrılıqda $\Psi_k(X, t)$ -lərin kombinasiyası şəklində göstərilir: $a_{ik} = a_i^* a_k$. Bu zaman sistemin $\Psi_k(X, t)$ -təmiz hallardan heç olmasa birində olma ehtimalı sıxlığı $\rho(X, X, t)$ -diaqonal matrisa ilə verilir. Doğrudan da, (26.10)-dan

$$\rho(X, X, t) = \sum_k a_k^* a_k \Psi_k^*(X, t) \Psi_k(X, t) = \sum_k W_k \Psi_k^* \Psi_k = W(X, t), \quad (26.11)$$

olur, burada $W_k = a_k^* a_k$ sistemin k -halında olma ehtimalı və ya k halının statistik çəkisi; $\rho(X, X', t) = W(X, t)$ qarışıq halda sistemin X -koordinatlarının paylanma funksiyasıdır. ρ -matrisasının (26.11) ifadəsini (26.5)-də yerinə yazıb, $\delta(X-X')$ delta funksiyasının köməyi ilə X' -ə görə inteqral alaq:

$$\bar{L} = \sum W_k \int \Psi_k^*(X, t) \bar{L}(X) \Psi_k(X, t) dX = \sum W_k \bar{L}^{(k)}, \quad (26.12)$$

burada

$$\bar{L}^{(k)} = \int \Psi_k^*(X, t) \bar{L}(X) \Psi_k(X, t) dX \quad (26.13)$$

sistemin k -təmiz halında L fiziki kəmiyyətin orta qiymətidir.

(26.11) və (26.13) ifadələrindən çıxır ki, sistemin qarışıq ($\rho(X', X)$) matrisası ilə təsvir olunan) halına statistik çəkisi W_k olan $\Psi_k(X, t)$ təmiz hallarının qarışığı kimi baxmaq olar. Qarışıq halda hər hansı fiziki kəmiyyətin orta

qiyməti isə, təmiz halların hər birində onun $\bar{L}^{(k)}$ orta qiyməti hesablanandan sonra, ona uyğun halların W_k statistik çəkisinə vurub, bütün təmiz hallar üzrə cəm götürməklə tapılır.

İndi də sıxlıq matrisasını başqa təsvirdə yazaq. Yuxarıda dediyimiz kimi sıxlıq matrisasının (26.11) ifadəsindən ədəbiyyatda daha çox istifadə olunur. Buna görə də onun yalnız bu ifadəsinin ixtiyari başqa təsvirdəki şəklini göstərməklə kifayətlənəcəyik.

Tutaq ki, $\varphi_\alpha(X, t)$ funksiyaları ixtiyari \tilde{F} operatorunun məxsusi funksiyalarıdır. Sistemin təmiz hallarını təyin edən bu funksiyaların $\{\varphi_\alpha(X, t)\}$ çoxluğu tam sistem təşkil etdiyindən (26.13) ifadəsinə daxil olan $\Psi_k(X, t)$ və $\Psi_k^*(X', t)$ funksiyalarını onların

$$\Psi_k(X', t) = \sum_{\alpha} C_{k\alpha} \varphi_{\alpha}(X', t); \Psi_k^*(X, t) = \sum_{\beta} C_{k\beta}^* \varphi_{\beta}^*(X, t). \quad (26.14)$$

xətti kombinasiyası şəklində göstərmək olar. Dediyimizi misalla izah edək. Tutaq ki, $\Psi_k(X, t)$ funksiyaları $\tilde{L} = [\tilde{r}\tilde{p}]$ hərəkət miqdarı momenti operatorunun məxsusi funksiyaları, \tilde{F} operatoru isə onun z oxu üzərindəki proyeksiyasını təyin edən \tilde{L}_z operatoru üzərinə düşür. Momentin hər hansı müəyyən qiyməti ilə xarakterizə olunan hal $L_z = m\hbar$ -in müxtəlif qiymətlərinə uyğun $(2l+1)$ sayda $\Psi_m(X, t)$ müxtəlif funksiya ilə təyin olunur. Onda ixtiyari $\Psi_k(X, t)$ təmiz halı

$$\Psi_k(X, t) = \Psi_{nl}(X, t) = \sum_{m=-l}^l C_m \Psi_{nlm} = \sum_{m=-l}^l C_m \Psi_m(X, t) \quad (26.15)$$

kimi xətti kombinasiya ilə verilər (burada $\Psi_{nlm} = \varphi_\alpha(X, t)$ funksiyaları rolunu oynayır).

$\Psi_k(X, t)$ -nin bu axırıncı ifadəsini (26.13)-də yerinə yazsaq,

$$\begin{aligned} \bar{L} &= \sum_{k,\alpha,\beta} W_k C_{k\alpha}^* \int \varphi_{\alpha}^*(X, t) \tilde{L}(X) \varphi_{\beta}(X, t) (dX) C_{k\beta} = \\ &= \sum_{k,\alpha,\beta} W_k C_{k\alpha}^* L_{\alpha\beta} C_{k\beta} \end{aligned} \quad (26.16)$$

alınar.

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_k W_k C_{\alpha k}^* C_{k\beta}, \quad (26.17)$$

matrisası daxil etsək,

$$\bar{L} = \sum_{\alpha\beta} \rho_{\beta\alpha} L_{\alpha\beta} = \sum_{\beta} (\rho L)_{\beta\beta} = \text{Sp}(\rho L) \quad (26.18)$$

Axırıncı ifadə (26.8) bərabərliyinə tamamilə ekvivalentdir. Lakin (26.8) ifadəsi koordinat təsvirində, (26.18) bərabərliyi isə \bar{F} təsvirində yazılmışdır. Bu ifadələrin müqayisəsindən bir daha çıxır ki, matrisanın diaqonal elementlərinin cəmi (şpur-şpur) bütün təsvirlərdə eynidir və sıxlıq matrisası məlum olarsa, fiziki kəmiyyətin qarışıq haldakı orta qiymətini hesablamaq olar.

(26.8) və ya (26.18) münasibətinə sıxlıq matrisasını təyin edən münasibətlər kimi baxmaq olar. Sistemin qarışıq halında bir sıra fiziki kəmiyyətlərin orta qiymətini ölçməklə sıxlıq matrisasının elementlərini tapmaq və onu qurmaq olar.

Matrisanın sətir və sütunlarının sayı, məsələn, (26.15) münasibətində $\Psi_k(X, t)$ qarışıq halı təyin edən asılı olmayan $\Psi_m(X, t)$ hallarının sayı ilə təyin olunur. N sətirli kompleks kvadrat matrisa ümumiyyətlə n^2 kompleks elementə malikdir. Sıxlıq matrisasının (26.6) ermitlik şərtindən görünür ki, sıxlıq matrisası n^2 kompleks kəmiyyətə yox, n^2 həqiqi parametrlə təyin olunur. Ancaq vahid matrisanın orta qiyməti

$$\bar{I} = \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} (I)_{\alpha\beta} = \sum \rho_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha\alpha}$$

və ya

$$\text{Sp}\rho = 1 \quad (26.19)$$

olduğundan n^2 parametrdən yalnız n^2-1 parametri ixtiyaridir. Deməli, kvant mexaniki sistemin n təmiz haldan təşkil olunmuş qarışıq halını təyin etmək üçün n^2-1 ixtiyari parametri ölçmək lazımdır və bu parametrlər həmin bu qarışıq halın sıxlıq matrisasını təyin edir. Məsələn, fermionların və ya fotonların polyarizasiya halı $\Psi_{1/2}(s_z)$ və $\Psi_{-1/2}(s_z)$ kimi iki funksiya ilə xarakterizə olunur (§82- yə bax), yəni $n=2$ olur. Onların polyarizə olunmamış qarışıq halı $n^2-1=3$ ixtiyari parametr ilə təyin olunur. Doğrudan da, belə kəmiyyət üç ölçülü $\vec{P} (P_x, P_y, P_z)$ polyarizasiya vektorudur.

Sistemin qarışıq halının sıxlıq matrisası məlum olarsa, həmin halda fiziki kəmiyyətin müəyyən L_{α} qiymətini ölçə bilmək ehtimalını tapmaq olar. Doğrudan da, (26.11) oxşar olaraq, (26.17) matrisası diaqonal olarsa,

$$\rho_{\alpha\alpha} = \sum_k W_k C_{k\alpha}^* C_{k\alpha}$$

(26.13) və (26.16) ifadələrindən alınan

$$\bar{L} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha\alpha} L_{\alpha} = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha\alpha} L_{\alpha} = \sum_{\alpha} W_{\alpha} L_{\alpha} \quad (26.20)$$

bərabərliyində $\rho_{\alpha\alpha} = W_{\alpha}$ fiziki kəmiyyətin L_{α} qiymətini alma ehtimalı olar.

Sistem Ψ_i dalğa funksiyası ilə təsvir olunanda sistemin təmiz halları üçün (26.13) və (26.16) ifadələrində yalnız bir hədd (məsələn $k=i$ həddi) qalır:

$$\bar{L} = \bar{L}^i = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha}^{*i} C_{\beta}^i L_{\alpha\beta}.$$

Bu ifadəni (26.13) şəklində yazmaq istəsək, təmiz halların sıxlıq matrisası

$$\rho_{\alpha\beta} = C_{\alpha}^{*i} C_{\beta}^i \quad (26.21)$$

olar. $\sum_k C_k^{*i} C_k^i = 1$ normalanma şərti daxilində bu matrisanın kvadratını hesablasaq,

$$(\rho_{\alpha\beta})^2 = (\rho \cdot \rho)_{\alpha\beta} = \sum_k \rho_{\alpha k} \rho_{k\beta} = \sum_k C_k^{*i} C_k^i C_{\alpha}^{*i} C_{\beta}^i = C_{\alpha}^{*i} C_{\beta}^i = \rho_{\alpha\beta}^{(i)}, \quad (26.22)$$

alınar, yəni təmiz halların sıxlıq matrisasının kvadratı özünə bərabərdir. (26.22) şərti sistemin hallarının təmiz hallar olması üçün lazımi və kafi şərt-dir.

I sistem II sistemlə termodinamik tarazlıqda, yəni I sistem temperaturu θ olan termostatda olarsa, baxılan sistemin ixtiyarı E_k halında olma ehtimalı W_k , statistik mexanikadan məlum olduğu kimi

$$W_k = \text{const} e^{-\frac{E_k}{\theta}} = Z^{-1} e^{-\frac{E_k}{\theta}}, \quad (26.23)$$

Gibs paylanması ilə verilir. Burada

$$\sum W_k = 1$$

normalanma şərtindən təyin olunan

$$Z(\theta, V, N) = \sum_k e^{-\frac{E_k}{\theta}} = \sum_k e^{-\frac{F_k(\theta, V, N)}{\theta}} \quad (26.24)$$

ifadəsi statistik cəm adlanır. F – baxılan sistemin sərbəst enerji funksiyası, V – həcmi, N – sistemi təşkil edən zərrəciklərin (atom, molekul və i.a.) sayıdır.

W_k -nın (26.23) ifadəsini (26.11)-də yerinə yazsaq, termostatda olan sistemin sıxlıq matrisası

$$\rho(X, X', t) = Z^{-1} \sum_k \Psi_k^*(X, t) \Psi_k(X', t) e^{-\frac{E_k}{\theta}} \quad (26.25)$$

və ya operator şəklində (26.24)-ə əsasən

$$\rho(X, X', t) = Z^{-1} e^{-\frac{\tilde{H}}{\theta}} = e^{-\frac{F - \tilde{H}}{\theta}}, \quad (26.26)$$

olar. Statistik cəmin ifadəsi isə

$$Z = \text{Sp} e^{-\tilde{H}/\theta} = \text{Sp} \left(\exp\left(-\tilde{H}/\theta\right) \right)$$

şəklində yazılar.

Baxılan halda statistik cəmi hesablamaq mümkün olarsa, (26.24)-dən sərbəst enerji funksiyası

$$F(\theta, V, N) = -\theta \ln Z(\theta, V, N)$$

və bu axırıncı vasitəsi ilə termostatda olan sistemin bütün termodinamik parametrləri tapılır.

§27. Sıxlıq matrisasının ödədiyi tənlik və onun müxtəlif təsvirləri

İndi də sıxlıq matrisasının zamana görə dəyişmə qanununu tapaq. Bunun üçün (26.11) ifadəsindən zamana görə törəmə götürək:

$$\frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \rho_{xx'} =$$

$$= \sum_k W_k \left\{ \frac{\partial \Psi_k^*(x, t)}{\partial t} \Psi_k(x', t) + \Psi_k^*(x, t) \frac{\partial \Psi_k(x', t)}{\partial t} \right\}. \quad (27.1)$$

(26.2) münasibətindən istifadə edərək, Şredinger tənliyini

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k(x, t)}{\partial t} = \int H_{xx'} \Psi_k(x'', t) (dx'')$$

şəklində yazsaq, (27.1) ifadəsi

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{xx'}(x)}{\partial t} = \sum_k W_k \left\{ \int \Psi_k^*(x', t) H_{xx'} \Psi_k(x'', t) (dx'') - \int H_{x'x''} \Psi_k^*(x'', t) \cdot \Psi_k(x, t) (dx'') \right\}$$

və ya

$$i\hbar \frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = \int \left\{ H_{xx'} \sum_k W_k \Psi_k^*(x', t) \Psi_k(x'', t) - H_{x'x''}^* \sum_k W_k \Psi_k^*(x'', t) \Psi_k(x, t) \right\} (dx'')$$

olar. Sıxlıq matrisasının (26.11) ifadəsini və Hamilton operatorunun $H_{x'x''}^* = H_{xx'}$ ermitlik şərtini nəzərə alsaq, axırıncı ifadə

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{xx'}(t)}{\partial t} = \int (H_{xx'} \rho_{x'x''} - \rho_{xx'} H_{x'x''}) (dx''),$$

yaxud

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{xx'}(t)}{\partial t} = (H\rho)_{xx'} - (\rho H)_{xx'}$$

şəklinə düşər. Bunu operator şəklində yazsaq,

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} (\tilde{H}\tilde{\rho} - \tilde{\rho}\tilde{H}); \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{H}\tilde{\rho}]. \quad (27.2)$$

tənliyi alınır. Bu tənlik, sağ tərəfdəki mənfi işarəni nəzərə almasaq, fiziki kəmiyyətlərin zamana görə dəyişməsinə təyin edən adi (bax §10) hərəkət tənliyi şəklindədir. Ona görə də (27.2) tənliyinə qarışıq halların zamana görə dəyişməsinə təsvir edən hərəkət tənliyi kimi baxmaq olar. Belə ki, bu tənlik, hər hansı $t=0$ başlanğıc anında sıxlıq matrisası məlum olduqda, onun istənilən t anındakı ifadəsini (qiymətini) tapmağa imkan verir.

(27.2) tənliyi bəzən Liuvill kvant tənliyi adlanır, çünki klassik statistik fizikada paylanma funksiyası (ehtimal sıxlığı) (27.2) tənliyinə ekvivalent

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -[HW]$$

klassik Liuvill tənliyini ödəyir, burada W -ehtimal sıxlığı, $H(q, p, t)$ - Hamilton funksiyası və $[HW] = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial W}{\partial p}$ - klassik Puasson mütərizəsidir

(q və p - sistemin koordinat və impulsar çoxluğu).

Hamilton operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı deyilsə, (27.2) tənliyindən

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \quad (27.3)$$

alınır. Digər tərəfdən (27.2) tənliyini enerji təsvirində yazıb,

$$\frac{\partial \rho_{mn}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} ((H\rho)_{mn} - (\rho H)_{mn})$$

H_{mn} matrisasının öz təsvirində $H_{mn} = E_n \delta_{mn}$ diaqonal matrisa olduğunu nəzərə alsaq,

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} = (E_n - E_m) \rho_{mn}(t) \quad (27.4)$$

alınır. Göründüyü kimi bu tənliyi inteqrallamaq böyük çətinlik törətmir. $t=0$ anında sıxlıq matrisasının elementlərini $\rho_{mn}(0)$ kimi işarə etsək, (27.4)-dən

$$\rho_{mn}(t) = \rho_{mn}(0) e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_m)t} \quad (27.5)$$

alınar, yəni bu halda sıxlıq matrisasının elementləri zamana görə harmonik qanunla dəyişir və dəyişmə tezliyi $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ olur.

§28. Sıxlıq matrisası üçün Şredinqer, Heyzenberq və qarşılıqlı təsir təsvirləri

İndi də sıxlıq matrisası və onun ödədiyi (27.2) tənliyini Şredinqer, Heyzenberq və qarşılıqlı təsir (Dirak) təsvirində yazaq.

Sıxlıq matrisasının zamandan asılılığı (27.2) tənliyi ilə verilən təsvir **Şredinqer təsviri** adlanır. Bu təsvirdə istənilən fiziki kəmiyyətin baxılan andakı orta qiyməti, (26.8)-ə əsasən

$$\bar{L}(t) = \text{Sp}(\tilde{\rho}(t)\tilde{L}) \quad (28.1)$$

kimi təyin olunur.

Heyzenberq təsvirində hal vektorunun (dalğa funksiyasının) zamandan asılı olmamasına uyğun olaraq sıxlıq matrisası da zamandan asılı deyildir. Fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorlar isə zamandan asılıdır. Buradan alınır ki, (27.3) bərabərliyi sıxlıq matrisası üçün onun $\rho(0)$ Heyzenberq təsvirindən Şredinqer təsvirinə keçidi təsvir edir. Bu təsvirdə fiziki kəmiyyətin verilən andakı orta qiymətini tapmaq üçün $\rho(t)$ -nin (27.3) ifadəsini (28.1)-də yerinə yazıb, şpur altında operatorların tsiklik yerdəyişmə qaydasından istifadə etmək lazımdır:

$$\bar{L}(t) = \text{Sp}\left(e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t} \tilde{L}\right) = \text{Sp}(\rho(0) e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t} \tilde{L} e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{H}t})$$

və ya

$$\bar{L}(t) = \text{Sp}(\rho(0)\tilde{L}(t)) \quad (28.2)$$

alırıq. Burada $\tilde{L}(t)$ -Heyzenberq təsvirində götürülmüş və (25.10) bərabərliyi ilə təyin olunan operatorudur. Onun zamana görə dəyişməsi isə (25.11) tənliyi ilə verilir.

Şredinqer təsvirində Hamilton operatoru zamandan asılı olmayan \tilde{H}_0 («sərbəst» sistemin Hamilton operatoru) və zamandan asılı olan $\tilde{V}(t)$ - qarşılıqlı təsir operatorlarının (25.12) cəmi şəklində $(\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{V}(t))$ göstə-

rilə bilərsə, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, qarşılıqlı təsir təsvirindən istifadə etmək əlverişli olur.

(27.3)-ə oxşar olaraq, sıxlıq matrisası üçün qarşılıqlı təsir təsvirindən Şredinger təsvirinə keçid

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \tilde{\rho}(t) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} \quad (28.3)$$

kimi yazılar (müqasiyə məqsədi ilə (25.14)-ə bax), burada $\rho(t)$ -Şredinger təsvirində, $\tilde{\rho}(t)$ isə qarşılıqlı təsir təsvirində verilmiş sıxlıq matrisalarıdır. $\rho(t)$ -nin bu ifadəsini (28.1)-də yerinə yazıb, (28.2)-dəki kimi, şpur altında operatorların tsiklik yerdəyişmə qaydasından istifadə etsək,

$$\bar{L}(t) = \text{Sp}(\tilde{\rho}(t)\tilde{L}(t)) \quad (28.4)$$

alarıq. Burada \tilde{L} - (25.14) ifadəsi ilə təyin olunan qarşılıqlı təsir təsvirində verilmiş \tilde{L} operatorudur və onun zamana görə dəyişməsi (25.17) tənliyi ilə təyin olunur. $\tilde{\rho}(t)$ -nin zamana görə dəyişməsini xarakterizə edən tənliyi tapmaq üçün isə $\rho(t)$ -nin (28.3) ifadəsini (27.2) tənliyindən yerinə yazaq. Onda

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \tilde{\rho}(t) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}) &= (\tilde{H}_0 + \tilde{V}) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \tilde{\rho}(t) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} - \\ &- e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \tilde{\rho}(t) e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} (\tilde{H}_0 + \tilde{V}). \end{aligned}$$

alınar. Sol tərəfdəki zamana görə törəməni götürəndən sonra \tilde{H}_0 ilə $e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}$ operatorlarının kommutativliyini və (25.16) ifadəsini nəzərə alsaq, $\tilde{\rho}(t)$ üçün

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(t) = [\tilde{V}(t)\tilde{\rho}(t)], \quad (28.5)$$

hərəkət tənliyini alarıq, burada $\tilde{V}(t)$ - (25.14) ilə verilmiş qarşılıqlı təsir təsvirindəki $\tilde{V}(t)$ - operatorudur.

§29. Ket- və bra-vektorlar

Yuxarıda qeyd etdik ki, kvant mexaniki sistemin halını xarakterizə etmək üçün (23.14) unitar çevrilmələri ilə biri digərindən alınan təsvirlər tam ekvivalentdir. Hər hansı müəyyən bir təsvirdən istifadə etmədən kvant mexanikasının bütün müddəalarını ifadə etmək üçün daha bir ümumi metod mövcuddur. Bu metod **hal vektoru** anlayışına əsaslanır. Bu vektor bir-birilə kommutasiya edən operatorların məxsusi qiymətlərini təyin edən kvant ədədləri çoxluğu ilə təyin olunur və kvant mexaniki sistemin verilmiş halını tam təsvir edir.

Belə təsvir metodu ilk dəfə fizikaya Dirak tərəfindən daxil edilmişdir. Dirakin təklifi ilə hal vektoru $|\Psi\rangle$ kimi işarə olunur və o **ket-vektor** adlanır. Kvant ədədləri çoxluğu isə təyin olunan ket-vektor isə $|n\rangle$ kimi yazılır, burada n -sistemin halını tam təyin edən $\{L_j\}$ fiziki kəmiyyətlərə uyğun n_1, n_2, \dots, n_f kvant ədədləri çoxluğudur.

Ket-vektorlar xətti vektor fəzası təşkil edir, ket-vektorların xətti kombinasiyası da ket-vektordur.

Verilmiş çoxluğu təşkil edən ket-vektorlardan biri digərlərinin xətti kombinasiyası kimi göstərilə bilərsə, onlar xətti asılı olmur.

Baxılan vektor fəzası bir-birindən asılı olmayan n ket-vektordan təşkil olunarsa, belə fəza sonlu ölçülü fəza adlanır və onun ölçüsü n -ə bərabər olur. Fəzanı təşkil edən vektorların sayı sonsuz olarsa, o, sonsuz ölçülü fəza adlanır və fəzanın ölçüsü sonsuz olur. Bu axırını fəza, $\Psi(x)$ funksiyalar fəzası kimi, Hilbert fəzası adlanır. Sistemin bütün başqa hal vektorları bu bazis vektorların sonlu və ya sonsuz xətti kombinasiyası şəklində göstərilə bilər.

Hal-vektoruna qoşma vektor $\langle\Psi|$ və ya $\langle n|$ kimi işarə olunur və bra-vektor* adlanır.

Ket-vektorlar fəzası sonlu və ya sonsuz ölçülü olduqda bra-vektorlar fəzası da uyğun olaraq sonlu və ya sonsuz ölçülü olur. Ket və bra-vektorlar arasındakı uyğunluq anti-xəttidir, yəni ket-vektor üçün

$$|n\rangle = \lambda_1 |n_1\rangle + \lambda_2 |n_2\rangle \quad (29.1)$$

olduqda, bra-vektor üçün

$$\langle n| = \lambda_1^* \langle n_1| + \lambda_2^* \langle n_2| \quad (29.2)$$

olur, burada λ_1 və λ_2 kompleks kəmiyyətlərdir. Ket-vektor sıfıra bərabər

* Bra-vektor və ket-vektor adları ingilis dilində môtərizə mənasını daşıyan bracket sözünün birinci və ikinci hecalarından götürülmüşdür.

olduqda bra-vektor da sifir olur. Bra-vektorlar fəzası ket-vektorlar fəzasına nəzərən *dual fəza* adlanır. Başqa sözlə, ket- və bra-vektorlar müxtəlif fəzalarda verilir.

Bu təsvirdə iki vektorun $\int \Psi^* \Psi(dx)$ skalyar hasilı

$$\langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (29.3)$$

Hər hansı operatorun $\Psi_n(x)$ məxsusi funksiyaları isə

$$\begin{aligned} \Psi_n(x) &= \langle x | n \rangle, \\ \Psi_n^*(x) &= \langle n | x \rangle \end{aligned} \quad (29.4)$$

kimi işarə olunur. (29.4) funksiyaları $|n\rangle$ hal vektorunun koordinat təsviri

$$\begin{aligned} \Psi_n(p) &= \langle p | n \rangle, \\ \Psi_n^*(p) &= \langle n | p \rangle, \end{aligned} \quad (29.5)$$

funksiyaları isə $|n\rangle$ vektorunun impuls təsviri adlanır.

Riyazi baxımdan $\langle x | n \rangle$ kəmiyyətləri $|x\rangle$ funksiyaları bazisində $|n\rangle$ vektorunun komponentləri hesab olunur:

$$|n\rangle = \int |x\rangle \langle x | n \rangle (dx) = \int |x\rangle \Psi_n(x) (dx). \quad (29.6)$$

$|x\rangle$ bazis vektorları isə \tilde{x} operatorunun məxsusi funksiyalarıdır:

$$\tilde{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle. \quad (29.7)$$

Digər tərəfdən, $\langle x | n \rangle$ kəmiyyətlərinə sətirləri kəsilməz x indeksləri, sütunları isə n indeksləri ilə işarə olunan matrisanın elementləri kimi də baxılır.

Zərrəciyin x nöqtəsi ətrafında olma ehtimal sıxlığı

$$|\Psi_n(x)|^2 = \Psi_n^*(x) \Psi_n(x) = \langle n | x \rangle \langle x | n \rangle \quad (29.8)$$

və onun fəzanın hər hansı ixtiyari nöqtəsində olma ehtimalı isə

$$\int \Psi_n^*(x) \Psi_n(x) (dx) = \int \langle n | x \rangle \langle x | n \rangle (dx) = \langle n | n \rangle = 1 \quad (29.9)$$

olur.

Kvant mexanikasının əsas müddəsinə görə $|n\rangle$ hal vektorlar çoxluğu tam sistem təşkil etməlidir. Onda sistemin ixtiyari $|\Psi\rangle$ hal vektorunu $|n\rangle$ vektorları ilə ifadə etmək olar (superpozisiya prinsipi):

$$|\Psi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \Psi \rangle, \quad (29.10)$$

burada n – bütün mümkün olan qiymətləri alır. Buradan $|n\rangle$ vektorlar çoxluğunun tam sistem olması şərti

$$\sum |n\rangle \langle n| = I \quad (29.11)$$

olur, I – vahid matrisadır, $|\Psi\rangle$ vektorunun, məsələn, x -təsvirində verildiyini fərz etsək, (29.10) ifadəsi

$$\langle x | \Psi \rangle = \sum_n \langle x | n \rangle \langle n | \Psi \rangle \quad (29.12)$$

şəklində yazılır. Bu, $\Psi(x)$ -in

$$\Psi(x) = \sum C_n \Psi_n(x)$$

şəklində yazılmış superpozisiyası deməkdir.

Hər hansı ixtiyari \tilde{L} operatorunun $|n\rangle$ vektorları ilə təyin olunan matrisa elementləri $\langle n' | \tilde{L} | n \rangle$ kimi yazılır. Bu matrisanın diaqonal elementləri, yəni L -in $|n\rangle$ halında orta qiyməti üçün

$$\langle L \rangle = \langle n | L | n \rangle \quad (29.13)$$

işarəsi qəbul olunur.

Matrisa elementlərini hesablamaq üçün adətən müəyyən bir təsvirə keçmək lazım olur. Məsələn, belə bir təsvir x -təsviri seçilsə, \tilde{L} operatoru və $|n\rangle$ vektorları bu təsvirdə

$$\langle x' | L | x \rangle = \delta(x' - x)L(x); \langle x | n \rangle; \langle n | x \rangle \quad (29.14)$$

kimi yazılır. Həmin təsvirdə $\langle n' | L | n \rangle$ matrisa elementi isə

$$\langle n' | L | n \rangle = \int \langle n' | x \rangle \langle x' | L | x \rangle \langle x' | n \rangle (dx)(dx') \quad (29.15)$$

və ya $\langle x' | L | x \rangle$ -in (29.14) ilə verilmiş ifadəsini burada yazıb δ -funksiya vasitəsilə x' üzrə integral götürsək:

$$\langle n' | L | n \rangle = \int \langle n' | x \rangle \tilde{L}(x) \langle x | n \rangle (dx) = \int \Psi_{n'}^*(x) \tilde{L}(x) \Psi_n(x) (dx) \quad (29.16)$$

olur, yəni matrisa elementinin artıq bizə məlum olan ifadəsi alınır. Lakin kvant mexanikasının tətbiqinə həsr olunmuş fəsilərdə görəcəyimiz kimi, bu ümumi metodla operatorun matrisa elementlərini hesablamaq üçün heç də müəyyən bir təsvirə keçməyə ehtiyac yoxdur. Bunun üçün operatorların və hal vektorlarının təsvirin seçilməsindən asılı olmayan ümumi xassələrini bilmək kifayətdir.

Bu metodda \tilde{L} və \tilde{F} operatorlarının matrisa elementləri məlum olarsa, onların hasili olan $\tilde{C} = \tilde{L}\tilde{F}$ operatorunun matrisa elementini birincilərlə ifadə etmək olar:

$$\langle n' | C | n \rangle = \langle n' | LF | n \rangle = \sum_{n''} \langle n' | L | n'' \rangle \langle n'' | F | n \rangle, \quad (29.17)$$

yaxud adi işarələrlə

$$C_{n'n} = \sum_{n''} L_{n'n''} F_{n''n} \quad (29.18)$$

olur.

II HİSSƏ

QEYRİ-RELYATİVİSTİK KVANT MEXANİKASININ BƏZİ TƏTBİQLƏRİ

IV FƏSİL

BİRÖLÇÜLÜ HƏRƏKƏTLƏRİN TƏDQIQI

§30. Zərrəciyin potensial çəpərdən keçməsi

Şredinger tənliyinin fiziki mahiyyətini daha dərindən dərk etmək üçün əvvəlcə birölçülü məsələləri araşdırmağı, sonra isə əksər hallarda tənlikləri birölçülü Şredinger tənliyinə gətirilə bilən məsələlərə keçməyi məqsədə uyğun bildik.

Fəzanın iki oblastında zərrəciyin enerjisi bu oblastları ayıran səthdəki potensial enerjiden kiçikdirsə, oblastlar potensial çəpərlə ayrılmış olur. Potensial çəpər müxtəlif həndəsi formaya malik ola bilər. Məsələn, şəkil 6-da ixtiyari şəkilli birölçülü potensial çəpər göstərilmişdir.

Koordinat başlağında ($x=0$ nöqtəsində) potensial enerji U_{max} maksimum qiymətə malikdir. Bu nöqtəyə nəzərən sol ($x<0$) və sağ ($x>0$) oblastlarda isə potensial enerji özünün maksimum qiymətindən kiçikdir. Bu çəpərin təmsalında klassik hərəkətlə kvant hərəkətin fərqiində olan xüsusiyyətləri nümayiş etdirmək olar.

Fərz edək ki, tam enerjisi E , kütləsi m olan zərrəcik soldan sağa x oxunun müsbət istiqamətində hərəkət edir. Klassik fizikada zərrəciyin E tam enerjisi onun kinetik və potensial enerjiləri cəminə bərabərdir:

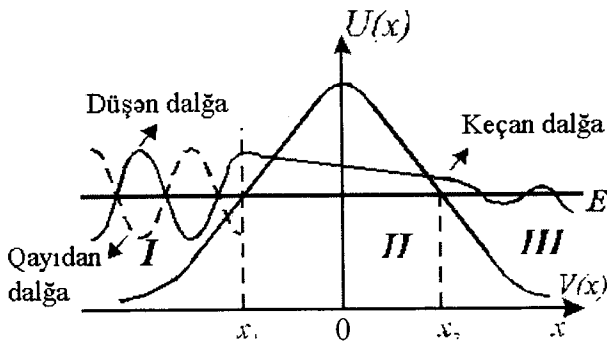
$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x), \quad (30.1)$$

buradan zərrəciyin impulsu p -ni tapsaq,

$$p = \pm \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (30.2)$$

olar.

Zərrəciyin enerjisi potensial enerjinin U_{max} qiymətindən böyükdürsə ($E > U_{max}$), zərrəcik maneəsiz çəpəri aşıb onun sağ (sol) tərəfinə keçəcək. Zərrəciyin enerjisi potensial enerjinin $-x_1$ (və ya x_2) nöqtəsindəki qiymətinə bərabədirsə, (30.2)-yə görə həmin nöqtələrdə zərrəciyin impulsu $p(-x_1)=0$ ($p(x_2)=0$) olar. Bu halda zərrəcik x -in müsbət (mənfi) istiqamətində hərəkətini davam etdirə bilməyib, əks istiqamətdə hərəkət etməyə başlayacaqdır. $x=-x_1$ və $x=x_2$ nöqtələri *qayıtma nöqtələri* adlanır.



Şəkil 6. İxtiyari şəkilli birölçülü potensial çəpər.

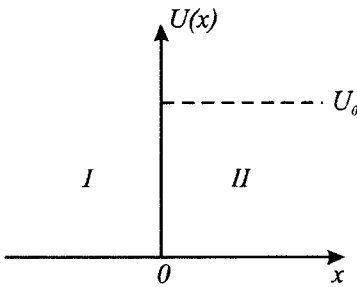
$x > -x_1$ və $x < x_2$ oblastunda $E < U(x)$ olduğundan zərrəciyin impulsu xəyali qiymət alır, impuls öz klassik fiziki mahiyyətini itirir və belə zərrəcik həmin oblastda (potensial çəpərin daxilində) ola bilmir. Beləliklə, klassik mexanikada çəpərin potensial enerjisi U_{max} -dan kiçik olan zərrəciklər üçün potensial çəpər qeyri-şəffaf, enerjisi U_{max} -dan böyük olan zərrəciklər üçün isə şəffaf olur. Potensial çəpər termini bu klassik mənada başa düşülür.

Kvant mexanikasında impulsun xəyali qiyməti yalnız dalğa funksiyasının koordinatlardan eksponensial asılılığına dəlalət edir və dalğa funksiyası isə potensial çəpərin daxilində sıfıra bərabər olmur, zərrəciyin çəpəri keçib getmə ehtimalı sıfırdan fərqli qalır. Deməli, mikrozzərrəciklər üçün $E < U(x)$ olanda potensial çəpərdən keçmə hadisəsi müşahidə oluna bilər. Belə hadisə kvant mexanikasında **tunnel effekti** adlanır. Bu yalnız kvant nəzəriyyəsinə xas olan hadisədir və onun klassik oxşarı (analoqu) yoxdur.

Kvant mexanikasında klassik fizikanın yuxarıdakı iki iddiasının hər ikisi, ümumiyyətlə, düz deyildir. Beləliklə, biz mikrozzərrəciklərin mikrosahələrdəki hərəkətini tədqiq ediriksə, enerjisi $E > U_{max}$ və $E < U_{max}$ olan zərrəcik, hər iki halda, qismən çəpərdən keçmək və qismən də ondan əks olunmaq ehtimalına malikdir. Dediklərimizi nümayiş etdirmək üçün bir neçə sadə hala baxaq.

a) Potensial divar

Fərz edək ki, enerjisi E olan və x oxunun müsbət istiqamətində $x = -\infty$ dan hərəkət edən m kütləli zərrəcik potensial enerji $U(x)=0$ olan I oblastdan ($-\infty \leq x \leq 0$) $U(x)=U_0$ olan II oblasta ($0 \leq x \leq \infty$) keçir (şəkil 7).



Şəkil 7. Potensial divar.

Sistemin \tilde{H} Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + U(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0. \quad (30.3)$$

Hamilton operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından belə zərəcəyin mümkün halları stasionar hallar olar. Stasionar halların Şredinger tənliyi

$$\tilde{H}\Psi(x) = E\Psi(x)$$

və ya

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (30.4)$$

kimi yazılır.

$$k_o^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{və} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) \quad (30.5)$$

işarələrini qəbul etsək, I və II oblastlar üçün Şredinger tənliyi, uyğun olar,

$$\begin{aligned} \Psi_I''(x) + k_o^2\Psi_I(x) &= 0, & x < 0, & U(x)=0, \\ \Psi_{II}''(x) + k^2\Psi_{II}(x) &= 0, & x > 0, & U(x)=U_0. \end{aligned} \quad (30.6)$$

Bu növ tənliklərin həllində xarakteristik tənliklərin qurulma yolundan istifadə etsək, (30.6) tənliklərin həlləri üçün

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= Ae^{ik_o x} + Be^{-ik_o x} & x < 0 \\ \Psi_{II}(x) &= Ce^{ikx} + De^{-ikx} & x > 0 \end{aligned} \quad (30.7)$$

alınar. Burada A, B, C, D – ixtiyari sabitlərdir.

$U(x)$ potensial divarın U_0 hündürlüyünə nəzərən zərrəciyin enerjisi $E < U_0$ və $E > U_0$ ola bilər. Bu iki halı ayrılıqda təhlil edək.

1) Fərz edək ki, $E < U_0$ -dir. Bu halda (30.5)-dən k^2 üçün xəyalı qiymət alınır. Onu $k=i\alpha$ kimi işarə etsək,

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}, \quad (30.8)$$

(30.7)-dən isə

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x} \quad (30.9)$$

alınır.

Bildiyimiz kimi, kvant mexaniki sistemin dalğa funksiyası üç standart şərti ödəməlidir. Ψ -funksiya baxılan oblastda sonlu, kəsilməz və birqiymətli olmalıdır. (30.9)-dan görünür ki, $\Psi_{II}(x)$ sonlu qalması üçün ixtiyari sabit $D=0$ seçilməlidir. Onda (30.7) həlləri

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= Ae^{ik_0 x} + Be^{-ik_0 x} & x < 0 \\ \Psi_{II}(x) &= Ce^{-\alpha x} & x > 0 \end{aligned} \quad (30.7')$$

$x=0$ nöqtəsində $\Psi(x)$ -in və onun birinci tərtib törəməsinin kəsilməz olduğunu tələb etsək,

$$\begin{aligned} \Psi_I(x=0) &= \Psi_{II}(x=0) \\ \Psi'_I(x=0) &= \Psi'_{II}(x=0) \end{aligned} \quad (30.10)$$

və ya (30.7')-dən

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ ik_0(A - B) &= -\alpha C \end{aligned} \quad (30.11)$$

alarıq. Buradan $\frac{B}{A}$ və $\frac{C}{A}$ nisbətləri üçün

$$\frac{B}{A} = \frac{k_0 - i\alpha}{k_0 + i\alpha}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_0}{k_0 + i\alpha} \quad (30.12)$$

qiymətləri alınır.

I oblastda zərrəcik sərbəst hərəkət edir. Bu hərəkətin ümumi $\Psi(x)$ funksiyası $\Psi(x) = \Psi^{(+)}(x) + \Psi^{(-)}(x)$ kimi yazıla bilər. Burada $\Psi^{(+)} = Ae^{ik_0 x}$ – x oxunun müsbət istiqamətində zərrəciyin müsbət impulslu hərəkətini, $\Psi^{(-)}(x) = Be^{-ik_0 x}$ isə onun mənfi impulslu, yəni potensial divardan qayıda-raq x -in mənfi istiqamətindəki hərəkətini təsvir edəcəkdir. Bu funksiyalar \bar{p} impuls operatorunun məxsusi funksiyalarıdır. Onların $\{\Psi_p(x)\}$ çoxluğu kəsilməz spektr təşkil etdiyindən onlar üçün ortonormalanma şərti

$$\int \Psi_{p'}^*(x) \Psi_p(x) dx = \delta(p' - p)$$

olar. Bu şərtədən A üçün $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ qiyməti alınır (bax (11.18')).

Beləliklə I və II oblastların dalğa funksiyaları

$$\Psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(e^{ik_0 x} + \frac{k_0 - i\epsilon}{k_0 + i\epsilon} e^{-ik_0 x} \right) \quad (30.13)$$

$$\Psi_{II}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2k_0}{k_0 + i\epsilon} e^{-ix}$$

olur.

$U(x)$ sahəsində hərəkət edən E enerjili zərrəciyin $\Psi(x)$ dalğa funksiyası $x \rightarrow -\infty$ -da

$$\Psi_I(x) = Ae^{ik_0 x} + Be^{-ik_0 x} = \Psi_I^+(x) + \Psi_I^-(x) \quad (30.14)$$

kimi asimptotik şəkllə malikdirsə,

$$R = \lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{|j(\Psi_I^-(x))|}{|j(\Psi_I^+(x))|} \quad (30.15)$$

əmsalına *qayıtma* və ya *əksetmə* əmsalı deyilir. Burada $j(\Psi_I^-(x))$ və $j(\Psi_I^+(x))$ – uyğun istiqamətlərdəki ehtimal sıxlığı cərəyanlarıdır (bax (17.12)).

(30.7'), (30.12) və (30.15)-dən görünür ki, $E < U_0$ halında $U(x)$ potensiallı oblastda hərəkət edən zərrəcik üçün *əksetmə əmsalı*

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k_0 - i\alpha|^2}{|k_0 + i\alpha|^2} = 1 \quad (30.16)$$

olur. Ancaq qeyd edək ki, bu halda düşən dalğa ilə qayıdan dalğanın fazaları arasında fazalar fərqi yaranır.

2) İndi də $E > U_0$ olduğunu fərz edək. Bu halda (30.5)-dən görüldüyü kimi $k_0 > 0$, $k > 0$ olur və (30.6) tənliklərin həlli (30.7) ifadələri ilə verilir. D əmsalı ilə mütənasib olan hədd, yəqin ki, II oblastda x oxunun əks istiqamətində yayılan dalğaları xarakterizə edir. Belə dalğalar II oblastda yaranmır, belə ki, oblastda onları əks etdirəcək maneə yoxdur. Ona görə də burada $D = 0$ götürülə bilər. Beləliklə (30.7) həlləri

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= A e^{ik_0 x} + B e^{-ik_0 x} \\ \Psi_{II}(x) &= C e^{ikx} \end{aligned} \quad (30.7'')$$

şəklini alır. $x = 0$ nöqtəsində funksiyaların və onların birinci tərtib törəmələrinin kəsilməzlik şərtlərindən

$$\begin{aligned} A + B &= C \\ k_0(A - B) &= kC \end{aligned} \quad (30.17)$$

alınır. Buradan

$$\frac{B}{A} = \frac{k_0 - k}{k_0 + k} \quad \text{və} \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_0}{k_0 + k} \quad (30.18)$$

olar. Bu halda potensial divardan əksətmə əmsalı

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k_0 - k|^2}{|k_0 + k|^2} \quad (30.19)$$

$k < k_0$ olduğundan əksətmə əmsalı $R < 1$ olur və o, özünün maksimum qiymətinə yalnız $E = U_0$ və ya $k = 0$ -da çatır.

Həm $E < U_0$ və həm də $E > U_0$ hallarını özündə əks etdirən R -in E -dən asılılığı şəkil 8-də verilmişdir.

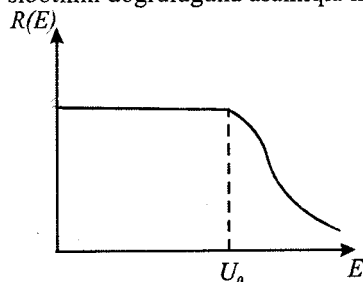
$\Psi_I(x)$ və $\Psi_{II}(x)$ dalğa funksiyaları (30.7'') tənliklərin $x \rightarrow +\infty$ uyğun asimptotik həlləri olduğundan potensial divarın (çəpərin) şəffaflıq və ya keçid əmsalı (30.18)-ə əsasən

$$D = \lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{j(\Psi_{II}(x))}{j(\Psi_I^{(+)}(x))} = \frac{k|C^2|}{k_o|A|^2} = \frac{4kk_o}{(k_o + k)^2} \quad (30.20)$$

olar. Zərrəciklər sayının saxlanma qanunundan

$$R + D = 1 \quad (30.21)$$

olmalıdır. R və D -in (30.19) və (30.20) ifadələrindən (30.21) münasibətinin doğruluğuna asanlıqla inanmaq olar.



Şəkil 8

Yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, klassik mexanikada zərrəciyin E enerjisi potensial çəpərin U_0 hündürlüyündən böyükdürsə, belə çəpər onlar üçün tam şeffaf, yəni $D=1$, $R=0$ olur. Lakin, baxılan haldan çıxır ki, kvant mexanikasında enerjisi $E > U_0$ şərtini ödəyən zərrəciklər üçün potensial çəpər tam şeffaf deyil, belə ki, bu halda $D < 1$ və zərrəciklərin çəpərdən qayıtma ehtimalı sıfırdan fərqli, yəni $R > 0$ olur.

b) Düzbucaqlı potensial çəpər

Potensial çəpərin $U(x)$ potensial enerjisinin maksimum qiyməti ilə təyin olunan hündürlüyünü U_0 ilə işarə edək (şəkil 9). Müəyyənlik üçün fərz edək ki, zərrəcik soldan sağa x oxunun müsbət istiqamətində hərəkət edir:

$$\begin{aligned} U(x) &= 0, \quad x < 0, \quad x > l \\ U(x) &= U_0, \quad 0 \leq x \leq l \end{aligned} \quad (30.22)$$

$U(x)$ -in bu qiymətlərini (30.4) tənliyində yazıb, onu I, II və III oblastlar üçün (30.6) tənliklər sistemində gətirəndən sonra, alınan tənlikləri a) bəndində göstərilən yolla həll etsək,

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= Ae^{ik_o x} + Be^{-ik_o x} \quad x < 0 \\ \Psi_{II}(x) &= Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad 0 \leq x \leq l \\ \Psi_{III}(x) &= Qe^{ik_o x} + Pe^{-ik_o x} \quad x > l \end{aligned} \quad (30.23)$$

alarıq, burada A, B, C, D, Q, P ixtiyari sabitlərdir və

$$k_o^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_o) \quad (30.23')$$

işarələri qəbul olunmuşdur. III oblastda x -in əks istiqamətində yayılan dalğa olmadığına görə $P=0$ götürülə bilər.

Verilmiş oblastlar üçün yazılmış bir-birindən asılı olmayan üç tənliyin həlli olan bu üç funksiya zərəcəyin baxılan sahədəki hərəkətini təsvir edən hər hansı yeganə bir $\Psi(x)$ funksiyası təşkil etmir, onların belə bir funksiya təşkil etməsi üçün sərhəd şərtlərindən istifadə etmək lazımdır. Bu şərtlər dalğa funksiyasının və onun birinci tərtib törəmələrinin $x=0$ və $x=l$ nöqtələrində kəsilməz olmaları tələbidir. Bu tələbə görə

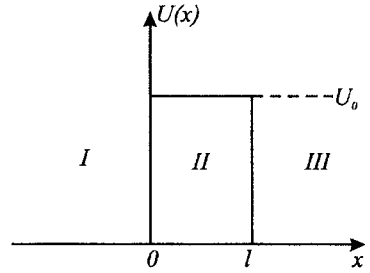
$$\Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0)$$

$$\Psi_{II}(x=l) = \Psi_{III}(x=l)$$

və

$$\Psi'_I(x=0) = \Psi'_{II}(x=0)$$

$$\Psi'_{II}(x=l) = \Psi'_{III}(x=l) \quad (30.24)$$



bərabərlikləri ödənilməlidir. (30.23) funksiyalarının bu bərabərlikləri ödədiyini tələb etsək,

Şəkil 9. Düzbucaqlı potensial çəpər.

$$A+B=C+D,$$

$$k_o(A-B)=k(C-D) \quad (30.25)$$

$$Ce^{ikl} + De^{-ikl} = Qe^{ik_o l}$$

$$k(Ce^{ikl} - De^{-ikl}) = k_o Qe^{ik_o l}$$

sistemi alırıq.

(30.25) tənliklər sisteminə beş ixtiyari sabit daxildir. Təyin olunacaq sabitlərin sayı tənliklərin sayından çox olduğuna görə baxılan sistem yalnız onların nisbətlerini təyin etməyə imkan verir. Lakin bizi çəpərin R qayıtma və D şəffaflyq əmsalları maraqlandırdığından, burada onları təyin edən

$\frac{B}{A}$ və $\frac{Q}{A}$ nisbətlerini tapmaqla kifayətlənəcəyik. (30.25)-dən bu nisbətlər üçün

$$\frac{B}{A} = \frac{(k_o^2 - k^2)(e^{ikl} - e^{-ikl})}{(k + k_o)^2 e^{-ikl} - (k - k_o)^2 e^{ikl}} \quad (30.26)$$

$$\frac{Q}{A} = \frac{4kk_o}{(k+k_o)^2 e^{-ikl} - (k-k_o)^2 e^{ikl}}$$

ifadələri alınır. (30.15), (30.20) və (30.26) ifadələrindən R və D üçün

$$R = \frac{4(k_o^2 - k^2)^2 \sin^2 kl}{(k+k_o)^4 + (k-k_o)^4 - 2(k^2 - k_o^2)^2 \cos 2kl} \quad (30.27)$$

$$D = \frac{16k^2 k_o^2}{(k+k_o)^4 + (k-k_o)^4 - 2(k^2 - k_o^2)^2 \cos 2kl}$$

alınır. (30.27)-də $\cos 2kl = 1 - 2\sin^2 kl$ bərabərliyindən istifadə edib, R və D -nin ifadələrini sadələşdirsək,

$$R = \frac{(k_o^2 - k^2)^2 \sin^2 kl}{4k_o^2 k^2 + (k_o^2 - k^2)^2 \sin^2 kl}$$

və

$$D = \frac{4k_o^2 k^2}{4k_o^2 k^2 + (k_o^2 - k^2)^2 \sin^2 kl} \quad (30.28)$$

ifadələrini alırıq.

R və D -nin ifadələrindən görünür ki,

$$R + D = 1 \quad (30.29)$$

şerti, yəni zərrəciklərin sayının saxlanma qanunu ödənilir. Digər tərəfdən $k \neq k_o$ olduğundan R -in sıfır və D -nin vahidə bərabər olması üçün

$$\sin kl = 0 \quad (30.30)$$

şerti ödənməlidir, buradan

$$kl = n\pi \text{ və ya } \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E_n - U_0)} = n \frac{\pi}{l}$$

axırıncı ifadəni kvadrata yüksəltmək,

$$E_n = U_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m l^2}, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (30.31)$$

olur. Başqa sözlə, zərrəciyin E_n enerjisinin (30.31) ilə verilmiş müsbət diskret qiymətlər çoxluğu üçün çəpər tam şəffaf olur. Qeyd edək ki, E_n -in qiymətlər çoxluğu üçün R qayıtma əmsalının sıfıra bərabər olması düzbucaqlı çəpərə xas olan xassədir.

Düşən zərrəciyin enerjisi E potensial çəpərin U_0 hündürlüyündən kiçik olarsa, $k = \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$ ifadəsi kompleks olur: $k=i\kappa$; burada

$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} > 0$ -dir. Bu halda (30.26) ifadələrində $e^{i\kappa l}$ ilə mütənəsisib kifayət qədər böyük hədlərə nisbətən digər hədləri nəzərə almasaq, $R \sim 1$ -də yaxınlaşar, D üçün isə l -in artması ilə eksponensial olaraq azalan ifadə alınır:

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)l}} \quad (30.32)$$

Burada $D_0 = \frac{16k_0^2 \hbar^2}{(k_0^2 + \hbar^2)^2}$. $E < U_0$ bərabərsizliyinin ödənilməsinə baxmayaraq, klassik fizikanın əksinə olaraq, kvant mexanikasında belə zərrəciklərin çəpərdən keçmə ehtimalı sıfırdan fərqli, yəni onlar üçün çəpər qismən şəffaf olur.

Enerjisi $E < U_0$ olan zərrəciklərin çəpərdən keçmə hadisəsi kvant mexanikasında, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, *tunnel effekti* adlanır.

Tunnel effekti

$$\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)l} = 1, \quad (30.33)$$

şərti ödənildikdə kifayət qədər böyük qiymətə malik olur.

Qeyd etmək lazımdır ki, tunnel effekti yalnız mikroəldə müşahidə oluna bilər. Məsələn, $U_0 - E \sim 10^{-11} eB$, zərrəciyin kütləsi 10^{-30} kq (elektron), $l = 10^{-10}$ sm olanda $D \approx e^{-1}$ olur. l üçün 1 m qiymət götürülmüş olsaydı $D \approx 10^{-108}$ olardı. Beləliklə, $U_0 - E$ fərqi və zərrəciyin kütləsi artdıqda D -nin qiyməti azalır və kvant mexanikası klassik mexanikaya keçir. Bu keçid E -nin kifayət qədər böyük qiymətlərində də baş verir, bu halda $D=0$, $R=1$ olur.

Düzbucaqlı potensial çəpər üçün alınan nəticələri şəkil 9-da göstərilən ixtiyari şəkilli potensial çəpər üçün də ümumiləşdirmək olar. Doğrudan da,

həmin çəpəri eni dx olan sonsuz kiçik elementar çəpərlərə bölüb, hər bir elementar çəpərin şəffafliq əmsalı üçün

$$D' = D'_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m(U_0 - E)} dx}$$

yaza bilərik. Bütöv çəpərin şəffafliq əmsalı D , elementar çəpərlərin əmsalları hasilinə bərabər olduğundan,

$$D = D'_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{-a}^a \sqrt{2m(U_0 - E)} dx} \quad (30.34)$$

olar.

Yuxarıda qeyd etdik ki, zərrəciyin enerjisi potensial çəpərin hündürlüyündən kiçik olanda k -nın (30.23) ilə verilmiş ifadəsi kompleks kəmiyyət olur. Həmin şərti

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - U_0$$

kimi yazıb, $\hbar k$ -nın zərrəciyin p impulsuna bərabər olduğunu yadımıza salsaq, yuxarıdakı ifadə

$$\frac{p^2}{2m} = E - U_0$$

şəklini alar. $E < U_0$ olanda bu ifadədən alınır ki, potensial çəpərin daxilində zərrəciyin kinetik enerjisi mənfi qiymət almalıdır. Bu nəticə tunnel effektin «**paradoksu**» adlanır. Lakin burada heç bir paradoks yoxdur, çünki zərrəciyin impulsu həmişə həqiqi kəmiyyətdir, onun kvadratı heç vaxt mənfi ola bilmədiyi kimi zərrəciyin kinetik enerjisi də mənfi qiymətə ala bilməz. Tunnel effektində paradoksun meydana çıxmasına səbəb isə, ona klassik fizika baxımından yanaşmağın nəticəsidir. Doğrudan da, klassik mexanikada potensial və kinetik enerjiləri eyni zamanda qiymət ala bildiyindən sistemin tam enerjisi onların additiv cəminə bərabərdir. Kvant mexanikasında isə tam enerji kinetik və potensial enerjilərin cəmi kimi təyin oluna bilməz, çünki qeyri-müəyyənlik prinsipinə görə sistemin kinetik (impulsu) və potensial (koordinatı) enerjiləri eyni zamanda müəyyən qiymətə malik ola (ölçülə) bilmir. Enerji hissələrə bölünə bilməyən tam bir kəmiyyət kimi özünü aparır.

§31. Düzbucaqlı potensial çuxürdə zərrəciyin hərəkəti

Kütləsi m olan zərrəciyin

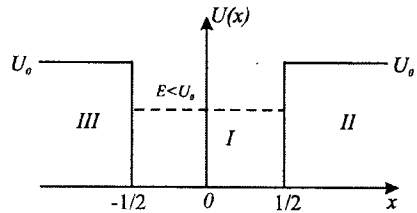
$$U(x) = \begin{cases} U_0, & x < -\frac{l}{2}, x > \frac{l}{2} \\ 0, & -\frac{l}{2} \leq x \leq \frac{l}{2} \end{cases} \quad (31.1)$$

potensial sahədəki hərəkətini tədqiq edək. Potensial çuxurun dibində potensial enerjinin qiyməti enerjinin başlanğıcı kimi götürülmüşdür.

II və III oblastlarda zərrəciyin potensial enerjisi U_0 , I oblastda isə zərrəcik sərbəst hərəkət edir.

Zərrəciyin enerjisi potensial çuxurun U_0 hündürlüyündən böyük olarsa ($E > U_0$), zərrəcik II və III oblastlara keçə bilər. Bu halda hərəkət infinit olur (yəni zərrəciyin hərəkəti bütün $(-\infty \leq x \leq \infty)$ oblastda baş verə bilər) və keçid (şəffaflıq) əmsalı (30.29) ifadəsi ilə verilir.

$E < U_0$ halı üzərində ətraflı dayanaq. Baxılan məsələ $x=0$ nöqtəsinə görə simmetrik olduğundan $x > 0$ şərtini ödəyən I və II oblastlar üçün yazılmış Şredinger tənliklərinin həllində x -i $-x$ ilə əvəz etsək, $x < 0$ şərtini ödəyən oblastlara uyğun həllər alınmış olar. Ona görə də biz burada $x > 0$ halını tədqiq etməklə kifayətlənəcəyik.



Şəkil 10. Düzbucaqlı potensial çuxur.

I və II oblastlar üçün yazılmış (30.6) Şredinger tənliyinin həlləri, uyğun olaraq,

$$\Psi_I(x) = C_1 \cos k_0 x + C_2 \sin k_0 x \quad (31.2)$$

və

$$\Psi_{II}(x) = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x} \quad (31.2')$$

olar ($\Psi_I(x)$ funksiyasında $e^{\pm i k_0 x} = \cos k_0 x \pm i \sin k_0 x$ ifadəsindən istifadə olunmuşdur). burada C_1 , C_2 , A və B ixtiyari sabitlər, k_0 və κ isə uyğun olaraq (30.5) və (30.8) ifadələri ilə verilmişdir. $\Psi_{II}(x)$ dalğa funksiyasının x -in

bütün dəyişmə $0 \leq x \leq \infty$ oblastunda sonlu qalması üçün $B=0$ götürmək lazımdır. Digər tərəfdən, $\Psi_I(x)$ funksiyası daxili cütlüyü müsbət və mənfi olan dalğa funksiyalarının superpozisiyasıdır. Bildiyimiz kimi, belə halda zərəcik ya cüt və ya da tək funksiyalarda təsvir olunan hallarda ola bilər. Buna görə də bu iki halın hər birini ayrılıqda təhlil edək.

a) Fərz edək ki, zərəcik çuxurun daxilində $\Psi_I(x) = C_I \cos k_0 x$ cüt funksiya ilə təsvir olunur. Onda (31.2) ifadələri

$$\Psi_I^{(+)}(x) = C_I \cos k_0 x, \quad (31.3)$$

$$\Psi_{II}(x) = A e^{-\kappa x}. \quad (31.3')$$

şəklinə düşər.

Dalğa funksiyasının və onun birinci tərtib törəməsinin $x=l/2$ nöqtəsində (30.10) kəsilməzlik şərtlərindən

$$C_I \cos \frac{k_0 l}{2} - A e^{-\kappa \frac{l}{2}} = 0 \quad (31.4)$$

$$C_I k_0 \sin \frac{k_0 l}{2} - \kappa A e^{-\kappa \frac{l}{2}} = 0$$

C_I və A sabitlərinin sıfırdan fərqli qiymətə malik olması üçün onların əmsallarından düzəldilmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır:

$$\begin{vmatrix} \cos \frac{k_0 l}{2} & -e^{-\kappa \frac{l}{2}} \\ k_0 \sin k_0 \frac{l}{2} & -\kappa e^{-\kappa \frac{l}{2}} \end{vmatrix} = 0$$

buradan

$$\operatorname{tg} \frac{k_0 l}{2} = -\frac{\kappa}{k_0} = -\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2 k_0^2}} - 1. \quad (31.5)$$

alınır. (31.5)-i kvadrata yüksəldəndən sonra $\cos \frac{k_0 l}{2}$ -yə görə həll etsək,

$$\pm \cos \frac{k_0 l}{2} = \frac{\hbar k_0}{\sqrt{2mU_0}} = \sin \left(\frac{\pi}{2} n - k_0 \frac{l}{2} \right) \quad (31.6)$$

olar, burada $n=1, 3, 5, \dots$ kimi tək tam qiymətlər alır. (31.6)-dan k_0 üçün

$$k_{0n} l = \pi n - 2 \arcsin \frac{\hbar k_0}{\sqrt{2mU_0}} \quad (31.7)$$

tənliyi alınır. (31.7) tənliyi k_0 -ın k_{0n} müsbət qiymətlər spektrini təyin edən transcendent tənlikdir. k_{0n} isə öz növbəsində cütlüyü müsbət olan halların enerjisini təyin edir.

Potensial çuxurun divarları kifayət qədər hündür olduqda ($U_0 \gg E$) $\arcsin \frac{\hbar k_0}{\sqrt{2mU_0}} \approx 0$ və (31.7)-dən

$$k_{0n} = \frac{\pi}{l} n, \quad (31.8)$$

olur. $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ olduğundan, baxılan halda zərrəciyin enerji spektri üçün

$$E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2 k_{0n}^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}, \quad (n=1, 3, 5, \dots) \quad (31.9)$$

alınır.

Çuxurdan kənarda (II oblastda) zərrəciyin hərəkətini təsvir edən $\Psi_{II}(x)$ dalğa funksiyası (31.8) şərtində sıfıra yaxınlaşır, yəni $U_0 \gg E$ olanda zərrəcik II oblastda ola bilmir, I oblastın dalğa funksiyası isə

$$\int_{-l/2}^{l/2} \Psi_l^{(+)}(x) \Psi_l^{+}(x) dx = 1 = C_1^2 \int_{-l/2}^{l/2} \cos^2 k_0 x dx = \frac{l}{2} C_1^2$$

normalanma şərtindən

$$\Psi_{II}^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos n \frac{\pi}{l} x. \quad (31.10)$$

olur.

b) İndi də ikinci xüsusi hala baxaq. Fərz edək ki, çuxurun daxilində zərrəciyin halı $\Psi_I(x) = -\Psi_I(-x) = C_2 \sin k_0 x$ tək dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Onda $x > 0$ obdası üçün

$$\Psi_I^{(-)}(x) = C_2 \sin k_0 x, \quad (31.11)$$

$$\Psi_{II}(x) = A e^{-k_0 x}. \quad (31.11')$$

olar. $x = \frac{l}{2}$ nöqtəsində $\Psi(x)$ və $\Psi'(x)$ -in kəsilməzlik şərtindən, yuxarıdakına oxşar olaraq,

$$\operatorname{ctg} \frac{k_0 l}{2} = -\frac{\hbar}{k_0}. \quad (31.12)$$

alınır. Axırıncı bərabərliyi kvadrata yüksəldib $\sin \frac{k_0 l}{2}$ -yə görə həll etsək,

$$\pm \sin \frac{k_0 l}{2} = \frac{\hbar k_0}{\sqrt{2mU_0}} = \sin \left(\frac{\pi}{2} n - \frac{k_0 l}{2} \right), \quad (31.13)$$

tənliyi alınır, burada $n=2, 4, 6, \dots$ tam cüt qiymətlər alır. Qeyd edək ki, burada $n=0$ ola bilməz, çünki bu halda $\Psi_I^{(-)}(x) = 0$ olur. Buradan k_0 üçün tamamilə (31.7)-in üzərinə düşən transcendent tənlik alınır.

$U_0 \gg E$ şərtində enerji və dalğa funksiyasının spektrləri üçün

$$\Psi_n^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin n \frac{\pi}{\ell} x, \quad (31.14)$$

$$E_n^{(-)} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}, \quad (n = 2, 4, 6, \dots) \quad (31.14')$$

ifadələri alınır.

Beləliklə, potensial çuxurda zərrəciyin hərəkəti ya (31.10), yaxud da (31.14) dalğa funksiyaları ilə təsvir olunur. Zərrəciyin stasionar enerji səviyyələrini təyin edən k_0 -ın spektri isə (31.6) və (31.13) ifadələri ilə təyin olunur. Potensial çuxur kifayət qədər dayaz olduqda ($U_0 \rightarrow 0$) (31.6) tənliyi-

nin həmişə kökü var, (31.13) tənliyinin isə kökü yoxdur ($\sin\alpha$ -nın xassələrindən). Beləliklə, düzbucaqlı potensial çuxurda zərrəcik heç olmasa bir diskret səviyyəyə malik olur. Potensial çuxur dərinləşdikcə k_0 -in köklərinin sayı artır və o, kifayət qədər böyük ola bilər. Sonsuz dərin çuxurda $U_0 \rightarrow \infty$ isə enerji səviyyələrinin qiyməti (31.9) və (31.14) ifadələri ilə verilir.

(31.10) və (31.14) dalğa funksiyalarının ifadələrindən görünür ki, $x = \pm \frac{l}{2}$ olanda, hər iki dalğa funksiyası sıfıra bərabərdir. Deməli, potensial enerji sonsuz olan müstəvilərdə sərhəd şərtləri, bu müstəvilərdə dalğa funksiyasının sıfıra bərabər olması şərtinə gətirir. Başqa sözlə $U(x) \rightarrow \infty$ olanda zərrəcik II oblasta nüfuz edə bilmir: $\Psi_{II}(x) = Ae^{-\alpha x} \rightarrow 0 (x \rightarrow \infty)$. U_0 sonlu olduqda isə zərrəciyin II oblasta nüfuz etmə ehtimalı sıfırdan fərqli olur (α -sonludur). Dalğa funksiyasına daxil olan A əmsalı (31.4) və b) halının onlara uyğun tənliklərində C_1 və C_2 əmsalları ilə təyin olunur.

Bütün bu təhlildən belə bir ümumi nəticə çıxır ki, kvant mexanikasında zərrəcik sonlu fəzada sərbəst hərəkət etdikdə onun hərəkəti kvantlanır-enerji və impulsu diskret qiymətlər alır.

İndi də zərrəciyin $U(x, y, z)$ potensial sahədə üç ölçülü məhdud fəzada hərəkət etdiyi hala baxaq. Belə fəzayı, məsələn, ölçüləri $l_1, l_2, və l_3$ olan paralelepiped qəbul edək. Sahənin $U(x, y, z)$ potensialının paralelepipedin daxilində sıfır, ondan xaricdə sonsuz böyük qiymətə malik olduğunu qəbul edək. Asanlıqla göstərmək olar ki, baxılan halda

$$E \Psi(x, y, z) = \left(\frac{\tilde{p}^2}{2m} + U(x, y, z) \right) \Psi(x, y, z) \quad (31.15)$$

Şredinger tənliyi (30.4) şəkilli üç xətti tənliyə parçalanır. Bu tənliklərin həllindən zərrəciyin dalğa funksiyası

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \Psi_{n_1}(x) \Psi_{n_2}(y) \Psi_{n_3}(z), \quad (31.16)$$

olur, burada

$$\Psi_{n_1}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}} \cos n_1 \frac{\pi}{l_1} x, & n_1 = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{l}} \sin n_1 \frac{\pi}{l_1} x, & n_1 = 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (31.17)$$

$\Psi_{n_2}(y)$ və $\Psi_{n_3}(z)$ funksiyalarının ifadələri (31.17)-dən n_1 -i uyğun olaraq n_2 və n_3 , x -i y və z, l_1 -i isə l_2 və l_3 ilə əvəz etməklə alınır. Zərrəciyin enerjisi

n_1, n_2 və n_3 kvant ədədləri ilə təyin olunur:

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right). \quad (31.18)$$

Paralelepipedin xətti ölçüləri bir-birinə bərabər deyilsə, ($l_1 \neq l_2 \neq l_3$) zərrəciyin kvant halları cırışdır – enerjinin hər bir müəyyən qiymətinə yeganə bir dalğa funksiyası uyğun gəlir. Bu nəticə potensial enerjinin simmetriyası ilə əlaqədardır. Potensial enerji hər bir koordinat oxu ətrafında 180° fırlanmaya görə invariant qalmadığından sistemin halları cırışmamış olur.

Paralelepipedin xətti ölçüləri eyni olduqda, yəni hərəkət ölçüləri $l_1 = l_2 = l_3 = l$ olan kubun daxilində baş verdikdə, enerji

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ml^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (31.19)$$

şəklinə düşür. Bu xüsusi halda zərrəciyin halları cırışmış olur. Doğrudan da, $n_1=5, n_2=1, n_3=1$; $n_1=1, n_2=5, n_3=1$; $n_1=1, n_2=1, n_3=3$ halları enerjinin eyni bir qiymətinə uyğun gəlir. Bundan başqa $n_1=3, n_2=3, n_3=3$ halı da enerjinin həmin qiymətinə uyğundur. Bu əlavə simmetriya sahənin simmetriyası ilə yox, potensial enerjinin koordinatlardan asılılıq xarakterilə əlaqədardır. Belə əlavə cırışma **təsadüfi cırışma** adlanır. Təsadüfi cırışmaya biz gələcəkdə elektronun sferik simmetrik sahədəki (Kulon sahəsindəki) hərəkətini tədqiq etdikdə orbital kvant ədədinə görə alınan cırışma şəklində təsadüf edəcəyik. Bu cür cırışma yalnız Kulon sahəsindəki hərəkətə xasdır və Kulon sahəsindən hər cür kənara çıxmalar l -ə görə cırışmanı aradan götürür (bax §89).

§32. Kvaziklassik yaxınlaşma metodu

Şredinger tənliyinin təxmini həllini tapmaq üçün istifadə olunan metodlardan biri də kvaziklassik metoddur.

Bildiyimiz kimi, klassik mexanika kvant mexanikasının xüsusi bir halıdır. Kvant mexanikasında enerji və impulsun funksiyası olan istənilən ifadə $\hbar \rightarrow 0$ -da uyğun klassik ifadənin üzərinə düşməlidir. Buna görə də dəqiq həll oluna bilməyən kvant tənliyinin təxmini həlli \hbar -in üstlü sırası şəklində axtarılsa, \hbar -in üstünün sıfır bərabər olan həddi, yəqin ki, klassik həllin üzərinə düşər, \hbar -la mütənəb olunan hədlər isə kvant mexanikasının düzəlişi olar. Qeyd edək ki, Şredinger tənliyinin özünün həllini bilavasitə \hbar -in üstlü sırası şəklində axtarmaq mümkün deyil, çünki koordinatların ikinci tərtibli törəməsi olan həddə \hbar -in kvadratı daxil olur. Bu isə onun həlli üçün daha

əlverişli yolun seçilməsini tələb edir.

Kvant mexanikası tənliklərindən klassik mexanika tənliklərinə keçidə həsr olunan §19-da kvant mexanikasının klassik oblastı üçün

$$\Psi(\vec{r}, t) = ae^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r}, t)} \quad (32.1)$$

dalğa funksiyası daxil edilmişdi. $S(\vec{r}, t)$ – təsir funksiyasıdır.

Şredinger tənliyində Ψ -ni (32.1)-dən $S(\vec{r}, t)$ ilə əvəz etdikdə alınmış tənliyi həll etməklə baxılan oblastın dalğa funksiyasını tapmaq olar.

Doğrudun da, a -nı sabit qəbul edib, (32.1)-i

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi + V(r)\Psi, \quad (32.2)$$

Şredinger tənliyində yazanda, alınmış (19.14) ifadəsindən $S(\vec{r}, t)$ üçün

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\mu} (\vec{\nabla} S)^2 + V - \frac{i\hbar}{2\mu} \nabla^2 S = 0 \quad (32.3)$$

tənliyinə gəlirik.

(32.3)-də \hbar -ı sıfıra yaxınlaşdırsaq ($\hbar \rightarrow 0$), məşhur Yakobi-Hamilton tənliyi alınır:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\mu} (\nabla S)^2 + V = 0 \quad \text{və ya} \quad \frac{1}{2\mu} (\vec{\nabla} S)^2 - (E - V) = 0, \quad (32.4)$$

burada $\frac{\partial S}{\partial t} = E$ enerjinin klassik ifadəsidir.

(32.3) və (32.4) tənliklərinin müqayisəsindən görünür ki, (32.3) kvant tənliyində \hbar Plank sabiti ilə mütənasib olan hədd

$$(\vec{\nabla} S)^2 \gg \hbar \nabla^2 S, \quad (32.5)$$

şərti ödənildikdə (32.4) klassik tənlikdən alınan nəticəyə kiçik bir əlavə verir. (32.5) şərti ilə təyin olunan yaxınlaşma *kvaziklassik yaxınlaşma* adlanır.

İmpulsun $\vec{p} = \vec{\nabla} S$ klassik ifadəsindən $\vec{\nabla} \vec{p} = \nabla^2 S$ olur. Onda (32.5) şərti

$$p^2 \gg \hbar \bar{\nabla} \bar{p}$$

və ya bir ölçülü hərəkət üçün

$$\left| \frac{\hbar}{p^2} \frac{dp}{dx} \right| = \left| \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{r} \right) \right| = \left| \frac{d\lambda(x)}{2\pi dx} \right| \ll 1 \quad (32.6)$$

şəklinə düşür, $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$ - de-Broyl dalğa uzunluğudur.

(32.6) şərtindən görünür ki, kvaziklassik yaxınlaşma o zaman tətbiq oluna bilər ki, de-Broyl dalğa uzunluğu ya sıfır və ya da x -ə görə çox zəif dəyişmiş olsun.

(32.4) Yakobi-Hamilton tənliyindən

$$p(x) = \sqrt{2\mu(E - V(x))}, \quad (32.7)$$

olduğundan (32.6) şərti

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp(x)}{dx} \right| = \left| \frac{\hbar\mu}{p^3} \cdot \frac{dV(x)}{dx} \right| = \left| \frac{\mu\hbar F}{p^3} \right| \ll 1 \quad (32.8)$$

kimi də yazıla bilər, $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ - zərrəciyə təsir edən qüvvədir.

(32.7) və (32.8) ifadələrindən görünür ki, impulsun çox kiçik, xüsusən $p=0$ ($E=V(x)$) qiymətində kvaziklassik yaxınlaşma tətbiq oluna bilmir. Bu halda zərrəciyin de-Broyl dalğasının uzunluğu sonsuz böyük olur və onun dalğavari xassələri daha kəskin büruzə verir.

$p \rightarrow 0$ -da (32.8)-in sol tərəfi sonsuzluğa yaxınlaşdığından (32.8) şərti kəskin pozulur. Ona görə də $E=V(x)$ nöqtələri (şəkil 11) potensial çuxurda və ya potensial çəpərdə qayıtma nöqtələri (klassik mənada) adlanır (bax §30 və 31) və bu nöqtələr ətrafında kvaziklassik yaxınlaşmada alınmış həllər xüsusi təhlil tələb edir.

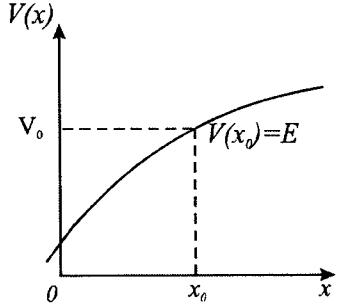
Aşkar edildi ki, (32.3) qeyri-bircins tənliyi həll etmək ona ekvivalent bircins Şredinger tənliyini həll etməkdən xeyli çətindir. Lakin, Ventsel, Kramer və Brüllen S -in \hbar -a görə üstlü sırasında \hbar -ın birinci dərəcəsi ilə mütənəşib olan hədləri saxlamaq dəqiqliyi ilə (32.3) tənliyini həll edə bilmişlər. Onların aldıqları həll kvant mexanikasının bir sıra məsələlərinin tədqiqi üçün yararlı olmuşdur. Müəlliflərin adını daşıyan bu *VKB-metodu*

yalnız bir ölçülü məsələlərin həllinə tətbiq oluna bilər.

(32.3) tənliyinin həlli

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (32.9)$$

sırası şəkildə axtarılır. Bu sıranı (32.3)-də yazandan sonra \hbar -in üstlərinə görə alınan sıranın sıfıra bərabər olması üçün \hbar -in hər bir üstünə uyğun əmsal sıfıra bərabər olmalıdır. Onda



Şəkil 11.

$$(\bar{\nabla} S_0)^2 + 2\mu(V - E) = 0$$

$$\bar{\nabla} S_0 \cdot \bar{\nabla} S_1 + \frac{1}{2} \nabla^2 S_0 = 0 \quad (32.10)$$

$$\bar{\nabla} S_0 \bar{\nabla} S_2 + \frac{1}{2} \nabla^2 S_1 + \frac{1}{2} (\bar{\nabla} S_1)^2 = 0$$

tənliklər sistemi alınır. Bu sistem ardıcıl yaxınlaşma yolu ilə həll olunur. Əvvəlcə birinci tənlikdən S_0 tapılır, onu ikinci tənlikdə yazmaqla S_1 hesablanır və i.a. Bu şəkildə tapılmış S -in ifadəsini (32.1) yazaraq məsələnin həlli tapılır. Bu metodun üstün cəhəti ondan ibarətdir ki, sıfırıncı və birinci yaxınlaşma dəqiqliyi ilə tapılan dalğa funksiyası bir çox hallarda baxılan sistemin dalğa funksiyasına xeyli yaxın olur.

Zərrəciyin hərəkət oblastını E -nin $V(x)$ -dən kiçik və böyük qiymət almasından asılı olaraq iki oblasta bölək. $E=V(x)$ nöqtəsini isə $x=x_0$ ilə işarə edək. Başqa sözlə, $x < x_0$ -da $E > V(x)$, $x > x_0$ -da $E < V(x)$ və $x=x_0$ -da $E=V(x_0)$ götürək.

Əvvəlcə $x < x_0$ oblastında (32.10) sistemini həll edək*. Sistemin birinci tənliyindən (32.7) -ə əsasən

$$\left(\frac{dS_0}{dx}\right)^2 = 2\mu(E - V(x)) = p^2 \text{ və ya } \frac{dS_0}{dx} = \pm p(x)$$

olduğundan, bu tənliyin həlli

*Adətən (32.10) sisteminin həllində sıfırıncı və birinci yaxınlaşma ilə kifayətlənirlər.

$$S_0 = \pm \int_x^{x_0} p(x) dx \quad (32.11)$$

olar. Eynilə ikinci tənlikdə $\frac{dS_0}{dx} = p(x)$ və $\frac{d^2 S_0}{dx^2} = \frac{dp(x)}{dx}$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2p(x)} \frac{dp(x)}{dx}$$

və

$$S_1 = -\frac{1}{2} \ln p(x) + \ln C$$

alınar. Beləliklə, bu yaxınlaşmada

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1(x) = \pm \int_x^{x_0} p(x) dx + i\hbar \ln \sqrt{p(x)} + C$$

S -in bu qiymətini (32.1) -də yazıb, $e^{-\ln \sqrt{p}} = \frac{1}{\sqrt{p}}$ olduğunu nəzərə alsaq,

$x < x_0$ oblastında $\Psi(x)$ dalğa funksiyası üçün

$$\Psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x) dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x) dx} \quad (32.12)$$

ifadəsi alınır.

Zərrəciyin koordinatının $x, x+dx$ intervalında qiymət alma ehtimalı

$$|\Psi(x)|^2 dx = \frac{|C_1|^2}{p(x)} dx \quad (32.13)$$

onun impulsu ilə tərs mütənəsbdir, yəni impulsu və ya sürəti kiçik olan nöqtələrdə zərrəciyin müşahidə olunma ehtimalı böyükdür. Deməli, bu nöqtələrdə zərrəcik daha yavaş hərəkət edir. Lakin $x=x_0$ nöqtəsində $p = \sqrt{2\mu(E - V(x_0))} = 0$ olduğundan dalğa funksiyası sonsuzluğa yaxınlaşır, yəni kvaziklassik yaxınlaşma burada öz mənasını itirir. Bu nöqtələrdə

klassik zərrəcik dayanır və əks istiqamətdə hərəkət etməyə başlayır. Ona görə də bu nöqtələr qayıtma nöqtələri adlanır. Qayıtma nöqtələri klassik hərəkət mümkün olan oblastı klassik hərəkət mümkün olmayan oblastdan ayırır.

Doğrudan da, $x > x_0$ oblastında zərrəciyin E enerjisi $V(x)$ potensial enerjiden kiçik olduğundan $p(x)$ klassik impulsu xəyalı qiymət alır:

$$p = \pm \sqrt{2\mu(E - V(x))} = \pm i|p(x)|.$$

Bu halda (32.12) dalğa funksiyası

$$\Psi(x) = \frac{C_1'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x)| dx} + \frac{C_2'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x)| dx} \quad (32.14)$$

şəklini alır. x böyüdükdə bu həllərdən birincisi azalan, ikincisi isə artan funksiya olur.

(32.12) və (32.14) həlləri Şredinger tənliyinin klassik oblast üçün təxmini həlləridir. (32.12) həllin x -ə görə dəyişmə xarakteri zərrəciyin potensial çuxurda hərəkətini, (32.14) həlli isə potensial çəpərdən keçdiyi hərəkəti təsvir edən dalğa funksiyasının dəyişmə xarakterini xatırladır. Beləliklə, potensial enerjinin müxtəlif şəkllə malik olması funksiyanın dəyişmə xarakterinə təsir etmir, o, yalnız E ilə $V(x)$ -in fərqiindən asılı olur.

(32.12) və (32.14) funksiyaları eyni bir (32.2) tənliyinin $x < x_0$ və $x > x_0$ oblastlarına uyğun olduğundan, yəqin ki, C_1 , C_2 və C_1' , C_2' sabitləri arasında da müəyyən əlaqə olmalıdır. Bu əlaqə isə yalnız $\Psi(x)$ funksiyalarının və onların birinci törəmələrinin bu oblastların $x = x_0$ sərhəddində bir-birinə bərabər olması şərtlərindən tapıla bilər. Lakin həmin funksiyalar $p^2(x)$ -in kifayət qədər böyük qiymətlərində, yəni $x = x_0$ nöqtəsindən xeyli aralı oblastlarda tənliyin yaxşı təxmini həlli olur.

$x = x_0$ nöqtəsinin yaxın ətrafında isə $p^2(x) \rightarrow 0$ yaxınlaşdığından $\frac{1}{\sqrt{p(x)}}$

vuruğu hesabına hər iki həll sonsuzluğa yaxınlaşır və öz fiziki mahiyyətini itirir. Ona görə də C_1 , C_2 və C_1' , C_2' sabitləri arasındakı əlaqəni müəyyən etmək üçün Şredinger tənliyinin $x = x_0$ nöqtəsinin yaxın ətrafında kifayət qədər dəqiq həllini tapıb, onun $x \leq x_0$ -da (32.12), $x \geq x_0$ -da isə (32.14) həllinin üzərinə düşdüyünü göstərmək lazımdır.

Bu, $V(x)$ potensial funksiyasının $x = x_0$ nöqtəsinin yaxın ətrafında ($x - x_0$) fərqiğin üstlərinə görə sıraya ayırmaqla əldə edilir:

$$V(x) = V(x_0) + (x - x_0) \frac{\partial V(x)}{\partial x} \Big|_{x=x_0} + \dots$$

$V(x)$ -in bu ifadəsini (32.2) tənliyində yazıb, sıranın birinci iki həddi ilə kifayətlənsək,

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + [E - V(x_0) - (x - x_0)V'(x_0)]\Psi(x) = 0 \quad (32.15)$$

alınar. Burada $E = V(x_0)$ olduğunu nəzərə aldıqdan sonra $F = -V' = e\mathcal{E}$ və $-x_0 V'(x_0) = E$ götürsək, (32.15) tənliyi zərrəciyin bircins elektrik sahəsində hərəkətini təsvir edən (bax §45).

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + e\mathcal{E}x\Psi(x) = E\Psi(x)$$

tənliyinin üzərinə düşür (bax (45.2) tənliyi).

§45 göstərilir ki, bu tənliyin Eyri funksiyaları ilə ifadə olunmuş həlli x_0 nöqtəsinin sağında həmin §-in (45.10), solunda isə (45.12) funksiyaları üzərinə düşür:

$$\frac{A}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\xi z + \frac{z^3}{3}\right) dz = \begin{cases} \frac{A}{2\xi^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} & \xi \gg 1, (x > x_0) \\ \frac{A}{|\xi|^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right], & \xi \ll 1, (x < x_0) \end{cases} \quad (32.16)$$

burada

$$\xi = \left(\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(x - \frac{E}{e\mathcal{E}}\right).$$

(32.12) və (32.14) həllərinin ξ -nin uyğun qiymətlərində (32.16) həllərinin üzərinə düşdüyünü göstərmək üçün $|p(x)|$ və $p(x)$ funksiyalarını $x = x_0 = \frac{E}{e\mathcal{E}}$ nöqtəsi yaxınlığında $(x - x_0)$ -in üstlərinə görə siraya ayıraq.

Əvvəlcə (32.14)-ün azalan həllinin $\xi \gg 1$ -də və yaxud $x > x_0$ oblastında (32.16)-dakı birinci həllin üzərinə düşdüyünü göstərək. Bu halda (32.14)-

dəki artan həllin kvant mexanikasında fiziki mahiyyəti olmadığını nəzərə alsaq, $C_2=0$ götürülməlidir. $x=x_0$ nöqtəsinin yaxın ətrafında $V(x_0)x_0=e\mathcal{E}$ və $x_0 = \frac{E}{e\mathcal{E}}$ olduğundan

$$|p(x)| = \sqrt{2\mu(V(x) - E)} \approx \sqrt{2\mu e\mathcal{E}(x - x_0)} = (2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/3} \xi^{1/2}$$

olur. Onda

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx' \approx \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2} (x' - x_0)} dx' = \int_0^\xi \xi^{1/2} d\xi = \frac{2}{3} \xi^{3/2}.$$

Bunu (32.14)-də yazanda

$$\Psi(x) = \frac{C_1'}{(2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/6} \xi^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}}, \quad \xi \gg 1 \quad (32.17)$$

alınır. (32.17)-nin (32.16) ilə müqayisəsindən

$$C_2' = 0, \quad C_1' = (2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/6} \frac{A}{2}$$

olmalıdır.

Tənliyin $x < x_0$ oblastuna davamı olan (32.12) həllinin $\xi \ll -1$ -də (32.16)-dəki ikinci həllin üzərinə düşdüyünü göstərerək.

$$p(x) = \sqrt{2\mu(E - V(x))} \approx \sqrt{2\mu e\mathcal{E}(x - x_0)} = (2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/3} \xi^{1/2}$$

olduğundan

$$\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_0} p(x') dx' \approx - \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2} (x' - x_0)} dx' = - \int_0^{|\xi|} \xi^{1/2} d\xi = -\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \quad (32.18)$$

olur. Bunu (32.12)-də yazanda

$$\Psi(x) = \frac{1}{(2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/6} |\xi|^{1/4}} \left[C_1 e^{i\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}} + C_2 e^{-i\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}} \right] \quad (32.19)$$

alınır. Bunun (32.16)-daki ikinci həll ilə müqayisəsindən $\xi \ll -1$ və ya $x < x_0$ -da

$$C_1 = (2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/6} \frac{A}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} = C_1' e^{-i\frac{\pi}{4}} \quad (32.20)$$

$$C_2 = -(2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/6} \frac{A}{2i} e^{i\frac{\pi}{4}} = C_1' e^{i\frac{\pi}{4}}$$

olur. (32.18) (32.20) bərabərliklərindən

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] \quad \xi \ll -1$$

və

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'} \quad \xi \gg 1 \quad (32.21)$$

həllərinin (32.16) həlləri üzərinə düşdüyü alınır.

Eyni şəkildə göstərmək olar ki, $x > x_0$ oblastında (32.14) eksponensial artan

$$\Psi(x) = \frac{C_2'}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x |p(x')| dx'} \quad (32.22)$$

həllinin $x < x_0$ oblastına davamı

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], \quad \xi \ll -1 \quad (32.22')$$

olur.

Kvaziklassik yaxınlaşmanın tətbiqinə bir misal olaraq, ixtiyari şəkilli potensial çəpərdən zərrəciklərin keçməsinə (tunnel effekti) baxaq.

§33. İxtiyari şəkilli potensial çəpərdən zərrəciyin keçməsi (tunnel effekti)

Fərz edək ki, E enerjili zərrəcik $V(x)$ potensial çəpərin (bax şəkil 6) sahəsində x oxunun müsbət istiqamətində hərəkət edir. E enerjisi $V(x)$ -in maksimum qiymətindən kiçikdirsə, belə hərəkətdə iki qayıtma nöqtəsi meydana çıxdığından hərəkət sahəsi I, II və III kimi üç oblasta ayrılır.

$$-\infty < x < x_1 \text{ və } x_2 < x < \infty$$

intervallarına uyğun I və III oblastlarda $E > V(x)$, $x_1 \leq x \leq x_2$ -yə uyğun oblastda isə $E < V(x)$ olur. x_1 və x_2 qayıtma nöqtələrində isə $V(x_1) = V(x_2) = E$ şərti ödənilir.

x -in $-\infty < x < x_1$ dəyişmə intervalına uyğun I oblastda düşən və çəpərdən əks olunan iki dalğa yayılır. Bu oblastda $E > V(x)$ və $\xi \ll -1$ olduğundan Şredinger tənliyinin I oblast üçün həlli, kvaziklassik yaxınlaşma metodu ilə alınan və $\xi \ll -1$ -ə uyğun (32.22) və (32.22') həllərinin superpozisiyası olar:

$$\Psi_I(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{B}{\sqrt{p}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (33.1)$$

Burada Eyler düsturlarının köməyi ilə $\Psi_I(x)$ -i eksponensial funksiyalarla ifadə etsək:

$$\Psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} \left(\frac{B}{2} - \frac{A}{2i} \right) e^{-i \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right]} + \frac{1}{\sqrt{p}} \left(\frac{B}{2} + \frac{A}{2i} \right) e^{i \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right]} \quad (33.2)$$

olar. Bu və ya başqa oblastda zərrəciyin olma ehtimalı bizi maraqlandırmır, çünki çəpərin şəffaflıq və əksətmə əmsalları uyğun oblastlarda zərrəciklər sellərinin nisbəti ilə təyin olunur (bax (30.15) və (30.20)). Bu səbəbdən düşən dalğanın amplitudunu vahid götürmək olar:

$$\frac{B}{2} - \frac{A}{2i} = 1; \quad \frac{B}{2} + \frac{A}{2i} = B_1 \quad (33.3)$$

Burada B_1 -yeni sabitdir. (33.3)-dən

$$A = i(B_1 - 1), B = B_1 + 1 \quad (33.4)$$

və

$$\Psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-i \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{\eta} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right]} + \frac{B_1}{\sqrt{p}} e^{i \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{\eta} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right]} \quad (33.4')$$

II oblastda $E < V(x)$ və çəpərin eni sonlu olduğundan, bu oblastda Şredin-ger tənliyinin həlli $\xi \gg 1$ şərtinə uyğun həm eksponensial azalan (32.21) və həm də eksponensial artan (32.22) həllərinin superpozisiyası olmalıdır:

$$\Psi_{II}(x) = \frac{A}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\eta}^x |p(x')| dx'} + \frac{B}{2} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{\eta}^x |p(x')| dx'}$$

$x = x_1$ nöqtəsində dalğa funksiyanın kəsilməzliyi şərtinə əsasən A və B üçün (33.4) ilə verilmiş qiymətlər saxlana bilər. Onda

$$\Psi_{II}(x) = \frac{i(B_1 - 1)}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\eta}^x |p(x')| dx'} + \frac{B_1 + 1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{\eta}^x |p(x')| dx'}, \quad (33.5)$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx' + \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \alpha$$

bərabərliyindən

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx' = \alpha - \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x')| dx' = \alpha - \frac{1}{\hbar} \left| \int_{x_2}^x p(x') dx' \right|$$

olduğunu nəzərə alsaq, II oblastdakı (33.5) həlli

$$\Psi_{II}(x) = \frac{i(B_1 - 1)}{2\sqrt{|p|}} e^{-\alpha} e^{\frac{1}{h} \int_{x_2}^x p(x') dx'} + \frac{B_1 + 1}{\sqrt{p}} e^{\alpha} e^{-\frac{1}{h} \int_{x_2}^x p(x') dx'}$$

şəklinə düşər.

III oblastda dalğa yalnız x oxunun müsbət istiqamətində yayılır, onda qayıdan dalğanın amplitudu isə sıfır olur. Ona görə də bu oblastda Şredin-ger tənliyinin həlli

$$\Psi_{III}(x) = \frac{A_3}{\sqrt{p}} e^{i \left[\frac{1}{h} \int_{x_2}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right]} \quad (33.6)$$

olar. Yəqin ki, bu dalğanın amplitudu ixtiyari ola bilməz, çünki (33.6) həlli II oblasta uyğun (33.5) həllərinin III oblasta analitik davamı olmalıdır.

$e^{i\frac{\pi}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)$ olduğundan (33.5) və (33.6) həllərinin əmsalları arasında

$$A_3 = \frac{i}{2}(B_1 - 1)e^{-\alpha}, \quad (33.7)$$

$$i \frac{A_3}{2} = (B_1 + 1)e^{\alpha}$$

bərabərlikləri ödənilməlidir. (33.7)-dən

$$A_3 = \frac{1}{i(e^{\alpha} + \frac{1}{4}e^{-\alpha})}, \quad B_1 = \frac{\frac{1}{4}e^{-\alpha} - e^{\alpha}}{e^{\alpha} + \frac{1}{4}e^{-\alpha}} \quad (33.8)$$

olur.

Düşən dalğanın amplitudu vahid götürüldüyündən potensial çəpərin şəffafliq əmsalı §30-a əsasən

$$D = |A_3|^2 = \frac{1}{(e^{\alpha} + \frac{1}{4}e^{-\alpha})^2} \quad (33.9)$$

bərabərdir. Praktikada adətən təsadüf olunan $\alpha \gg 1$ hallarda çəpərin şəffaf-

lıq əmsalı üçün

$$D \approx e^{-2\alpha} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx} = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu(V(x)-E)} dx} \quad (33.10)$$

ifadəsi alınır. Göründüyü kimi, bu ifadə kvant nəzəriyyəsində alınan (30.34) ifadəsi üzərinə düşür.

Eyni şəkildə çəpərdən əksətmə əmsalı §30-a əsasən

$$R = |B_1|^2 = \left(\frac{\frac{1}{4}e^{-\alpha} - e^{\alpha}}{e^{\alpha} + \frac{1}{4}e^{-\alpha}} \right)^2. \quad (33.11)$$

yuxarıdakı yaxınlaşmada

$$R \approx 1 - e^{-2\alpha} \quad (33.12)$$

olar. (33.10) və (33.12) ifadələrindən görünür ki, $\alpha \gg 1$ -də çəpərin şəffaflıq əmsalı ilə əksətmə əmsalının cəmi təxminən vahidə bərabərdir:

$$D + R \approx 1. \quad (33.13)$$

α -nı sonsuzluğa və \hbar -ı sıfıra yaxınlaşdırmaqla ($\alpha \rightarrow \infty$, $\hbar \rightarrow 0$) tam klassik oblasta keçsək, çəpərin D şəffaflıq əmsalı sıfıra, əksətmə əmsalı isə vahidə yaxınlaşır, yəni $E < V(x)$ enerjili zərrəciklər çəpərdən keçə bilmir.

§34. Soyuq emissiya

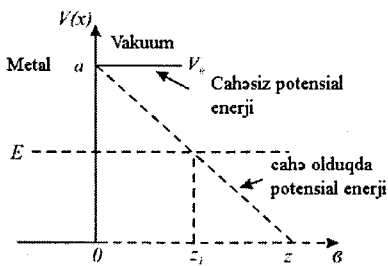
(33.10)-dan istifadə edərək metaldan soyuq emissiya cərəyanını hesablayaq.

Tunnel effekti nəzəriyyəsi nüvə fizikasında radioaktivliyin və metalların müxtəlif xassələrinin izahı və başa düşülməsi istiqamətində mühüm rol oynamışdır. Soyuq emissiya hadisəsi – elektrik sahəsi vasitəsilə metaldan elektronların qoparılması – belə hadisələr sırasındandır.

§44-dən göründüyü kimi, elektronlara metalın daxilində periodu kristal qəfəsin perioduna bərabər periodik sahə təsir edir. Lakin metalların yüksək elektrik keçiriciliyinə malik olması və başqa hadisələr metalın daxilində elektronların hərəkətinin güya hər hansı sabit sahənin təsiri altında baş veriyinə dəlalət edir.

Bildiyimiz kimi, ixtiyari kəmiyyətin sabit qiyməti, onun hesabat baş-

lanğıcı mənasında, sıfır qəbul edilə bilər. Bu mənada metalın daxilində elektronun potensial enerjisini sıfıra bərabər götürmək və elektronların metalın kristal qəfəsi daxilində sərbəst hərəkət etdiyini qəbul etmək olar. Elektronlar metalın kənarına yaxınlaşanda isə kristal qəfəsin düyün nöqtələrində yerləşən müsbət ionların yaratdığı cəzətmə qüvvəsinə məruz qalır və bu qüvvə onların metaldan kənara çıxmasına mane olur. Elektronu metaldan qoparmaq üçün ona müəyyən qədər enerjinin verilməsi lazım gəlir və bu enerji elektronun *çıxış işi* adlanır. Beləliklə, metalın daxilində elektronun potensial enerjisi $V(x)=0$, kənarında isə sabit qiymətə ($V(x)=V_0$) bərabər götürmək olar (şəkil 12).



Şəkil 12. Elektronların metaldan soyuq emissiyası.

Metalın daxilindəki elektron qazını qızdırmaqla, elektronların kinetik enerjisini artırırsa, enerjisi potensial çəpərin enerjisindən (çıxış işindən) böyük olan elektronlar metaldan kənara istiqamətlənmiş cərəyan yaradar. Termoemissiya adlanan bu hadisə elektron lampalarında elektron dəstələrini almaq üçün istifadə olunur. Lakin alçaq temperaturalarda (hətta $T=0$ mütləq sıfırda belə) metalın səthinə yönəlmiş sabit elektrik sahəsi vasitəsilə metaldan kənara yönəlmiş

cərəyan almaq olar.

Metalın səthinə yönəlmiş \vec{E} sabit elektrik sahəsinin hesabına elektronun V_0 potensial enerjisinə $-e\mathcal{E}z$ potensial enerji əlavə olunur (e -elektronun yükü)

$$\begin{aligned} V(z) &= 0, & z < 0, \\ V(z) &= V_0 - e\mathcal{E}z, & z > 0. \end{aligned} \quad (34.1)$$

Bu halda potensial enerjinin z -dən asılılığı OaZ əyrisi ilə səciyyələnir (şəkil 12). Şəkildən görünür ki, elektrik sahəsinin təsiri altında sonlu enə malik potensial çəpər yaranır. Klassik mexanikaya görə yalnız enerjisi $E > V_0$ olan elektronlar metaldan kənara çıxmaqla bilər. Lakin belə elektronların sayı çox cüzi olduğundan xarici elektrik sahəsi hiss oluna biləcək cərəyan yarıda bilmir. Kvant mexanikasına görə isə tunnel effekti hesabına sonlu enə malik çəpərdən elektronlar keçə bilər və onun şəffaflıq əmsalı

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{z_1} \sqrt{2\mu(V(z)-E)} dz} \quad (34.2)$$

olar.

Şəkildən görünür ki, potensial çəpər iki qayıtma nöqtəsinə malikdir. Onlardan biri $z_1=0$, ikincisi isə $z=z_1$ nöqtəsindədir və bu nöqtənin vəziyyəti

$$V_0 - e\mathcal{E}z_1 = E$$

şərtindən tapılır:

$$z_1 = \frac{V_0 - E}{e\mathcal{E}}, \quad (34.3)$$

burada E – elektronun sürətinin z oxu istiqamətində yönəlmiş komponentinə uyğun enerji

$$E = \frac{\mu v_z^2}{2} = \frac{p_z^2}{2\mu},$$

z_1 isə çəpərin enidir.

(34.2)-də $V(z)$ -i onun (34.1)-dəki qiyməti ilə əvəz etsək,

$$D = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{z_1} \sqrt{2\mu(V_0 - E - e\mathcal{E}z)} dz}$$

olar.

Elektronların soyuq emissiya cərəyanı sıxlığı

$$j = e \int v_z D dn \quad (34.4)$$

düsturu ilə hesablanır, burada dn – impulsu impuls fəzasının dp_x, dp_y, dp_z elementində qiymət alan vahid həcmdəki elektronların sayıdır. Elektronların metalın daxilindəki hərəkəti potensial çuxurdakı hərəkətə bir misal olduğundan, burada zərrəciyin impulsu diskret dəyişər (bax (11.20))

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_1, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_2, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_3. \quad (34.5)$$

n_1, n_2, n_3 – tam müsbət ədədlər, L – hərəkət baş verən fəzanın xətti

ölçüsüdür.
(34.5)-dən

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{(2\pi\hbar)^3}{L^3} \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3$$

və ya

$$\Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \Delta n = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \quad (34.6)$$

olur.

Elektronlar Fermi–Dirak statistikasına tabe olduğundan metalın daxilindəki elektron qazı Fermi qaz adlanır. Qazın əsas halda olduğunu fərz etsək, elektronlar, Pauli prinsipinə görə, N aşağı enerji səviyyəsini tutmuş olar (N –elektronların ümumi sayı). Tutulmuş səviyyələrdən ən yüksəyinin enerjisini ε ilə işarə etsək, bütün elektronlar impuls fəzasında $\frac{p^2}{2\mu} = \varepsilon$ və ya

$p = \sqrt{2\mu\varepsilon}$ radiuslu sferanın (Fermi səthinin) daxilində yerləşər. Fəzanın ölçülərini kifayət qədər böyük, $L^3=1$ qəbul edib, impulsu $dp_x dp_y dp_z$ fəzasında qiymət alan və koordinat oxlarının hər iki istiqamətində hərəkət edən elektronların

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \leq 2\mu\varepsilon \quad (34.7)$$

sferası daxilindəki sayı

$$dn = 2 \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3},$$

sferanın kənarında isə $dn=0$ olar.

İmpuls fəzasında silindrik koordinatlara keçək:

$$p_x = \rho \cos \varphi, \quad p_y = \rho \sin \varphi, \quad p_z = p_z.$$

Onda (34.7) bərabərsizliyi

$$\rho^2 + p_z^2 \leq 2\mu\varepsilon \quad (34.8)$$

və həcm elementi $dp_x dp_y dp_z = \rho d\rho d\varphi dp_z$ olduğundan (34.4) inteqralı

$$j = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi \int_0^{\sqrt{2\mu\varepsilon}} dp_z \int_0^{\sqrt{2\mu\varepsilon - p_z^2}} \rho\left(\frac{p_z}{\mu}\right) D d\rho \quad (34.9)$$

olar. Burada

$$\xi = \varepsilon - E, \quad \left(E = \frac{p_z^2}{2\mu} \right)$$

kimi yeni dəyişən daxil edək. Bu halda (34.9) inteqralı sadələşir:

$$j = \frac{4\pi e\mu}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\varepsilon \xi D(\xi) d\xi. \quad (34.10)$$

Çəpərin şəffaflıq əmsalı isə

$$D(\xi) = e^{-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar e \mathcal{E}} (V_0 - \varepsilon + \xi)^{3/2}} \quad (34.11)$$

olur.

(34.11)-dən görünür ki, $\xi=0$ -da və ya elektronun enerjisinin maksimum ε qiymətində $D(\xi)$ maksimum olur, ξ artdıqca $D(\xi)$ kəskin azalır. Deməli, (34.11)-dəki inteqral yalnız kiçik enerjili elektronlar üçün hiss olunacaq qiymətə malik olur. Bu səbəbdən $(V_0 - \varepsilon + \xi)^{3/2}$ vuruğunu ξ -nin üstlərinə görə sıraya ayırıb, birinci iki hədlə kifayətlənmək olar:

$$(V_0 - \varepsilon + \xi)^{3/2} = (V_0 - \varepsilon)^{3/2} + \frac{3}{2} (V_0 - \varepsilon)^{1/2} \xi + \dots$$

Burada

$$2 \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar e \mathcal{E}} (V_0 - \varepsilon)^{3/2} = \alpha$$

qəbul edilsə,

$$D(\xi) = e^{-\frac{2}{3}\alpha} \cdot e^{-\frac{\alpha\xi}{V_0 - \varepsilon}}$$

olar. Bunu (34.10)-da yazsaq,

$$j = \frac{4\pi e\mu}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{3}{2}\alpha} \int_0^{\frac{\alpha}{V_0 - \varepsilon}} \xi e^{-\frac{\alpha\xi}{V_0 - \varepsilon}} d\xi$$

alınar. ξ böyüdükcə inteqral altı ifadə kəskin azaldığından inteqralın yuxarı sərhəddini, böyük xəta buraxmadan, sonsuz götürmək olar. Onda

$$j = \frac{4\pi e\mu}{2\pi^2\hbar^3} \frac{(V_0 - \varepsilon)^2}{\alpha^2} e^{-\frac{2}{3}\alpha},$$

yaxud j cərəyan sıxlığı

$$j = \frac{2\mu e(V_0 - \varepsilon)^2}{9\pi^2\hbar^3} \frac{\varepsilon_0^2}{\mathcal{E}^2} e^{-\frac{\varepsilon_0}{\mathcal{E}}} \quad (34.12)$$

kimi də yazıla bilər. Burada $\varepsilon_0 = \frac{4\sqrt{2\mu}(V_0 - \varepsilon)^{3/2}}{3\hbar e}$.

Cərəyan sıxlığının xarici sahənin \mathcal{E} intensivliyindən bu cür asılılığı təcrübədə tam təsdiq olunur və təcrübəyə uyğun olaraq buradan çıxır ki, $\mathcal{E} \sim 10^6$ V/sm olduqda, soyuq emissiya müşahidə oluna bilər.

§35. Xətti harmonik ossilyator (koordinat təsviri)

Klassik fizikada harmonik ossilyator dedikdə zərrəciyin yerdəyişməsi ilə mütənasib olan*

$$F = -kx \quad (35.1)$$

qüvvənin təsiri altında hərəkət başa düşülür, burada k – elastiklik əmsalı, F isə kvazielastiklik qüvvəsi adlanır. Bu qüvvənin təsiri altında kütləsi m olan zərrəciyin hərəkətini təsvir edən klassik tənlik (Nyuton tənliyi)

* Burada bütün mülahizələr xətti ossilyator üzərində qurulacaqdır. Üçölçülü ossilyatorun nəzəriyyəsi isə §43-də verilir.

$$m\ddot{x} = -kx \quad (35.2)$$

olar. $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ götürsək, (35.2) tənliyi

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad (35.2')$$

şəklinə düşür. Onun həlli

$$x = a \cos \omega t. \quad (35.3)$$

Burada a və ω zamandan asılı olmayan sabit kəmiyyətlərdir. (35.3) ifadəsi zərrəciyin $x=0$ tarazlıq nöqtəsi (koordinat başlanğıcı) ətrafında baş verən və amplitudu a , tezliyi ω olan rəqsi hərəkəti təsvir edir. Belə rəqslərə harmonik rəqslər deyilir. Deməli, hərəkəti müddətində amplitudu və tezliyi sabit qalmaq şərti ilə rəqsi hərəkət edən ixtiyari sistemə harmonik ossilyator kimi baxmaq olar.

Sistemin potensial funksiyası (enerjisi) ilə uyğun təsir qüvvəsi arasındakı

$$F = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \quad (35.4)$$

münasibətdən

$$U(x) = -\int_0^x F dx = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (35.5)$$

alınar.

Deməli, klassik fizikada xətti harmonik ossilyatorun

$$H = K(r) + U(x)$$

Hamilton funksiyası

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (35.6)$$

şəklində olur.

Qeyd edək ki, ixtiyari qüvvənin təsiri altında yaranan rəqsi hərəkətin $U(x)$ potensial funksiyasının aşkar analitik ifadəsi həmişə məlum olmur və o, (35.5) şəklində göstərilə bilmir. Yalnız xüsusi bir halda, məsələn, $x=0$ tarazlıq nöqtəsi ətrafında baş verən rəqsi hərəkətin amplitudu kifayət qədər kiçik qaldıqda $U(x)$ -in aşkar şəklini tapmaq olur. Bu halda $U(x)$ funksiyasını $x=0$ nöqtəsi ətrafında x -in üstlərinə görə sıraya ayırırsaq,

$$U(x) = U(0) + \frac{x}{1!}U'(0) + \frac{x^2}{2!}U''(0) + \frac{x^3}{3!}U'''(0) + \frac{x^4}{4!}U^{(4)}(0) + \dots \quad (35.7)$$

$U(x)$ funksiyasının $x=0$ tarazlıq nöqtəsindəki $U(0)$ qiymətini onun hesablamaya başlanğıcı götürüb, həmin nöqtədə $U(x)$ -in minimum qiymət aldığı fərz etsək, $U(0)=0$ və $U'(x)=0$ olar. $U'''(0)$ sabiti əvəzində $U''(0) = m\omega_0^2$ kimi yeni ω_0 sabitini daxil etdikdə

$$U(x) = \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 + \lambda x^3 + \beta x^4 + \dots \quad (35.8)$$

olar. Burada m -sistemin (zərrəciyin) kütləsi rolunu oynayır. $\lambda = \frac{1}{3!}U'''(0)$

və $\beta = \frac{1}{4!}U^{(4)}(0)$ götürülmüşdür. (35.8) ifadəsinin sağ tərəfində birinci

həddən sonra gələn hədləri nəzərə almamaq mümkün olduğu hallarda (35.8) ifadəsi (35.5)-in üzərinə düşür və sistemin rəqsləri harmonik rəqslər olur, sistemin özü isə harmonik ossilyator adlanır. Əks halda isə sistemin rəqsləri qeyri-harmonik və ya anharmonik olur, belə sistem isə anharmonik ossilyator adlanır. Biz burada xətti harmonik ossilyatorun kvant nəzəriyyəsi üzərində dayanacağıq. Anharmonik ossilyatorun kvant nəzəriyyəsi isə §48-də təhlil olunacaqdır.

Harmonik ossilyatorun Şredinger tənliyini yazmaq üçün onun Hamilton operatorunu tapmaq lazımdır. Bunun üçün uyğunluq prinsipindən istifadə edək. Onda (35.6)-dan Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \tilde{x}^2}{2}. \quad (35.9)$$

Əlbəttə, kvant mexanikasında ossilyatorun klassik tərifini öz mənasını itirir. Qeyri-müəyyənlik prinsipinə görə sistemin kinetik və potensial enerjilərini eyni zamanda ölçmək mümkün deyildir. Başqa sözlə, kvant mexaniki sistemin koordinatları və zaman onun dalğa funksiyasına arqumentlər kimi

daxil olan dəyişənlərdir. Ona görə də kvant mexanikasındakı Hamilton operatoru (35.9) şəklində verilən istənilən kvant mexaniki sistem harmonik ossilyator adlanır.

Kvant nəzəriyyəsində harmonik ossilyatorun tədqiqi böyük əhəmiyyətə malikdir. Kvant rəqsləri baş verən sistemlərin hamısında, kvant elektrodinamikasında, molekullar nəzəriyyəsində, bərk cisim fizikasında, tarazlıqdakı şüalanma nəzəriyyəsində və sahənin kvant nəzəriyyəsində (35.9) ifadəsi ilə verilmiş Hamilton operatoruna təsadüf olunur. Digər tərəfdən, harmonik ossilyatora aid problemlər kvant nəzəriyyəsinin əsas prinsiplərini və kvant formalizminin mahiyyətini olduqca aydın şəkildə nümayiş etdirməyə imkan verir.

Xətti ossilyatorun kvant nəzəriyyəsi unitar təsvirlərdən hər hansı birinin əsasında qurula bilər. Lakin yuxarıda qeyd edildiyi kimi, müxtəlif unitar təsvirlərin ekvivalent olduğunu göstərmək məqsədi ilə bu məsələni bir neçə təsvirdə həll edəcəyik. Əvvəlcə koordinat təsvirindən başlayaq.

x -təsvirində impuls operatoru $\tilde{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, koordinat operatoru isə özünə bərabər olur. Onda ossilyatorun (35.9) Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (35.9')$$

şəklinə düşür. Xətti ossilyatorun $U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ potensial enerjisi $x = \pm\infty$ nöqtəsində müsbət sonsuzluğa yaxınlaşdığından (şəkil 13-ə bax), ossilyatorun hərəkəti, tam enerjisi sonlu olan sərbəst zərrəciyin sonsuz hündür divarlara malik potensial çuxurdakı hərəkətini xatırladır. Deməli, xətti ossilyatorun hərəkəti finit və enerji spektri diskret olmalıdır.

Ossilyatorun Hamiltonianı aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından onun, kvant halları stasionar hallar olar. Stasionar halların Şredinger tənliyi

$$\tilde{H}\Psi = E\Psi \quad \text{və ya} \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi = 0 \quad (35.10)$$

olar. Burada

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = \lambda, \quad \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{x_o^2}, \quad \xi = \frac{x}{x_o}, \quad x_o = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (35.11)$$

kimi yeni dəyişən daxil etsək, (35.10) tənliyi

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi(\xi) = 0 \quad (35.12)$$

şəklini alar.

Kvant mexanikasında (35.10) və ya (35.12) tənliyini həll etdikdə baxılan sistemin Hamilton operatorunun məxsusi funksiyalar çoxluğunu (spektrini) və məxsusi qiymətlər spektrini tapmaq məqsədi qoyulur. Digər tərəfdən \tilde{H} -in məxsusi funksiyaları argumentinin bütün dəyişmə $(-\infty, \infty)$ intervalında kəsilməz, birqiymətli və sonlu qalmalıdır.

Əvvəlcə (35.12) tənliyinin $\xi = \pm\infty$ -da sonlu qalan həllini taparaq, buna *asimptotik həll* deyilir. ξ -nin $\pm\infty$ qiymətində (35.12)-də ξ^2 -na görə λ sabitini nəzərə almamaq olar:

$$\Psi''(\xi) - \xi^2\Psi(\xi) = 0. \quad (35.13)$$

Bu tənliyin həllini

$$\Psi(\xi) = e^{s\xi^2} \quad (35.14)$$

şəklində axtaraq. (35.14)-dən iki dəfə törəmə götürüb (35.13)-də yerinə yazandan sonra sabit ədədi $(2s-1)\xi^2$ daxil olan hədlərə görə nəzərə almasaq,

$$(4s^2 - 1)\xi^2 = 0 \quad \text{və ya} \quad s = \pm \frac{1}{2}$$

alırıq. Onda (35.12)-in ümumi asimptotik həlli

$$\Psi(\xi) = C_1 e^{-\frac{\xi^2}{2}} + C_2 e^{\frac{\xi^2}{2}}. \quad (35.15)$$

$\xi = \pm\infty$ -da ikinci hədd sonsuzluğa gedir. $\Psi_\infty(\xi)$ -nin sonlu qalmasını təmin etmək üçün C_2 ixtiyari sabit $C_2=0$ seçilməlidir. C_1 sabitini isə ümumi funksiyanın normalayıcı vurğunun daxilinə salmaq olar. Onda (35.12) tənliyinin asimptotik həlli

$$\Psi_\infty(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (35.16)$$

olur. (35.12) tənliyinin ümumi həllini

$$\Psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} u(\xi) \quad (35.17)$$

şəklində axtaraq. Bunu (35.12)-də yerinə yazdıqda, $u(\xi)$ funksiyası üçün

$$u''(\xi) - 2\xi u'(\xi) + (\lambda - 1)u(\xi) = 0 \quad (35.18)$$

alınır. Bu tənliyin həlli üstlü sıra şəklində axtarılır:

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k. \quad (35.19)$$

Bunu (35.18)-də yerinə yazsaq,

$$\sum_{k=0}^{\infty} [k(k-1)\xi^{k-2} - (2k+1-\lambda)\xi^k] a_k = 0$$

alınır. Bu ifadədə cəm işarəsi altında birinci həddə k -nı $k+2$ ilə əvəz etməklə sıfır və additiv sabit olan hədləri aradan çıxarsaq,

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+2)(k+1)a_{k+2} - (2k+1-\lambda)a_k] \xi^k = 0$$

olar. Üstlü sıranın sıfıra bərabər olması üçün ξ -nin müxtəlif üstlərinin əmsalları sıfıra bərabər olmalıdır. Bu şərtədən aşağıdakı *rekurent düstur* alınır:

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} a_k. \quad (35.20)$$

Bu münasibətdə k -ya $k=0$ -dan başlayaraq qiymət versək, sıranın a_k , a_{k+2} , a_{k+4} və i.ə., $k=1$ -dən başlasaq isə a_{k+1} , a_{k+3} , a_{k+5} , ... əmsalları arasında əlaqə tapmış olarıq. Birinci halda a_0 , ikinci halda isə a_1 əmsalları ixtiyari seçilməlidir. Başqa sözlə, a_0 və a_1 əmsalları (35.18) diferensial tənliyinin inteqrallama sabitləri olur. Onlar $\Psi(\xi)$ və ya $u(\xi)$ -nin üzərinə qoyulan əlavə şərtlərin

birindən tapıla bilər. Onlardan biri $\Psi(\xi)$ funksiyanının kvadratik inteqrallama, yəni vahidə normalanma şərtidir.

Göstərmək olar ki, $\Psi(\xi)$ üçün normalanma şərti o vaxt ödənilir ki, (35.19) sırasına daxil olan hədlərin sayı sonlu qalsın*.

Fərz edək ki, (35.19) sırasının sonuncu həddi $a_n \xi^n$ -dir, yəni sıranın a_n -dən sonra gələn bütün əmsalları sıfıra bərabərdir:

$$a_k = \begin{cases} a_n \neq 0, & k \leq n \\ 0 & k > n \end{cases} \quad (35.21)$$

Məsələn: $k=n$ olduqda (35.21) şərtinə görə

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} a_n = 0$$

olmalıdır. $a_n \neq 0$ olduğundan, burada

$$2n+1-\lambda=0$$

və ya

$$\lambda=2n+1 \quad (35.22)$$

olar. Deməli (35.19) sırası ilə təyin olunan funksiyanın çoxhəddli (polinom) olması üçün (35.22) şərti ödənilməlidir.

(35.21) şərtinə əsasən iddia edə bilərik ki, $a_{n+1}=0$ -dir. Onda (35.20) rekurent düsturundan və (35.21) şərtindən alınır ki, a_{n-1} əmsalı da sıfıra bərabərdir. Doğrudan da (35.20)-də $k-n$ $k-1$ ilə əvəz edib, alınmış

$$a_{k+1} = \frac{2(k-1)+1-\lambda}{k(k+1)} a_{k-1}$$

ifadəsində $k=n$ götürsək, (35.21) şərtinə əsasən

$$a_{n+1} = \frac{2(n-1)+1-(2n+1)}{n(n+1)} a_{n-1} = 0$$

olmalıdır. Burada a_{n-1} -in əmsalı sıfır olmadığından $a_{n-1}=0$ alınır. Beləliklə,

* Bax [7], səh 28

a_{n-3}, a_{n-5}, \dots və i.a. əmsallarının hamısı sıfır olur. Deməli (35.19) sırası yalnız a_k, a_{k+2}, a_{k+4} və i.a. əmsalları ardıcılığı ilə təyin olunmuş olur.

$\Psi(\xi)$ funksiyasının normalayıcı vuruğu təyin olunmadığından $a_n = 2^n$ kimi seçilə bilər. Onda (35.20) və (35.22) münasibətlərindən

$$a_{n-2} = -\frac{n(n-1)}{1!} 2^{n-2} \quad (35.23)$$

$$a_{n-4} = \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} 2^{n-4}$$

və i.a. alınır. Onda $u(\xi)$ üçün

$$u(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} 2^{n-4} + \dots + \quad (35.24)$$

$$+ \begin{cases} a_1, & n\text{-in tək qiymətləri} \\ a_0, & n\text{-in cüt qiymətləri} \end{cases}$$

olar.

Bu çoxhədli işə riyazi fizikada, yəni məxsusi funksiyalar nəzəriyyə-sində Ermit polinomu adlanır və $H_n(\xi)$ kimi işarə olunur. Deməli,

$$u(\xi) = H_n(\xi)$$

alınır. (35.22)-ni nəzərə almaqla (35.18) tənliyini $H_n(\xi)$ üçün yazsaq

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0 \quad (35.23')$$

alırıq. Deməli, hər hansı funksiya üçün (35.23') tənliyi alınarsa, onu artıq həll etmədən (35.22) şərtinin ödənildiyini tələb etməklə, onun həllini riyazi fizikada yaxşı məlum olan Ermit polinomu ilə ifadə edə bilərik. n -in birinci bir neçə qiymətləri üçün $H_n(\xi)$ -nin ifadələrini göstərək. (35.24)-dən

$$H_0(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \quad (35.25)$$

alınır.

Beləliklə, (35.10) tənliyinin məxsusi funksiyaları

$$\Psi_n(\xi) = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (35.26)$$

və məxsusi qiymətləri üçün (35.11) və (35.22) münasibətlərindən

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n=0,1,2, \dots, \infty \quad (35.27)$$

ifadələrini almış oluruq.

Ermitt polinomunun (35.24) ifadəsini yığcam şəkildə yazmaq olar. Bunun üçün $v = e^{-\xi^2}$ qəbul edib, bir dəfə törəmə alsaq

$$v' + 2\xi v = 0$$

tənliyini alırıq. Bu tənlikdən $(n+1)$ dəfə törəmə alaq:

$$v^{(n+2)} + 2(v\xi)^{(n+1)} = 0. \quad (35.28)$$

İkinci həddi açmaq üçün Leybnis qaydasından istifadə edək (bax §14). Orada $y=v$, $z=2\xi$ götürsək,

$$(v\xi)^{n+1} = v^{(n+1)}\xi + (n+1)v^n.$$

(35.28) tənliyi

$$v^{(n+2)} + 2\xi v^{(n+1)} + 2(n+1)v^{(n)} = 0$$

şəklinə düşər. Burada

$$v^{(n)} = e^{-\xi^2} f(\xi)$$

götürək. $f(\xi)$ funksiyası üçün (35.23') tənliyi alınır. Deməli, $f(\xi)$ yalnız $H_n(\xi)$ -dən sabitlə fərqlənə bilər:

$$f(\xi) = e^{\xi^2} v^{(n)}(\xi) = e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) = N_n H_n(\xi). \quad (35.29)$$

Buradakı N_n sabiti $H_n(\xi)$ -nin (35.24) ilə verilmiş ifadəsində və (35.29)-da törəmələri açmaqla $f(\xi)$ üçün alınan sırada ξ^2 -nin eyni üstlü hədlərinin əmsallarını müqayisə etməklə təyin etmək olar. N_n üçün $N_n = (-1)^n$ qiyməti

alınır. Deməli $H_n(\xi)$ -ni

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) \quad (35.30)$$

kimi yığcam şəkildə yazmaq olar.

İndi də $\Psi_n(x)$ funksiyasına daxil olan C inteqrallama vuruğunu tapaq. Yuxarıda dediyimiz kimi, onu $\Psi_n(x)$ funksiyalarının

$$\int \Psi_{n'}^*(x) \Psi_n(x) dx = \delta_{n'n}$$

orta-normalanma şərtindən tapmaq olar. $\Psi_n(\xi)$ -in (35.26) ifadəsini burada yazıb, x -dən ξ dəyişəninə keçəndən sonra $H_n(\xi)$ -nin özünü (35.30) ifadəsi ilə əvəz etsək,

$$x_o C_{n'} C_n \int e^{-\xi^2} H_{n'}(\xi) H_n(\xi) d\xi = (-1)^n x_o C_{n'} C_n \int H_{n'}(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}) d\xi = \delta_{n'n} .$$

Axıncı ifadəni n dəfə hissə-hissə inteqrallasaq,

$$x_o C_{n'} C_n \int e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_{n'}(\xi) d\xi = \delta_{n'n} \quad (35.31)$$

alarıq. Burada $n > n'$ olsa, $H_{n'}(\xi)$ funksiyasından n dəfə götürülmüş törəmə sıfır verər, yəni $\Psi_n(x)$ funksiyaları üçün ortoqonallıq şərti ödənilər. $n=n'$

halında isə $\delta_{nn}=1$ və $\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!$ və Puasson inteqralı $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$

olduğundan C_n üçün

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_o}} \quad (35.32)$$

almış olarıq. Beləliklə,

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_o \sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2} H_n(\xi), \quad \left(\xi = \frac{x}{x_o} \right) \quad (35.33)$$

olur.

Diskret spektr halında ermit operatorunun $\Psi_n(x, t)$ məxsusi funksiyalar çoxluğunun tam sistem təşkil etdiyi şərtini çıxardığımızı oxşar olaraq göstərmək olar ki, xətti harmonik ossilyatorun Hamilton operatorunun (35.33) məxsusi funksiyalar çoxluğu da

$$\sum_n \Psi_n^*(x) \Psi_n(x') = \delta(x - x') \quad (35.34)$$

tam sistemlik şərtini ödəyir.

Doğrudan da, dalğa funksiyasının fiziki mənasına görə fəzanın ixtiyari nöqtəsindəki kvant-mexaniki sistemin mümkün olan hallardan birində olma ehtimalı

$$\int \Psi^*(x) \Psi(x) dx = \sum_k |C_k|^2 = \sum_k C_k^* C_k \quad (35.35)$$

ifadəsi ilə verilir. Burada

$$C_k = \int \Psi_k^*(x) \Psi(x) dx \quad (35.36)$$

əmsalları sistemin $\Psi(x)$ ümumi funksiyasını ixtiyari ermit operatorun $\{\Psi_k(x, t)\}$ məxsusi funksiyaların tam sistemi ilə ifadə edən superpozisiya prinsipinə daxil olan əmsallardır:

$$\Psi(x, t) = \sum C_k \Psi_k \quad (35.37)$$

Əvvəlcə fərz edək ki, (35.34) bərabərliyi doğrudur. Onda (35.36)-ya əsasən (35.35) bərabərliyi

$$\begin{aligned} \sum_k |C_k|^2 &= \sum_k \int \Psi_k^*(x) \Psi^*(x) dx \int \Psi_k^*(x') \Psi(x') dx = \\ &= \int \Psi^*(x) \Psi(x') \sum_k \Psi_k^*(x') \Psi_k(x) dx dx' \end{aligned}$$

şəklinə düşər. Burada (35.34)-ü nəzərə alsaq,

$$\sum_k |C_k|^2 = \int \Psi^*(x) \Psi(x') \delta(x - x') dx dx' = \int \Psi^*(x) \Psi(x) dx$$

olar, yəni (35.35) bərabərliyi eynilik kimi ödənilir.

İndi də (35.35) bərabərliyinin doğru olduğunu qəbul edək:

$$\sum_k |C_k|^2 = \int \Psi^*(x) \Psi(x) \sum_k \Psi_k^*(x') \Psi_k(x) (dx)(dx') = \int \Psi^*(x) \Psi(x) (dx).$$

Axırıncı bərabərliklər o zaman eyni zamanda ödənilər ki,

$$\Psi(x) = \int \Psi(x') \sum_k \Psi_k^*(x') \Psi_k(x) (dx')$$

kimi təyin olunsun. Bu o vaxt mümkündür ki, $\Psi_k(x)$ funksiyaları üçün (35.34) şərti ödənilsin. Bu isbat ixtiyari ermit operatorun məxsusi funksiyalar bazisi üzrə aparıldığından ümumi xarakter daşıyır.

(35.24) və (35.33) ifadələrindən bir nəticə olaraq çıxır ki, n -in cüt qiymətlərində $\Psi_n(x)$ funksiyasına arqumentin (ξ -nin) yalnız cüt üstlü hədləri, n -in tək qiymətlərində isə yalnız tək üstlü hədləri daxil olur. Deməli, kvant ossilyatorun n -in cüt qiymətlərinə uyğun bütün hallar yalnız cüt funksiyalarla, tək qiymətlərinə uyğun halları isə – tək dalğa funksiyaları ilə təsvir olunur.

Ossilyatorun (35.27) enerji spektrinə gəldikdə, spektr diskretdir. Həm enerjinin məxsusi qiymətləri və həm də uyğun məxsusi funksiyalar yeganə bir kvant ədədi ilə təyin olunduğundan, ossilyatorun stasionar halları cırlaşmamış olur. Enerjinin müəyyən bir qiymətinə yeganə bir dalğa funksiyası uyğun gəlir.

Klassik ossilyatordan fərqli olaraq kvant ossilyatorun enerjisinin minimal qiyməti ($n=0$) sıfır yox, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ -yə bərabərdir. Ossilyatorun enerjisi

E_0 olan halı *əsas hal* adlanır. Enerjinin bu qiyməti ossilyatorun temperaturunun mütləq sıfır qiymətinə uyğun gəldiyindən ona ossilyatorun sıfırıncı rəqslərinin enerjisi də deyilir. Buradan çıxır ki, mütləq sıfırda sistemin rəqsi hərəkəti sönmür.

Harmonik ossilyator üçün sıfırıncı enerjinin varlığı faktı zərəcəyin koruskul-dalğa təbiətli olmasından çıxan ən mühüm nəticələrdən biridir. Onun təcrübədə təsdiqi, yəni rəqsi hərəkətin mütləq sıfırda belə tam sönməməsi faktının təcrübədə müşahidə edilməsi kvant mexanikasının özü üçün böyük əhəmiyyət kəsb etmiş olardı.

Temperaturu mütləq sıfır yaxın olan kristallardan rentgen şüalarının səpilməsi prosesində ilk dəfə sıfırıncı rəqslərin varlığı isbat olundu. Doğrudan da, belə alçaq temperaturalarda kristalın atomlarının rəqsi hərəkəti tam sönmüş olsaydı, rentgen şüalarının kristallardan səpilməsi zamanı səpilən şüaların tezliyinin dəyişməsi baş verməzdi. Təcrübədə isə belə dəyişmənin varlığı müşahidə olunmuşdu. Bu da sıfırıncı rəqslərin mövcud olması və ya

ossilyatorun $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ enerjisinə malik olması demək idi.

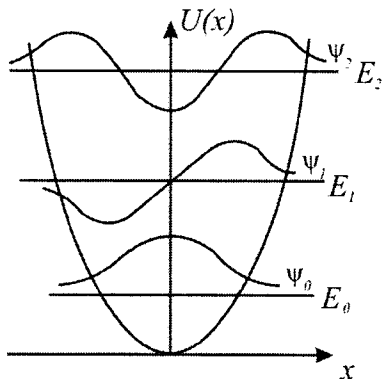
Kvant ossilyatoru üçün ixtiyari ardıcıl iki enerji səviyyəsi arasındakı fərq $\hbar\omega$ -ya bərabərdir. Başqa sözlə, ossilyator qonşu enerji səviyyələrin birindən digərinə keçdikdə, o, ya $\hbar\omega$ qədər enerji alır və ya da verir. Buradan $\hbar\omega$ bir rəqs kvantının enerjisi olur və ümumi enerji $n\hbar\omega + E_0$ kimi təyin olunduğundan, hesab etmək olar ki, hər istənilən E_n səviyyəsində n rəqs kvantı vardır.

Birinci üç stasionar halın dalğa funksiyalarının ifadəsi və enerjinin onlara uyğun qiymətini göstərək:

$$\begin{aligned} n=0, E_0 &= \frac{\hbar\omega}{2}, \Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2} \\ n=1, E_1 &= \frac{3\hbar\omega}{2}, \Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} 2\xi e^{-\xi^2/2} \\ n=2, E_2 &= \frac{5\hbar\omega}{2}, \Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0\sqrt{\pi}}} (2\xi^2 - 1)e^{-\xi^2/2} \end{aligned} \quad (35.38)$$

Şəkil 13-də bu funksiyaların (35.5) potensial enerji müstəvisində x -dən asılılıq əyriləri göstərilmişdir. Göründüyü kimi, $\Psi_n(x)$ dalğa funksiyasının düyün nöqtələrinin sayı n -ə bərabərdir. $n=0$ olanda $\Psi_0(x)$ funksiyasının $-\infty < x < \infty$ oblastında düyün nöqtəsi yoxdur, $n=1$ olanda düyün nöqtəsi bir, $n=2$ olanda iki və i.a.-dır. Deməli, n böyük olduqca dalğa funksiyasının ossilyasiyası da artır.

Şəkildəki x_1, x_2, x_3, \dots nöqtələrində ossilyatorun tam və potensial enerjiləri bərabər olur: $E_n = U(x_n)$. Bu nöqtələrə ossilyatorun «klassik qayıtma nöqtələri» deyilir. Tam enerjinin qiyməti x -in $x > x_n$ qiymətlərində potensial enerjinin uyğun qiymətindən kiçik olur və klassik fizika baxımından ossilyator $x > x_n$ oblastına keçə bilmir, o, $x < x_n$ oblastına qayıdır. Kvant ossilya-



Şəkil 13. Xətti ossilyatorun $n=0, 1, 2$ hallarına uyğun dalğa funksiyalarının qrafiki.

torun uyğun dalğa funksiyaları isə $x > x_n$ oblastında sıfırdan fərqli qalır və ossilyatorun həmin oblastda olma ehtimalı sıfırdan fərqli olur. Lakin bu oblastın dərinliklərinə getdikcə o kəskin azalır.

Yuxarıda qeyd etdik ki, harmonik ossilyatorun stasionar halları cır-laşmamışdır. Göstərmək olar ki, bu xassə birölçülü kvant hərəkətə xas olan bir xüsusiyyətdir və potensial enerjinin şəklindən və təbiətindən asılı deyildir.

Bunu isbat etmək üçün əksini fərz edək. Tutaq ki, enerjinin müəyyən bir E qiymətinə $\Psi_1(x)$ və $\Psi_2(x)$ kimi qeyri-asılı iki müxtəlif dalğa funksiyası uyğundur. Onda Ψ_1 və Ψ_2

$$\Psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\Psi_1 = 0,$$

$$\Psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\Psi_2 = 0.$$

Şredinger tənliklərinin həlli olmalıdır.

Birinci tənliyi soldan Ψ_2 -yə, ikincini isə Ψ_1 -ə vurub tərəf-tərəfə çıxsaq,

$$\Psi_2\Psi_1'' - \Psi_1\Psi_2'' = 0$$

və ya

$$\frac{d}{dx}(\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2') = 0$$

buradan

$$\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2' = \text{const} = C$$

alırıq, x -in bütün dəyişmə oblastında bu fərq sabit qaldığından, onun qiymətini (yəni C -ni) x -in bir qiyməti üçün təyin etməklə kifayətlənmək olar. Fərqi x -in $x \rightarrow \infty$ -da aldığı qiyməti təyin edək. E diskret spektrin məxsusi qiymətlərindən biri olduğundan $\Psi_1(x = +\infty) = \Psi_2(x = +\infty) = 0$ olar.

Beləliklə, x -in bütün dəyişmə oblastında

$$\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2' = 0$$

və ya

$$\Psi_1(x) = \alpha \Psi_2(x)$$

alınar, burada α -ixtiyari sabitdir. Deməli, $\Psi_1(x)$ və $\Psi_2(x)$ funksiyaları müxtəlif yox, xətti asılı funksiyalardır. Başqa sözlə, E halı cırılşmamış haldır.

İndi də göstərək ki, harmonik ossilyatorun enerjisinin $\frac{\hbar\omega}{2}$ minimum qiymətə malik olması kvant mexanikasının əsas prinsiplərindən biri olan qeyri-müəyyənlik prinsipi ilə əlaqədardır.

Doğrudan da, harmonik ossilyatorun kvant hallarının yalnız cüt və ya xud da tək dalğa funksiyaları ilə təsvir olunduğundan $\bar{x} = \int \Psi_n \bar{x} \Psi_n(dx) = 0$ və $\bar{p} = \int \Psi_n \bar{p} \Psi_n(dx) = 0$ olur. Onda $\Delta x = x - \bar{x} = x$ və $\Delta p = p - \bar{p} = p$ alınır. Bu halda qeyri-müəyyənlik münasibətini xətalarn ən kiçik qiymətləri üçün yazsaq,

$$\overline{(\Delta p)^2} \overline{(\Delta x)^2} = \overline{p^2} \overline{x^2} = \frac{\hbar^2}{4} \quad (35.39)$$

olar. $\overline{p^2}$ -in buradan tapılmış qiymətini

$$\overline{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \overline{x^2}}{2}$$

ifadəsində yazsaq,

$$\overline{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2 \hbar^2}{8(\overline{p^2})}$$

alarıq. \overline{E} -nin minimum qiymətini tapmaq üçün $\frac{d\overline{E}}{d\overline{p^2}} = 0$ tənliyindən

$\overline{p^2}$ -ni tapıb, onun ifadəsində yazsaq, $E_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2}$ alınar. Bu isə ossilyatorun

E_0 sıfırıncı enerjisi üzərinə düşür.

Kvant nəzəriyyəsinə təsvirin seçilməsindən asılı olmayaraq, koordinat operatorunun matrisa elementləri mühüm rol oynayır. Verilmiş təsvirdə koordinat operatorunun matrisa elementləri məlum olduqda (10.4') hərəkət tənliyindən və ya bilavasitə (14.31) münasibətindən istifadə edərək, impuls

operatorunun matrisa elementlərini və beləliklə də onlarla təyin olunan istənilən başqa fiziki kəmiyyətə uyğun operatorun həmin təsvirdəki ifadəsini tapa bilərik. Bundan başqa, gələcəkdə görəcəyimiz kimi, koordinat operatorunun matrisa elementləri şüalanma və səpilmə nəzəriyyəsində mühüm rol oynayır.

Harmonik ossilyator üçün koordinat operatorunun matrisa elementi

$$x_{n'n} = \int \Psi_n^*(x) x \Psi_n(x) dx \quad (35.40)$$

kimi təyin olunur. Ψ_n funksiyaların (35.33) ilə verilmiş ifadələrini burada yazıb, ermit polinamları üçün məlum olan

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \quad (35.41)$$

rekurent düsturundan və (35.31) münasibətlərindən istifadə etsək,

$$x_{n'n} = x_o \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n',n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n',n+1} \right) \quad (35.42)$$

ifadəsi alınar. Buradan görünür ki, ossilyator üçün koordinat operatorunun $x_{n-1,n}$ və $x_{n+1,n}$ matrisa elementləri yalnız qonşu səviyyələr üçün sıfırdan fərqli qalır, yəni

$$x_{n-1,n} = x_o \sqrt{\frac{n}{2}}$$

və

$$x_{n+1,n} = x_o \sqrt{\frac{n+1}{2}} \quad (35.43)$$

matrisa elementlərindən başqa bütün digər matrisa elementləri sıfıra bərabər olur.

§36. Ritsin variasiya metodu

Şredinger tənliyini həll etmək üçün tətbiq olunan təxmini metodlardan ən ümumi variasiya metodudur. Tanış olacağımız həyəcanlanma metodu (bax: §46 və §47) nəzəriyyədə hər hansı bir kiçik parametrin olmasını tələb

edir. Kvaziklassik metodun isə tətbiq oblastı çox məhduddur. Variasiya metodu kvant-mexaniki tənliyi variasiya şəklində göstərilə bilən bütün hallarda tətbiq oluna bilər.

Metodun mahiyyəti aşağıdakından ibarətdir. Tədqiq olunan sistemi təsvir edən tənliyin həlləri hər hansı ixtiyari məxsusi funksiyalar çoxluğuna daxil olarsa, bu çoxluğun istənilən ixtiyari Ψ funksiyasından asılı olan

$$J(\Psi^*, \Psi) = \int \Psi^* \tilde{H} \Psi d\xi \quad (36.1)$$

funksionalı stasionardırsa,

$$\delta J = 0 \quad (36.2)$$

variasiya tənliyi

$$\int \Psi^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi = 1 \quad (36.3)$$

şərti daxilində

$$\tilde{H} \Psi = E \Psi \quad (36.4)$$

Şredinger tənliyinə ekvivalent tənlik olur. \tilde{H} – baxılan sistemin Hamilton operatorudur.

Doğrudan da, (36.3) münasibəti daxilində $J(\Psi^*, \Psi)$ funksionalının ekstremallıq şərti

$$\delta \left[\int \Psi^* \tilde{H} \Psi d\xi - \lambda \int \Psi^* \Psi d\xi \right] = 0 \quad (36.5)$$

olar. λ – təyin olunacaq Lagranj parametridir. (36.5)-də variasiyanı açsaq,

$$\int \delta \Psi^* \tilde{H} \Psi d\xi - \lambda \int \delta \Psi^* \Psi d\xi + \int \Psi^* H \delta \Psi d\xi - \lambda \int \Psi^* \delta \Psi d\xi = 0.$$

$\delta \Psi$ – Ψ funksiyasının variasiyası, $\delta \Psi^*$ isə Ψ -yə qoşma Ψ' funksiyasının variasiyasıdır. Onlar bir-birindən asılı deyildir, çünki Ψ və Ψ' funksiyaları (vektorları) müxtəlif fəzalarda təyin olunur. Bu variasiyaların ixtiyari seçilə bilməsini də nəzərə alsaq, (36.5)-dən

$$(\tilde{H} - \lambda) \Psi = 0, \quad \Psi^* (\tilde{H} - \lambda) = 0 \quad (36.6)$$

tənlikləri alınar. İkinci tənlikdən ermit qoşma götürsək,

$$(\tilde{H}^* - \lambda^*)\Psi = 0 \quad (36.6')$$

olar. \tilde{H} ermit operator ($\tilde{H}^* = \tilde{H}$) olduğundan, onun məxsusi qiymətləri həqiqi olar: $\lambda^* = \lambda = E$. Buradan, (36.6) tənlikləri ekvivalent olub, sistemin Şredinger tənliyi üzərinə düşür.

Deməli, $\{\Psi_k\}$ çoxluğuna daxil olan istənilən Ψ_i funksiyası üçün $J(\Psi_i^*, \Psi_i)$ funksionalı stasionar olarsa, Ψ_i funksiyası \tilde{H} operatorunun E_i məxsusi qiymətinə uyğun məxsusi funksiyası olar. Əksinə, tutaq ki, sonlu normaya malik, yəni kvadratik inteqrallanan Ψ_i funksiyası \tilde{H} operatorunun E_i məxsusi qiymətinə uyğun məxsusi funksiyasıdır. Onda

$$\tilde{H}\Psi_i = E_i\Psi_i.$$

bu tənliyi soldan Ψ_i^* -yə vurub bütün fəza üzrə inteqrallasaq, (36.3)-ə əsasən

$$\int \Psi_i^* \tilde{H}\Psi_i d\xi = E_i = J(\Psi_i^*, \Psi_i)$$

alınar. Bunun (36.1) ifadəsi ilə müqayisəsindən görünür ki, nə üçün $J(\Psi^*, \Psi)$ funksionalının Ψ -yə görə stasionar olması tələbi qoyulur.

İndi də göstərək ki, kvant sisteminin hansı halda olmasından asılı olmayaraq, onun enerjisinin orta qiyməti sistemin əsas halının E_0 enerjisindən böyük və ya ona bərabər olur, yəni həmişə

$$J(\Psi^*, \Psi) = \int \Psi^* \tilde{H}\Psi d\xi \geq E_0 \quad (36.7)$$

münasibəti ödənilir, burada Ψ – ixtiyari normalanmış funksiya, E_0 isə $J(\Psi^*, \Psi)$ funksionalının minimum qiymətidir.

Fərz edək ki, $\{\Psi_k\}$ çoxluğu \tilde{H} -in normalandırılmış məxsusi funksiyalar çoxluğudur (diskret spektr):

$$\tilde{H}\Psi_k = E_k\Psi_k \quad \text{və} \quad \int \Psi_k^* \Psi_k d\xi = \delta_{k'k}. \quad (36.8)$$

$\{\Psi_k\}$ çoxluğu tam sistem təşkil etdiyindən, istənilən funksiyanı Ψ_k - funksiyalarının superpozisiyası kimi göstərmək olar:

$$\Psi(\xi) = \sum_k C_k \Psi_k. \quad (36.9)$$

(36.3) normalanma şərtindən

$$\sum_{k=0} C_k^* C_k = \sum_{k=0} |C_k|^2 = 1 \quad (36.10)$$

olar. (36.9)-u (36.7) ifadəsində yerinə yazıb (36.8)-i nəzərə alsaq,

$$J(\Psi^+, \Psi) = \sum_{kk'} C_k^+ C_k \int \Psi_k^* \tilde{H} \Psi_k d\xi = \sum_{kk'} E_k C_k^+ C_k \delta_{kk} = \sum_k E_k |C_k|^2$$

olar. \tilde{H} -in $\{E_k\}$ məxsusi qiymətlər çoxluğu üçün $E_k \geq E_0$ ($k=0, 1, 2, \dots$) şərti ödənildiyindən, (36.10)-a əsasən

$$J(\Psi^+, \Psi) \geq \sum_k E_0 |C_k|^2 \gg E_0 \quad (36.11)$$

alınar, yəni (36.7) qeyri-bərabərliyi həmişə ödənilir. Beləliklə, kvant sistemin əsas halının enerjisinin tapılması məsələsi $J(\Psi^+, \Psi)$ funksionalının minimum qiymətinin hesablanmasına gətirilir.

İndi də fərz edək ki, əsas halın Ψ_0 dalğa funksiyası məlumdur. Birinci həyəcanlanmış halın E_1 enerjisini və Ψ_1 dalğa funksiyasını tapaq. Bunun üçün

$$\int \Psi^*(\xi) \Psi(\xi) d\xi = 1, \quad \int \Psi_0^+ \Psi d\xi = 0 \quad (36.12)$$

şərtləri daxilində $J(\Psi^+, \Psi)$ funksionalının mütləq minimumunu hesablamaq lazımdır. Burada birinci şərt Ψ -nin normalanma, ikinci şərt isə Ψ -nin Ψ_0 -a ortoqonal olması tələbidir. Ψ ilə Ψ_0 -ın

$$\int \Psi_0^+ \Psi d\xi = 0 = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \int \Psi_0^+ \Psi_k d\xi = C_0 \int \Psi_0^+ \Psi_0 d\xi + \sum_{k=1}^{\infty} C_k \int \Psi_0^+ \Psi_k d\xi$$

ortoqonallıq şərtində birinci hədd $\int \Psi_0^+ \Psi_0 d\xi = 1$, ikinci hədd isə

$\int \Psi_0^+ \Psi_k d\xi = 0$ ($k \neq 0$) olduğundan ikinci cəm sıfır və $C_0 = 0$ olur. Baxılan halda (36.10) normalanma şərti

$$\sum_{k=1}^{\infty} |C_k|^2 = 1$$

kimi yazılar. Bu halda

$$J(\Psi^+, \Psi) = \sum_{k=1}^{\infty} E_k |C_k|^2 \geq \sum_{k=1}^{\infty} E_1 |C_k|^2 = E_1$$

olur. Beləliklə, birinci həyəcanlanmış halın enerjisi də $J(\Psi^+, \Psi)$ funksionalının uyğun minimumuna bərabər olur.

İkinci həyəcanlanmış halın E_2 enerjisini və Ψ_2 dalğa funksiyasını tapmaq istəsək, $J(\Psi^+, \Psi)$ funksionalının minimumu

$$\int \Psi^+ \Psi d\xi = 1, \quad \int \Psi_0^+ \Psi d\xi = 0 \quad \text{və} \quad \int \Psi_1^+ \Psi d\xi = 0$$

şərtlərində hesablanmalıdır və i.a.

Beləliklə, sistemin hər hansı n -ci halının E_n enerjisini tapmaq üçün $n+1$ sayda əlavə şərt daxil edilməklə $J(\Psi^+, \Psi)$ funksionalının minimumu tapılır. Bu metod *variasiya metodu* və ya *Rits metodu* adlanır.

Variasiya metodunun müxtəlif məsələlərə tətbiqi aşağıdakı kimi aparılır. $\Psi(\xi)$ funksiyası özəzinə bir sıra parametrlərdən asılı, kvadratik inteqrallanan və analitik ifadəsi məlum $\Psi(\xi, \alpha, \beta, \dots)$ kimi *sınaq funksiya* seçilir. Bu halda $J(\Psi^+, \Psi)$ funksionalı parametrlərdən asılı

$$J(\Psi^+, \Psi) = \int \Psi^+(\xi, \alpha, \beta, \dots) \tilde{H} \Psi(\xi, \alpha, \beta, \dots) d\xi = J(\alpha, \beta, \dots) \quad (36.13)$$

funksionalına çevrilir və məsələnin həlli əlavə şərtlər ödənilmək şərtlə $J(\alpha, \beta, \dots)$ funksionalının minimumunun tapılmasına gətirilir.

Seçilmiş sınaq funksiyasına daxil edilən α, β, \dots parametrləri $\Phi = J(\alpha, \beta, \dots) - E \int \Psi^+(\xi, \alpha, \beta, \dots) \Psi(\xi, \alpha, \beta, \dots) d\xi$ fərqiinin parametrlərə görə variasiyasının hesablanması zamanı alınan

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \beta} = 0, \dots, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} = 0, \dots \quad (36.14)$$

tənliklərdən tapılır, məsələn, $\alpha = \alpha_0$, $\beta = \beta_0$ və və i.a.

Sınaq funksiyasının seçilməsi məsələnin simmetriyasına əsaslanır. Sınaq funksiyası uğurlu seçildikdə o sistemin baxılan halının dəqiq funksiyasına və $E = J(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ kəmiyyəti isə həmin halın deyək ki, E_0 (və ya E_1, E_2, \dots) əsl qiymətinə kifayət qədər yaxın olur.

Beləliklə, Ritsin variasiya metodu (36.6) diferensial tənliyin həllini (36.14) cəbri tənliklər sisteminin həllinə gətirir və bununla \tilde{H} operatorunun məxsusi qiymətlər spektrinin tapılması məsələsi xeyli sadələşdirilmiş olur. Bu metodun mühüm çətinlikləri sınaq funksiyasını düzgün seçməyi, (36.1) və (36.3) inteqrallarını hesablamayı bacarmaqdan ibarətdir.

Ritsin variasiya metodu ilə \tilde{H} operatorunun məxsusi qiymətlərini və məxsusi funksiyalarını tapmaq yolunu bir-iki misalla nümayiş etdirək.

1. Xətti harmonik ossilyatorun əsas halının enerjisini və dalğa funksiyasını tapaq.

Bildiyimiz kimi, xətti harmonik ossilyatorun Hamilton operatoru

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu\omega_0^2 x^2}{2} \quad (36.15)$$

şəklindədir.

Sınaq funksiyası sistemin simmetriyasına əsasən elə seçilməlidir ki, o kvadratik inteqrallansın, $x = \pm\infty$ -da sıfır bərabər olsun və əsas halın dalğa funksiyası kimi düyün nöqtələrinə malik olmasın. Bu şərtləri ödəyən funksiya, yəqin ki,

$$\Psi(x, \alpha) = A e^{-\alpha \frac{x^2}{2}} \quad (36.16)$$

olar. (36.3) normalanma şərtindən $A = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}$ -dir. (36.13), (36.15) və (36.16)-dan isə

$$J(\alpha) = \int \Psi^+ \tilde{H} \Psi dx = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{\mu} + \frac{\mu \omega_0^2}{\alpha} \right) \quad (36.17)$$

alınır. $J(\alpha)$ funksionalının

$$\frac{dJ(\alpha)}{d\alpha} = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar^2}{\mu} - \frac{\mu\omega_0^2}{\alpha^2} \right) = 0$$

ekstremallıq şərtindən $\alpha = \alpha_0 = \frac{\mu\omega_0}{\hbar}$ alınır. α -nın bu qiymətini (36.16) və (36.17)-də yazsaq, xətti ossilyatorun əsas halının enerjisi və dalğa funksiyası üçün

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

və

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\mu\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{\mu\omega_0}{2\hbar}x^2} = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2} \quad (36.18)$$

qiymətləri alınır. Buradan görünür ki, E_0 və Ψ_0 bu qiymətləri onların §35 – də tapılmış dəqiq ifadələri üzərinə düşür.

2. Xətti ossilyatorun birinci həyəcanlanmış halının enerji və dalğa funksiyasını tapmaq üçün Ψ_1 sınaq funksiyası üzərinə qoyulan şərtlərə əsasən (onun bir düyün nöqtəsi olmalıdır)

$$\Psi_1(x) = Ax e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad (36.19)$$

şəklində seçilə bilər. Bu halda

$$\int \Psi_1^+(x)\Psi_1(x)dx = 1 \quad (36.20)$$

normalanma və

$$\int \Psi_0^+\Psi_1 dx = 0 \quad (36.21)$$

ortoqonallıq şərti ödənilməlidir. Normalıq şərtindən $A = \frac{2\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$ olur.

(36.18) və (36.19) ilə verilmiş funksiyaların ortoqonal olduğunu göstərmək isə çətin deyildir. (36.15) və (36.19)-dan $J(\Psi_1^+, \Psi_1)$ funksionalı üçün

$$J(\Psi_1^+, \Psi_1) = J(\alpha) = \int \Psi_1^+ \check{H} \Psi_1 dx = \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar^2 \alpha}{\mu} + \frac{\mu \omega_o^2}{\alpha} \right)$$

alınır. α -nın $\alpha_o = \frac{\mu \omega_o}{\hbar}$ qiymətində $J(\alpha)$ minimum qiymət alır:

$$J(\alpha_o) = E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega_o$$

və uyğun dalğa funksiyası isə

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} \left(\frac{\mu \omega_o}{\hbar} \right)^{3/2} x \cdot e^{-\frac{\mu \omega_o x^2}{2\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2x_o} \sqrt{\pi}} 2\xi e^{-\xi^2/2}$$

olur. Bunlar da §35-də E_1 və Ψ_1 üçün alınmış dəqiq qiymətlərin üzərinə düşür.

3. Üçüncü misal olaraq hidrogenəbənzər atomların əsas halının enerjisi-ni və dalğa funksiyasını tapaq. Hidrogenəbənzər atomların \check{H} operatoru (bax §40):

$$\check{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}. \quad (36.22)$$

Hidrogenəbənzər atomların əsas halında orbital moment sıfır bərabər ($l=0$) olduğundan Ψ_{noo} dalğa funksiyası bucaqlardan asılı olmayıb, yalnız r -radius-vektorun funksiyasıdır. Digər tərəfdən, atom qapalı sistemdir və onun dalğa funksiyası $r \rightarrow \infty$ -da sıfır bərabər olmalıdır. Buradan sınaq funk-siya

$$\Psi = A e^{-\alpha r} \quad (36.23)$$

kimi seçilə bilər.

Normalanma şərti

$$\int \Psi^+ \Psi (d\vec{r}) = A^2 \int e^{-2\alpha r} r^2 dr d\Omega = 4\pi A^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r^2 dr = 1.$$

A vuruğu üçün $A = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$ qiyməti alınır.

(36.22) və (36.23)-dən $J(\alpha)$ funksionalı

$$J(\alpha) = \frac{2\hbar^2 \alpha^3}{\mu} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \nabla^2 e^{-\alpha r} r^2 dr - 4Z\alpha^3 e^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r dr$$

olar. İki operatorun hasilindən ibarət operatora uyğun qoşma operatorun tapılması qaydasından istifadə etdikdə

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} \nabla^2 e^{-\alpha r} r^2 dr = \int_0^\infty (\bar{\nabla} e^{-\alpha r})^2 r^2 dr.$$

$\bar{\nabla}$ operatorunun sferik koordinatlardakı komponentlərinin $\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}$,

$\nabla_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$ və $\nabla_\varphi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$J(\alpha) = \frac{2\hbar^2 \alpha^3}{\mu} \int_0^\infty \left(\frac{\partial}{\partial r} e^{-\alpha r} \right)^2 r^2 dr - 4\alpha^3 Z e^2 \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r dr$$

olur. Bu integralları hissə-hissə açıdıqda

$$\int_0^\infty \left(\frac{\partial}{\partial r} e^{-\alpha r} \right)^2 r^2 dr = \frac{1}{4\alpha}; \quad \int_0^\infty e^{-2\alpha r} r dr = \frac{1}{4\alpha^2}$$

alınır. Deməli,

$$J(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} - \alpha e^2 Z. \quad (36.24)$$

Bu funksional α -nın $\alpha_0 = \frac{\mu e^2 Z}{\hbar^2} = \frac{Z}{a}$ qiymətində minimum olur. α -nın bu qiymətini (36.23) və (36.24)-də yerinə yazdıqda hidrogenə bənzər atomların əsas halının enerji və dalğa funksiyası üçün (bax (40.26))

$$E_{1s} = J(\alpha_0) = -\frac{Ze^2}{2a}$$

və (bax (40.40))

$$\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{Zr}{a}}$$

ifadələri alınır. $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ – birinci Bor orbitinin radiusudur.

Yuxarıdakı misallardan görünür ki, Ritsin variasiya metodu sistemin əsas halının enerjisini və dalğa funksiyasını tapmaq üçün əlverişlidir. Lakin həyəcanlanmış səviyyələrin enerjisi və dalğa funksiyası tapılan zaman daha mürəkkəb sınaq funksiyasının seçilməsində, buraxılan xətanın tərtib və işarəsinin təyin edilməsində təsadüf olunan çətinliklər variasiya metodunun həyəcanlanmış hallara tətbiqinə çox ehtiyatla yanaşmağı tələb edir.

§37. Harmonik ossilyator enerji təsvirində

Xətti harmonik ossilyator üçün koordinat təsvirində aldığımız nəticələri, müxtəlif təsvirlərin ekvivalentliyi baxımından, istənilən başqa təsvirdə – enerji təsvirində də almaq olar.

Xətti harmonik ossilyatorun klassik hərəkət tənliyi (35.2') şəklindədir:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0. \quad (35.2')$$

Uyğunluq prinsipinə görə kvant mexanikasında ona uyğun operator tənlik

$$\check{\ddot{x}} + \omega_0^2 \check{x} = 0 \quad (37.1)$$

olar. Bu tənliyi enerji təsvirində yazmaq.

Hər hansı operatorun təsvirinin verilməsi dedikdə onun tam sistem təşkil edən, yəni (35.34) şərtini ödəyən məxsusi funksiyalar çoxluğunun təsvirinin bazisi kimi seçilməsi başa düşülür. Xətti ossilyator üçün bu funksiyalar

(35.33) ifadəsi ilə verilmişdir. Onlar $\check{H} = \frac{\check{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2 \check{x}^2}{2}$ enerji operatorunun məxsusi funksiyalarıdır. (37.1) tənliyini enerji təsvirində yazmaq üçün

onu soldan $\Psi_m^+(\xi)$ və sağdan $\Psi_n(\xi)$ funksiyalarına vurub, bütün fəza (bir ölçülü) üzrə inteqrallamaq lazımdır:

$$\int \Psi_m^+(\xi) \ddot{x} \Psi_n(\xi) dx + \omega_o^2 \int \Psi_m^+(\xi) \bar{x} \Psi_n(\xi) dx = 0$$

və ya

$$\ddot{\bar{x}}_{mn} + \omega_o^2 \bar{x}_{mn} = 0. \quad (37.2)$$

$\ddot{\bar{x}}$ və \bar{x} operatorları üçün yazılmış

$$\ddot{\bar{x}} = \frac{i}{\hbar} (\bar{H}\ddot{x} - \ddot{x}\bar{H}) = \frac{i}{\hbar} [\bar{H}\ddot{x}]$$

hərəkət tənliyini enerji təsvirində yazsaq,

$$\dot{x}_{mn} = \frac{i}{\hbar} ((Hx)_{mn} - (xH)_{mn}) = \frac{i}{\hbar} \sum_k (H_{mk} x_{kn} - x_{mk} H_{kn})$$

alırıq. $H_{mk} = E_k \delta_{mk}$, $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$\dot{x}_{mn} = i \omega_{mn} x_{mn} \quad (37.3)$$

alınar. (37.3)-dən bir də zamana görə törəmə götürüb, (37.3)-dən istifadə etsək

$$\ddot{x}_{mn} = -\omega_{mn}^2 x_{mn}. \quad (37.4)$$

Bunu (37.2)-də yerinə yazsaq, onda

$$(\omega_{mn}^2 - \omega_o^2) x_{mn} = 0. \quad (37.5)$$

Bu tənliyin iki həlli vardır:

$$\begin{aligned} \omega_{mn} &= \omega_o, & x_{mn} &\neq 0 \\ \omega_{mn} &\neq \omega_o, & x_{mn} &= 0. \end{aligned} \quad (37.6)$$

x_{mn} matrisa elementlərinin bilavasitə hesablanması göstərir ki, (35.43-ə bax), bu çoxluqdan yalnız $m=n\pm 1$ -ə uyğun iki $x_{n-1,n}$ və $x_{n+1,n}$ matrisa elementləri sıfırdan fərqlidir. Onlara uyğun keçid tezlikləri $\omega_{n,n\pm 1} = \pm \omega_0$ olur.

Enerji təsvirində sıfırdan fərqli matrisa elementlərini hesablamaq üçün impuls ilə koordinat operatorları arasındakı kommutasiya şərtindən istifadə edək:

$$\check{\check{x}}\check{x} - \check{x}\check{\check{x}} = -\frac{i\hbar}{m}, \quad (36.7)$$

(burada $\check{p} = m\check{\dot{x}}$ götürülmüşdür). Bu tənlik enerji təsvirində

$$(\dot{x}\dot{x})_{mn} - (x\dot{x})_{mn} = -\frac{i\hbar}{m} \delta_{mn} \quad (37.8)$$

şəklinə düşür. (37.3)-ə əsasən

$$\sum_k (i\omega_{mk} x_{mk} x_{kn} - i\omega_{kn} x_{mk} x_{kn}) = -\frac{i\hbar}{m} \delta_{mn}. \quad (37.9)$$

Burada $m=n$ götürsək,

$$\sum_k (\omega_{nk} x_{nk} x_{kn} - \omega_{kn} x_{nk} x_{kn}) = -\frac{\hbar}{m}. \quad (37.10)$$

Bu cəmdə yalnız $k=n\pm 1$ uyğun (yəni $x_{n-1,n}$ və $x_{n+1,n}$ matrisa elementləri) hədlər sıfırdan fərqli qalır. $x_{nk} = x_{kn}$ və $\omega_{n+1,n} = \omega_0$, $\omega_{n-1,n} = -\omega_0$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$(x_{n+1,n})^2 - (x_{n,n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_0}. \quad (37.11)$$

Ossilyatorun enerji səviyyəsini təyin edən n kvant ədədi $n=0,1,2,\dots$ tam müsbət qiymətlər aldığından $(x_{mn})^2$ ədədlər çoxluğu yuxarıdan qeyri-məhdud, aşağıdan isə məhdud ədədi silsilə əmələ gətirir. Doğrudan da, $n=0$ -da $x_{n,n-1}$ həddi $x_{0,-1}$ -ə çevrilir. Harmonik ossilyator enerjisinin $E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$ minimum qiymətinə uyğun əsas haldan aşağıda yerləşən E_{-1} halına (sə-

viyyəsinə) malik ola bilməz. Ona görə $E_0 \leftrightarrow E_{-1}$ keçidlərini təyin edən x_{o-1} matris elementi eynilik kimi sıfıra bərabər olmalıdır: $x_{o-1}=0$ bu da $(x_{mn})^2$ ədədi silsiləsini aşağıdan məhdud edir.

(37.11) bərabərliyində $n=1, 2, \dots$ qiymətlərini verib, silsilənin digər hədlərini hesablasaq,

$$x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = x_o \sqrt{\frac{n}{2}} \quad (37.12)$$

alınır. Burada n -i $n+1$ ilə əvəz etsək, silsilənin sıfırdan fərqli ikinci qrup hədlərini alarıq:

$$x_{n+1,n} = x_{n,n+1} = x_o \sqrt{\frac{n+1}{2}}. \quad (37.13)$$

Beləliklə, $\{x_{mn}\}$ çoxluğu ümumi şəkildə

$$x_{mn} = x_o \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} \right\} \quad (37.14)$$

şəklində yazıla bilər.

Koordinat operatorunun matrisa elementlərinin məlum qiymətlərində

$$p_{mn} = im\omega_{mn} x_{mn}$$

bərabərliyinə əsasən ossilyatorun impuls operatorunun sıfırdan fərqli matrisa elementlərini yazmaq olar:

$$\begin{aligned} p_{n-1,n} &= im\omega_{n-1,n} x_{n-1,n}, \\ p_{n+1,n} &= im\omega_{n+1,n} x_{n+1,n}. \end{aligned} \quad (37.15)$$

x_{mn} və p_{mn} -in məlum qiymətlərində ossilyatorun Hamilton operatorunun öz təsvirindəki ifadəsini (yəni matrisasını) və məxsusi qiymətlər spektrini tapmaq olar:

$$H_{mn} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2m} p_{mk} p_{kn} + \frac{m\omega_o^2}{2} x_{mk} x_{kn} \right) =$$

$$= \frac{m}{2} \sum_k \left(i^2 \omega_{mk} \omega_{kn} x_{mk} x_{kn} + \omega_o^2 x_{mk} x_{kn} \right) = \frac{m}{2} \sum_k \left(-\omega_{mk} \omega_{kn} + \omega_o^2 \right) x_{mk} x_{kn} \quad (37.16)$$

Hər bir matrisa öz təsvirində diaqonal olduğundan, yəni H_{mn} üçün

$$H_{mn} = E_n \delta_{mn}$$

şerti ödənildiyindən (bunu (37.15)-in köməyi ilə asanlıqla göstərmək olar):

$$H_{nn} = E_n = \frac{m}{2} \sum_k \left(\omega_{nk}^2 + \omega_o^2 \right) |x_{nk}|^2$$

və yaxud (37.14)-ə əsasən

$$E_n = h\omega_o \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

olar, yəni E_n üçün koordinat təsvirində (35.27) ilə verilmiş ifadə alınır.

§38. Xətti harmonik ossilyator N-təsvirində

Təsvir nəzəriyyəsinə həsr olunmuş fəsilə təsvirə tərif verərkən qeyd etmişdik ki, sistemin dalğa funksiyası koordinatlardan asılı olanda ona x -təsviri, impulsdan asılı olanda p -təsviri və i.a. deyəcəyik. §29-da hal vektoru anlayışı ilə tanış olduqda isə qeyd etdik ki, get və bra - vektorları əsasən kvant ədədlərin funksiyası kimi verilir. Belə ümumi təsvirdə hal vektorunun və operatorların müəyyən təsvirin seçilməsindən asılı olmayan xassələrini bilməklə istənilən kvant-mexaniki məsələni həll etmək olar. Biz bu təsviri şərti olaraq kvant ədədləri təsviri və ya N -təsviri adlandıracağıq.

Əvvəlcə N -təsvirin məzmunu ilə tanış olaq. Bu məqsədlə \check{x} və \check{p} operatorların xətti funksiyası olan

$$\check{a} = \frac{1}{\sqrt{2} x_o} \left(x + \frac{i}{m\omega} \check{p} \right), \quad \check{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2} x_o} \left(x - \frac{i}{m\omega} \check{p} \right) \quad (38.1)$$

operatorları daxil edək. \check{x} və \check{p} ermit operatorlar olduğundan \check{a} operatoru \check{a}^+ operatoruna ermit qoşma operatorudur.

\tilde{x} ilə \tilde{p} operatorları arasındakı

$$\tilde{p}\tilde{x} - \tilde{x}\tilde{p} = -i\hbar \quad (38.2)$$

kommutasiya münasibətində (38.1)-dən \tilde{x} və \tilde{p} -ni a və a^+ ilə əvəz etsək, axırıncılar üçün

$$aa^+ - a^+a = 1 \quad (38.3)$$

münasibəti alınır.

Fərz edək ki, a və a^+ operatorları N -təsvirində verilmişdir və $|n\rangle$ vektoru $\tilde{N} = a^+a$ operatorunun n məxsusi qiymətinə uyğun məxsusi vektorudur:

$$\tilde{N} |n\rangle = a^+a |n\rangle = n |n\rangle. \quad (38.4)$$

Əvvəlcə n ədədinin yalnız müsbət qiymətlər ala bildiyini isbat edək. Bunun üçün $\langle n|$ vektorunun (38.4) ilə skalyar hasilini götürək

$$\langle n | \tilde{N} |n\rangle = \langle n | a^+a |n\rangle = n \langle n |n\rangle \quad (38.5)$$

$$\int \Psi_n^* \Psi_n dx = \langle n |n\rangle = 1$$

əsasən

$$n = \langle n | a^+a |n\rangle = \langle n | \tilde{a}^+ |n'\rangle \langle n' | \tilde{a} |n\rangle \quad (38.5')$$

olar, a^+ və a operatorların ermit qoşmalıq xassəsindən istifadə etsək, axırıncı ifadə

$$|\langle n' / a / n \rangle|^2 = n$$

şəklində yazıla bilər. Yəni $n \geq 0$ -dir.

İndi də $\tilde{N} = \tilde{a}^+a$ operatorunun məxsusi qiymətlər və məxsusi vektorlar spektrlərini tapaq. Bunun üçün $a|n\rangle$ vektorunu $|n'\rangle$ kimi işarə edib, ona \tilde{N} operatoru ilə təsir edək. (38.3) və (38.4) -dən

$$\tilde{N} |n'\rangle = a^+aa |n\rangle = a(a^+a - 1) |n\rangle = (n-1)a |n\rangle = (n-1) |n'\rangle \quad (38.6)$$

alarıq. Deməli, $a|n\rangle$ vektoru \tilde{N} operatorunun $n-1$ məxsusi qiymətinə uyğun məxsusi vektorudur. Buna oxşar olaraq göstərmək olar ki, $a^2|n\rangle, a^3|n\rangle, \dots$ vektorları \tilde{N} operatorunun uyğun olaraq $n-2, n-3, \dots$ məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi vektorları olacaqdır.

Həmin əməliyyatı a^+ operatoru üçün aparaq. $a^+|n\rangle = |n'\rangle$ vektoruna \tilde{N} ilə təsir edək. (38.3) və (38.4) -dən

$$\tilde{N}|n'\rangle = \tilde{a}^+ \tilde{a} \tilde{a}^+ |n\rangle = \tilde{a}^+ (\tilde{a}^+ \tilde{a} + 1) |n\rangle = (n+1)a^+ |n\rangle = (n+1) |n'\rangle$$

alınar, yəni $a^+|n\rangle = |n'\rangle$ vektoru \tilde{N} -in $n+1$ məxsusi qiymətinə uyğun məxsusi vektorudur. Eyni şəkildə $a^{+2}|n\rangle, a^{+3}|n\rangle, \dots$ vektorları \tilde{N} -operatorunun $n+2, n+3, \dots, \infty$ məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi vektorları olar.

Buradan belə bir nəticəyə gəlirik ki, \tilde{N} operatorunun məxsusi qiymətlər spektri $0, 1, 2, \dots, \infty$ kimi müsbət tam ədədlər ardıcılığı təşkil edir. Onlara uyğun məxsusi vektorlar ardıcılığı isə bu vektorlardan birinə (məsələn, $|n\rangle$ vektoruna) a və ya a^+ operatoru ilə təkrar təsir nəticəsində alınır.

\tilde{a} və \tilde{a}^+ operatorlarının təsir qanununu tapaq və onların fiziki mənasını aydınlaşdırmaq. Yuxarıda qeyd edilmişdi ki, $a|n\rangle$ və $a^+|n\rangle$ vektorları uyğun olaraq $n-1$ və $n+1$ məxsusi qiymətlərinə uyğun vektorlardır. Onda onlar $|n-1\rangle$ və $|n+1\rangle$ vektorlarından sabitlə fərqlənər.

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \gamma |n-1\rangle, \\ a^+|n\rangle &= \beta |n+1\rangle. \end{aligned} \quad (38.7)$$

(38.7)-ni uyğun olaraq soldan $\langle n'|$ və $\langle n''|$ vektorlarına skalyar vurub, hal vektorları üçün

$$\langle n'|n-1\rangle = \delta_{n',n-1}, \quad \langle n''|n+1\rangle = \delta_{n'',n+1} \quad (38.8)$$

ortonormalanma şərtlərini nəzərə alsaq,

$$\langle n'|a|n\rangle = \gamma \delta_{n',n-1}$$

$$\langle n^n | a^+ | n \rangle = \beta \delta_{n^*, n+1} \quad (38.9)$$

aalınar. Başqa sözlə, \tilde{a} və \tilde{a}^+ operatorlarının yalnız

$$\langle n-1 | a | n \rangle = \gamma, \quad \langle n+1 | a^+ | n \rangle = \beta \quad (38.10)$$

matrisa elementləri sıfırdan fərqli qalır.

γ və β sabitlərini tapmaq üçün (38.5) bərabərliyindən istifadə edək. (38.5') və (38.8) münasibətlərinin köməyi ilə n' üzrə cəm götürsək,

$$n = \langle n | a^+ | n-1 \rangle \langle n-1 | a | n \rangle = |\langle n-1 | a | n \rangle|^2 \quad (38.11)$$

və buradan da

$$\langle n-1 | a | n \rangle = \sqrt{n} \text{ və ya } \langle n | a^+ | n-1 \rangle = \sqrt{n} \quad (38.12)$$

alınar, yəni $\gamma = \sqrt{n}$.

(38.11)-də $n-i$ $n+1$ ilə əvəz etsək

$$n+1 = \langle n+1 | a^+ | n \rangle \langle n | a | n+1 \rangle = |\langle n+1 | a^+ | n \rangle|^2 \quad (38.13)$$

yaxud

$$\langle n+1 | a^+ | n \rangle = \sqrt{n+1}; \quad a^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle \quad (38.14)$$

olar, yəni $\beta = \sqrt{n+1}$.

Beləliklə, \tilde{N} operatorunun məxsusi vektorları arasında, onları bir-biri ilə əlaqələndirən (38.12) və (38.14) rekurent düsturları alınır. Buradan $n=0$ kvant ədədinə uyğun $|0\rangle$ vektoru üçün

$$a | 0 \rangle = 0 \quad (38.15)$$

başlanğıc şərti ödənilir. Sistemin $|0\rangle$ halı onun əsas halı adlanır. $n=1,2,3,\dots$ kvant ədədlərinə uyğun məxsusi vektorları isə (38.14) rekurent düsturunda $|0\rangle$ vektoruna a^+ operatorunun təkrar təsiri nəticəsi olaraq alınır. Sistemin bu axırıncı halları həyəcanlanmış halları adlanır:

$$a^+ | 0 \rangle = \sqrt{1} | 1 \rangle, \quad a^2 | 0 \rangle = \sqrt{2 \cdot 1} | 2 \rangle, \dots, \quad a^{+n} | 0 \rangle = \sqrt{1 \cdot 2 \cdot \dots \cdot n} | n \rangle,$$

yəni ixtiyari kvant halına uyğun $|n\rangle$ vektoru

$$|n\rangle = \frac{a^{+n} |0\rangle}{\sqrt{n!}} \quad (38.16)$$

bərabərliyi ilə təyin olunur.

(38.16)-da alınan $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|n\rangle$ hal vektorları ardıcılığı N -təsviri adlandırdığımız təsvirin bazis vektorlar sistemini təşkil edir, yəni bu ardıcılıq tam sistem olur. Bu təsvirdə yəqin ki, $|N|$ matrisası diaqonal olar (matrisa öz təsvirində verilir). Doğrudan da, (38.5) bərabərliyindən

$$|N| = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad (38.17)$$

\tilde{a} və \tilde{a}^+ operatorlara uyğun matrisalar isə (38.12) və (38.14)-dən

$$|a| = \begin{vmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad (38.18)$$

və

$$|a^+| = \begin{vmatrix} 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad (38.19)$$

olur.

İndi də müəyyən bir təsvirə keçmədən ümumi hesab olunan bu təsvirdə xətti harmonik ossilyatorun hal vektorlarını və enerji spektrlərini tapaq.

Xətti harmonik ossilyatorun

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (38.20)$$

ifadəsində \tilde{x} və \tilde{p} operatorlarını a və a^+ operatorları ilə əvəz etsək,

$$\tilde{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(a^+ a + a a^+) \quad (38.21)$$

alınar. Burada (38.3) kommutasiya münasibətlərinin və (38.4) və ya (38.5) tənliklərinin köməyi ilə

$$\langle n | H | n \rangle = E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (38.22)$$

alınar. Ossilyatorun enerji spektri üçün alınmış bu ifadə tamamilə koordinat təsvirində Şredinger tənliyinin uzun-uzadı həlli nəticəsində aldığımız (35.27)-nin üzərinə düşür.

Buradan görünür ki, N -təsvirində \tilde{N} operatorunun məxsusi qiyməti olan n kvant ədədi xətti ossilyator üçün baş kvant ədədi rolunu oynayır, belə ki, n -in hər iki halda aldığı qiymətlər ardıcılıqları bir-birinin üzərinə düşür.

Digər tərəfdən biz yuxarıda qeyd etmişdik ki, (38.22)-yə daxil olan n ədədi ossilyatorun E_n halında olan rəqs kvantlarının sayını göstərir. Bu baxımdan (38.12) bərabərliyini \tilde{a} operatorunun təsiri nəticəsində $|n\rangle$ kvant halında bir rəqs kvantının azalması hesabına onun $|n-1\rangle$ halına keçməsi, (38.14) bərabərliyini isə \tilde{a}^+ operatorunun təsiri nəticəsində $|n\rangle$ halının bir rəqs kvantı çox olan $|n+1\rangle$ halına keçidi kimi başa düşmək olardı. Beləliklə, \tilde{a} -nın təsiri baxılan haldan bir rəqs kvantının udulmasına, \tilde{a}^+ -nın təsiri isə baxılan halda bir rəqs kvantının artmasına gətirir. Bu mənada \tilde{a} - *udulma operatoru*, \tilde{a}^+ isə *doğulma operatoru* adlanır.

Harmonik ossilyatorun bu təsviri sahənin kvant nəzəriyyəsində, kristallarda və molekullarda meydana çıxan rəqslərin təhlilində və eləcə də şüa-

lanmanın kvant nəzəriyyəsində (bax §50) geniş tətbiq olunur.

N -təsvirin təhlilində qeyd etdik ki, (38.15) və (38.16) tənlikləri \tilde{N} operatorunun

$$|10\rangle, |11\rangle, |12\rangle, \dots |n\rangle \quad (38.23)$$

məxsusi vektorlar çoxluğunu almağa imkan verir. Bu işi xətti ossilyator üçün görək. Əvvəlcə E_0 əsas halın ($n=0$) dalğa funksiyasını tapaq. Əsas halın hal vektoru (38.15) tənliyini ödəyir. (38.1) ifadəsi ilə verilmiş \tilde{a} operatorunda $x=x_0\xi$ götürüb onun və $|n\rangle$ vektorunun koordinat təsvirində verilmiş (38.5) ifadələrindən istifadə etsək, (38.15) tənliyi

$$a |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi) = 0$$

şəklinə düşər. Bunu integrallasaq,

$$\Psi_0(\xi) = C e^{-\xi^2/2}, \quad (38.24)$$

C -normalanma şərtindən tapılır: $C = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}$. Bu isə tamamilə (35.38)-də

verilmiş $\Psi_0(x)$ funksiyası üzərinə düşür.

\tilde{N} operatorunun digər hal vektorlarını hesablamaq üçün isə, yuxarıda dediyimiz kimi, (38.16) tənliyindən istifadə etmək lazımdır. Harmonik ossilyatorun $n=1$ -ə uyğun həyəcanlanmış birinci stasionar halın vektoru

$$|1\rangle = \frac{a^+ |0\rangle}{1!} \quad (38.25)$$

tənliyindən hesablanır. Bu tənliyi koordinat təsvirində yazsaq,

$$\langle x | 1\rangle = \frac{1}{1!} a^+ \langle x | 0\rangle$$

və ya

$$\Psi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi)$$

olar.

$\Psi_0(x)$ -in (38.24) ilə verilmiş ifadəsini burada yazıb, diferensialı hesablasaq, $\Psi_1(x)$, (35.38)-də verilmiş ikinci funksiyanın üzərinə düşər:

$$\Psi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2x_0} \sqrt{\pi}} 2\xi e^{-\xi^2/2}.$$

Eyni qayda ilə

$$\langle x | 2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} a^{+2} | 0 \rangle \text{ və ya } \Psi_2(\xi) = \frac{1}{2\sqrt{2!}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^2 \Psi_0(\xi)$$

ifadəsindəki diferensialların hesablanması

$$\Psi_2(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2x_0} \sqrt{\pi}} (2\xi^2 - 1) e^{-\xi^2/2}$$

funksiyasına gətirir – (35.38)-də üçüncü funksiya və i.a.

N -təsvirinin köməyi ilə harmonik ossilyatorun \tilde{x} operatorunun matrisa elementlərini çox asan hesablamaq olur. Bunun üçün \tilde{a} və \tilde{a}^+ operatorlarının (38.1) ilə verilmiş ifadələrini tərəf-tərəfə toplayaq:

$$\tilde{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (a + a^+). \quad (38.26)$$

(38.12) və (38.14) münasibətlərinə əsasən

$$\langle n-1 | x | n \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\langle n-1 | a | n \rangle + \langle n-1 | a^+ | n \rangle),$$

burada $\langle n-1 | a^+ | n \rangle = 0$ olduğundan

$$\langle n-1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n}{2}} = x_{n-1,n} \quad (38.27)$$

Eyni qayda ilə

$$\langle n+1 | x | n \rangle = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}} = x_{n+1,n} \quad (38.28)$$

olur. Beləliklə, N -təsvirindən istifadə etməklə, kifayət qədər sadə yolla, xətti ossilyatorun bütün xarakteristik kəmiyyətlərini hesablamaq olur.

V FƏSİL

ÜÇÖLÇÜLÜ FƏZADA HƏRƏKƏT

§39. Sferik simmetrik (mərkəzi) sahədə hərəkət

35–38-ci paragraflarda Şredinger tənliyi birölçülü məsələlərin həllinə tətbiq edilmişdi. Şredinger tənliyi ikinci tərtib xüsusi törəməli diferensial tənlik olduğundan birölçülü məsələlər üçün o, adi diferensial tənliyə gəlir. Üçölçülü fəzada istənilən təbiətli sahədəki hərəkət üçün Şredinger tənliyinin ümumiyyətlə analitik həllini tapmaq mümkün deyildir. Bu işi yalnız yeganə bir halda – sferik simmetrik sahədə baş verən hərəkət üçün görmək olur.

Sferik simmetrik sahə elə sahələrə deyilir ki, onun hər bir nöqtəsinin potensialı, sahənin qüvvə mərkəzi adlanan nöqtədən (mənbəyin yerləşdiyi nöqtə) olan məsafənin yalnız mütləq qiymətindən asılı olub $V(|\vec{r}|) = V(r)$, mərkəzə nəzərən radiusu r olan sferanın səthində götürülmüş bütün nöqtələrdə eyni bir qiymətə malik olsun.

Xətti ossilyator kimi, mərkəzi sahədə hərəkət, kvant mexanikasının ən əsas (fundamental) məsələlərindən biridir. Bu məsələ bir və çoxelektronlu atomların, molekulun kvant nəzəriyyəsinin və səpilmə nəzəriyyəsinin əsasını təşkil edir.

Mərkəzi sahədə sahə ilə zərrəciyin qarşılıqlı təsir enerjisi yalnız məsafənin mütləq qiymətindən asılı olduğuna görə zərrəciyin dalğa funksiyasının bucaqlardan asılılıq xarakteri mərkəzi sahənin təbiətindən asılı olmur.

Sferik simmetrik sahədəki zərrəciyin potensial enerjisini $V(r)$ ilə işarə etsək, onun Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \quad (39.1)$$

olar, burada $\tilde{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ – zərrəciyin impuls operatoru, \vec{r} – onun radius vektorudur. Bu hal üçün Şredinger tənliyi

$$\tilde{H}\Psi = E\Psi \quad (39.2)$$

və ya

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi(\vec{r}, t) = E\Psi(\vec{r}, t) \quad (39.2')$$

olur.

Yuxarıda deyildiyi kimi, istənilən kvant mexaniki sistem üçün yazılmış üçölçülü (39.2') dalğa (Şredinger) tənliyinin ümumi şəkildə analitik həllərini tapmaq mümkün deyildir. Bu o zaman mümkün olur ki, məsələnin simmetriyası, verilən tənlikdə dəyişənlərə ayırmaq əməliyyatı aparmağa və onu bir dəyişəndən asılı diferensial tənliklər sistemi şəklində yazmağa imkan versin.

Sistemin (39.1) Hamilton operatorunun şəklindən görünür ki, o, fəza inversiyasına ($x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$ əvəzinə) görə invariantdır, yəni \tilde{I} inversiya operatoru \tilde{H} ilə kommutasiya edir, \tilde{I} aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığına görə sistemin cütlüyü hərəkət inteqralı olur (bax §15). \tilde{I} -dən başqa hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatoru \tilde{L}^2 və onun proyeksiyalarından biri (məsələn \tilde{L}_z) (39.1) Hamilton operatoru ilə kommutasiya etdiyindən onlar da hərəkət inteqrallarıdır (bax §14). Beləliklə, \tilde{H} , \tilde{L}^2 , \tilde{L}_z və \tilde{I} operatorları eyni bir məxsusi $\Psi(x, y, z, t) = \Psi$ funksiyasına malikdir:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \Psi = E\Psi, \quad (39.2')$$

$$\tilde{L}^2\Psi = L^2\Psi, \quad (39.3)$$

$$\tilde{L}_z\Psi = L_z\Psi, \quad (39.4)$$

$$\tilde{I}\Psi = I\Psi. \quad (39.5)$$

Buradan çıxır ki, (39.2') tənliyinin elə həlləri tapılmalıdır ki, onlar

(39.3), (39.4) və (39.5) tənliklərinin də həlli olsun.

Mərkəzi sahədə hərəkət edən zərrəciyin dalğa tənliyi üçün, sferik koordinat sistemində həmişə dəyişənlərə ayırmaq əməliyyatı aparmaq olur. Sferik koordinat sisteminin başlanğıcını sahənin qüvvə mərkəzində yerləşdirib, z oxunu polyar ox üzrə yönəltməklə (x, y, z) dekart koordinat sisteminin (r, θ, φ) sferik sistemə keçək:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi; \quad y = r \sin \theta \sin \varphi; \quad z = r \cos \theta \\ 0 &\leq r < \infty; \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{aligned} \quad (39.6)$$

Bu zaman

$$V = V(r). \quad \Psi(\vec{r}) = \Psi(x, y, z) = \Psi(r, \theta, \varphi).$$

$\nabla^2 = \Delta$ Laplas operatoru isə

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2}{r^2} \quad (39.7)$$

şəklini alır. Burada

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (39.8)$$

$$\nabla_{\theta, \varphi}^2 = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Sferik koordinat sistemində (39.2') tənliyi və (39.3)–(39.5) tənlikləri (39.6)–(39.8) bərabərliklərinə əsasən

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla_r^2 + \frac{\nabla_{\theta, \varphi}^2}{r^2} \right) + V(r) \right) \Psi = E \Psi \quad (39.2')$$

$$-\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2 \Psi = L^2 \Psi \quad (39.3')$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi = L_z \Psi \quad (39.4')$$

$$\tilde{I} \Psi = I \Psi \quad (39.5')$$

şəklinə düşür.

(39.3') və (39.4') tənliklərinin həlli ilə biz §14-də məşğul olmuşduq. \tilde{L}^2 və \tilde{L}_z operatorlarının məxsusi funksiyalar və məxsusi qiymətlər spektrləri üçün (14.28') və (14.20) ifadələri alınmışdı. Bu funksiyalar yalnız θ və φ bucaq dəyişənlərindən asılıdır. (39.2') tənliyinin həlli olan Ψ -funksiyası isə r dəyişənindən də asılı olmalıdır: $\Psi(r, \theta, \varphi)$. (39.2'') tənliyinin sol tərəfində duran operatorun şəklindən görünür ki, (39.2'')-in həllini

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (39.9)$$

şəklində axtarmaqla, orada dəyişənlərə ayırma əməliyyatını aparmaq olar. Lakin buna ehtiyac yoxdur, çünki (39.3')-dən

$$\tilde{L}^2 Y(\theta, \varphi) = -\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2 Y(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

olduğunu nəzərə alsaq, radial funksiya adlanan $R(r)$ üçün

$$\nabla_r^2 R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R(r) = 0 \quad (39.10)$$

tənliyi alınır.

Mərkəzi sahədə hərəkət edən sistemin E enerjisinin mümkün olan qiymətləri (39.10) tənliyindən təyin olunur. Onlar $V(r)$ -in şəklindən asılı olur. Bundan başqa onlar sistemin L^2 hərəkət miqdarı momentindən (l orbital kvant ədədindən) də asılı ola bilər. Lakin E -nin qiymətləri L_z -dən, yaxud m maqnit kvant ədədindən asılı olmamalıdır, çünki (39.10)-a \tilde{L}_z operatoru daxil olmur. Bu, hərəkət baş verən sahənin mərkəzi sahə olması ilə izah olunur, belə ki fəzada bütün istiqamətlər eyni ehtimalı olduğundan, sistemin enerjisi hərəkət miqdarı momentinin fəzadakı istiqamətindən asılı ola bilməz.

(39.10) tənliyindən görünür ki, onun həllərinin xarakteri sistemin E tam enerjisinin $V(r)$ -in $r \rightarrow \infty$ -dakı qiymətindən böyük və ya kiçik olması ilə təyin olunur. Doğrudan da, bütün real fiziki sistemlərdə məsafənin kifayət qədər böyük qiymətlərində qarşılıqlı təsir olduqca kiçik, sıfıra yaxın olur: $V(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0$. Lakin (39.10) tənliyinin həllində $E < 0$ və $E > 0$ kimi iki halı fərqləndirmək lazımdır.

$V(r)$ potensial enerjinin qiyyə mərkəzindəki (koordinat başlanğıcındakı) qiymətinə gəldikdə isə biz elə sahələrdəki hərəkətə baxacağıq ki, onlar üçün potensial enerji qiyyə mərkəzində ya sonlu qalsın və ya da

$$\lim_{r \rightarrow 0} V(r)r^2 = 0 \quad (39.11)$$

şərtini ödəsin*.

(39.10) tənliyinin həllini tapmaq üçün

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (39.12)$$

əvəzini qəbul edək. Onda (39.10) tənliyi

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = 0. \quad (39.13)$$

(39.13) tənliyi ikinci tərtib diferensial tənlik olduğundan onun ümumi həlli

$$u(r) = C_1 u_1(r) + C_2 u_2(r) \quad (39.14)$$

şəklində olar. Burada C_1 və C_2 ixtiyari sabitlər, $u_1(r)$ və $u_2(r)$ isə E -dən və tənliyə daxil olan digər parametrlərdən asılı onun xətti asılı olmayan həlləridir.

Yuxarıda dəfələrlə qeyd edilmişdi ki, Şredinger tənliyinin hər istənilən həlli fiziki mənaya malik deyildir. Dalğa funksiyası üç standart şərtlə yanaşı normalanma şərtini də ödəməlidir. Bu şərtin ödənilməsi üçün isə $R(r)$ və ya $u(r)$ funksiyaları r -in dəyişmə $(0, \infty)$ oblastında məxsusi nöqtələrə malik olmamalıdır. (39.13) tənliyindən görünür ki, $r=0$ və $r=\infty$ nöqtələri $u(r)$ -in məxsusi nöqtələridir. Ona görə də əvvəlcə (39.13) tənliyini bu nöqtələrin yaxın ətrafında tədqiq edək.

a) (39.13) tənliyinin $r \rightarrow \infty$ -da sonlu qalan asimptotik həllini tapaq.

$u(r)$ üçün $u(r \rightarrow \infty) = 0$ şərtini və $\frac{1}{r^2}$ ilə mütənasib olan hədlərin digər

hədlərə nəzərən sonsuz kiçik kəmiyyət olduğunu nəzərə alsaq, (39.13) tənliyi

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} u(r) = 0 \quad (39.15)$$

* Qeyd edək ki, §35-də təhlil etdiyimiz xətti harmonik ossilyatorun potensial enerjisi üçün də (39.11) şərti ödənilir.

şəklini alar. Burada $E > 0$ halı üçün $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $E < 0$ halı üçün isə

$\lambda^2 = -\frac{2m|E|}{\hbar^2}$ əvəzlərini qəbul edək. Onda (39.15) tənliyi iki tənliyə parçalanır:

$$u''(r) + k^2 u(r) = 0, \quad (39.16)$$

$$u''(r) - \lambda^2 u(r) = 0. \quad (39.17)$$

Onların xarakteristik tənlikləri

$$\begin{aligned} m^2 + k^2 &= 0, & m &= \pm ik \\ m^2 - \lambda^2 &= 0, & m &= \pm \lambda \end{aligned}$$

əsasında uyğun həllər

$$u(r) = ae^{ikr} + be^{-ikr}, \quad E > 0 \quad (39.18)$$

$$u(r) = a_1 e^{-\lambda r} + b_1 e^{\lambda r}, \quad E < 0 \quad (39.19)$$

olar. (39.12)-yə əsasən (39.10) tənliyinin $r \rightarrow \infty$ -a uyğun asimptotik həlləri

$$R(r) = a \frac{e^{ikr}}{r} + b \frac{e^{-ikr}}{r}, \quad E > 0 \quad (39.18')$$

$$R(r) = a_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r} + b_1 \frac{e^{\lambda r}}{r}, \quad E < 0 \quad (39.19')$$

olar.

$E > 0$ halında (39.15) tənliyinin (39.18') həlli a və b sabitlərinin istənilən qiymətlərində sonlu və kəsilməz qalır. O, mərkəzə düşən və mərkəzdən səpilən sferik dalğaların superpozisiyası şəklindədir. Bu halda zərəcəyin radiusu r ilə $r + dr$ arasında dəyişən sferik təbəqənin daxilində olması ehtimalı r -in kifayət qədər böyük qiymətlərində ($r \rightarrow \infty$) sonlu qalır.

$$dW(r) = W(r) (d\bar{r}) = |R|^2 r^2 dr d\Omega = 4\pi \left| ae^{ikr} + be^{-ikr} \right|^2 dr.$$

Belə hallar klassik mexanikadakı qeyri-periodik orbitlər üzrə hərəkətə

uyğun gəlir: zərrəcik sonsuzluqdan qüvvə mərkəzinə doğru hərəkət edir və sonra yenə sonsuzluğa gedir, başqa sözlə, onun hərəkəti infinit olur.

$E < 0$ halına gəldikdə isə burada ikinci həll $r \rightarrow \infty$ -da sonsuzluğa yaxınlaşır, normalanma şərtini ödəmir, yəni dalğa funksiyası kvadratik inteqrallanan olmur və sistemin heç bir fiziki halını təsvir edə bilmir. Digər tərəfdən, dalğa funksiyası üzərinə qoyulan standart şərtlərin ödənilməsi üçün $b_l = 0$ seçilməlidir. Onda

$$u(r) = a_1 e^{-\lambda r}, \quad R = a_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r}. \quad (39.20)$$

Digər tərəfdən (39.13) tənliyinin (39.14) ümumi həllinə əsasən b_l əmsali ona daxil olan C_1 və C_2 sabitlərindən xətti asılı olmalıdır:

$$b_l = a_{11} C_1 + a_{12} C_2 = 0. \quad (39.21)$$

Bu halda zərrəciyin radiusu r ilə $r + dr$ arasında dəyişən sferik təbəqənin daxilində olması ehtimalı

$$dW(r) = |R(r)|^2 r^2 dr d\Omega = 4\pi |a_1 e^{-\lambda r}|^2 dr$$

$r \rightarrow \infty$ yaxınlaşanda sıfıra yaxınlaşır: $W(r \rightarrow \infty) = 0$, yəni zərrəcik yalnız qüvvə mərkəzinin yaxın ətrafında ola bilər. Başqa sözlə, bu halda zərrəcik məhdud fəzada hərəkət edir, onun hərəkəti **finit** olur. Klassik mexanikada bu hal qapalı orbitlər üzrə baş verən hərəkətə uyğundur.

b) İndi də (39.13) tənliyinin $r \rightarrow 0$ -da sonlu qalan asimptotik həllərini tapaq.

$V(r)$ üçün (39.11) şərtini və $\frac{2mE}{\hbar^2}$ həddinin də $\frac{l(l+1)}{r^2}$ həddinə nisbətən çox kiçik qalacağını nəzərə alsaq, (39.13) tənliyi

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) = 0 \quad (39.22)$$

şəklinə düşər. Bunun həllini $u(r) = r^s$ şəklində axtaraq, onda $s(s-1) - l(l+1) = 0$, buradan $s = -1$, və $s = l+1$ alınar.

Beləliklə,

$$u(r) = C r^{l+1} + D r^{-1}. \quad (39.23)$$

$r=0$ -da $u(r)$ -in sonlu qalması üçün $D=0$ götürmək lazımdır:

$$u(r) = Cr^{l+1}, \quad R(r) = Cr^l. \quad (39.24)$$

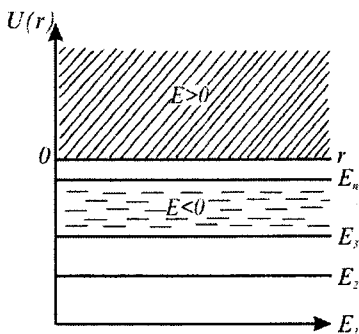
Yuxarıda olduğu kimi, D əmsalı da (39.14)-dən C_1 və C_2 sabitlərindən xətti asılı olmalıdır:

$$D = a_{21}C_1 + a_{22}C_2 = 0. \quad (39.25)$$

Beləliklə, $E < 0$ halında C_1 və C_2 sabitləri üçün (39.21) və (39.25) tənlikləri şəklində bircins xətti tənliklər sistemi alınır. C_1 və C_2 -dən heç olmasa birinin sıfırdan fərqli qiymət alması üçün onların əmsallarından düzəlmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır:

$$\|a_{-k}\| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = 0. \quad (39.26)$$

(39.13) tənliyinin həlləri E və ona daxil olan başqa parametrlərdən asılı olduğundan a_{ik} kəmiyyətləri də onlardan asılı olar. Beləliklə, (39.26) bərabərliyi E -yə görə üstlü (transendent) tənliyə gətirir və onun kökləri $E < 0$ halında enerji operatorunun məxsusi qiymətlər spektrini verir və sistemin enerji spektri diskret olur (şəkil 14).



Şəkil 14. $E > 0$ -da enerji spektri kəsilməz, $E < 0$ -da isə diskretdir.

$E > 0$ halında isə C_1 və C_2 sabitləri üzərinə heç bir məhdudiyət qoyulmur. Onların istənilən qiymətində tənliyin həlli sonlu qalır və sistemin enerjisi istənilən qiymət ala bilər. Beləliklə, $E > 0$ halında sistemin enerji spektri kəsilməz spektr olur.

§40. Kulon sahəsində hərəkət

Bu paraqrafda biz hidrogenəbənzər atomların kvant nəzəriyyəsi üzərində dayanacağıq.

Nüvənin ətrafında yeganə bir elektron hərəkət edən atomlar hidrogenəbənzər atomlar adlanır. Hidrogen atomu ${}^1_1\text{H}$, bir dəfə ionlaşmış helium atomu ${}^4_2\text{He}$, iki dəfə ionlaşmış litium atomu ${}^6_3\text{Li}$ belə atomlardandır. Bu atomların nüvələrinin yükünü $+Ze$, elektronun yükünü $-e$ ilə işarə edib, onların arasındakı məsafəyə ($\sim 10^{-8}$ sm) görə nüvənin ($\sim 10^{-13}$ sm) və elektronun xətti ölçülərinin kifayət qədər kiçik olduğunu nəzərə alsaq, iki nöqtəvi yük arasındakı qarşılıqlı təsir enerjisi, Kulon qanununa görə,

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{Ze^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (40.1)$$

olar.

Elektronun kütləsini m_1 , nüvənin kütləsini isə m_2 ilə işarə edib, hidrogenəbənzər atomun Hamilton operatorunu

$$\check{H} = \frac{\check{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\check{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (40.2)$$

şəklində yazaq; burada \vec{r}_1, \vec{r}_2 - uyğun olaraq elektronun və nüvənin radius vektorları, $\check{p}_1 = -i\hbar\vec{\nabla}_1, \check{p}_2 = -i\hbar\vec{\nabla}_2$ - onların impuls operatorlarıdır. İmpuls operatorlarının ifadəsini (40.2)-də yazsaq,

$$\check{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (40.3)$$

Qarşılıqlı təsirdə olan iki zərrəciyin hərəkəti, klassik mexanikada olduğu kimi, kvant mexanikasında da bir zərrəciyin digərinə görə nisbi hərəkətinə gətirilə bilər.

Doğrudan da,

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \text{və} \quad \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (40.4)$$

əvəzlərini qəbul etsək, sistemin Hamiltonianı ayrılıqda hər biri \vec{r} və \vec{R} -dən asılı iki hissənin cəminə bərabər olur:

$$\check{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{r}). \quad (40.5)$$

Burada \vec{r} - nüvə ilə elektron arasındakı məsafə, \vec{R} onların ətalət mərkəzinin radius vektoru, $M = m_1 + m_2$ - sistemin tam kütləsi, $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ - onun gətirilmiş kütləsidir.

(40.5) Hamilton operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından sistemin stasionar hallarının Şredinger tənliyi

$$\check{H}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (40.6)$$

olar. (40.5)-in ifadəsindən görünür ki, (40.6) tənliyinin həllini

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi(\vec{r})\Psi(\vec{R}) \quad (40.7)$$

şəklində axtarmaq olar. Bu zaman (40.6) tənliyi

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \Psi(\vec{R}) = E_R \Psi(\vec{R}) \quad (40.8)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E_r \Psi(\vec{r}) \quad (40.9)$$

kimi iki tənliyə parçalanır.

(40.8) tənliyi sistemin ətalət mərkəzinin və ya kütləsi $M = m_1 + m_2$ olan zərrəciyin sərbəst hərəkətini, (40.9) tənliyi isə zərrəciklərin nisbi hərəkətini, yaxud kütləsi m olan zərrəciyin $V(\vec{r})$ potensial sahədəki hərəkətini təsvir edir. Baxılan məsələdə sistemin gətirilmiş kütləsi təxminən elektronun kütləsinə bərabər olur:

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m}} \approx m_e. \quad (40.11)$$

Beləliklə, zərrəciklərin nisbi hərəkəti elektronun nüvənin (nöqtəvi yükün) sferik simmetrik $V(\vec{r})=V(r)$ sahəsindəki hərəkətinə gətirilmiş olur. Zərrəciyin sərbəst hərəkətinin təhlili §2-də verilmişdir. Biz bu paraqrafda elektronun nüvənin mərkəzi sahədəki hərəkəti üzərində dayanacağıq.

§39-da göstərdik ki, (40.9) və ya (39.2') tənliyi sferik koordinat sisteminə (35.10) və (39.31') tənliklərinə parçalanır.

(39.3') tənliyinin həlli məlum olduğundan (bax §14), elektronun nüvənin sferik simmetrik sahəsindəki hərəkətinin stasionar səviyyələrini və onlara uyğun dalğa funksiyalar spektrini tapmaq üçün radial

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad (40.12)$$

funksiyası üçün yazılmış (39.10) tənliyini həll edək. Orada $V(r)$ -i onun (40.1) ilə verilmiş ifadəsi ilə əvəz etsək $u(r)$ -funksiyası üçün

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = 0. \quad (40.13)$$

Baxdığımız halda zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvələri cazibə qüvvələridir. Mərkəzi sahədəki hərəkətin bundan qabaqdakı §-da təhlil etdiyimiz ümumi nəzəriyyəsinə əsasən tam enerjinin $E > 0$ qiymətləri üçün sistemin enerji spektri kəsilməz (bütöv), $E < 0$ qiymətləri üçün isə diskret olmalıdır. Digər tərəfdən elektron mərkəzi sahədəki hərəkəti zamanı həmişə atomun daxilində qalırsa, yəni məhdud fəzada hərəkət edirsə, onun enerji spektri diskret (§39 bax), atomun hüdudlarından kənara çıxa bilən hallarda isə kəsilməz olar. Biz bu iki halın hər ikisinin təhlili ilə məşğul olacağıq.

a) $E < 0$ halının təhlili

(40.13) tənliyini həll etmək üçün adsız kəmiyyətlərə keçək:

$$\rho = \frac{r}{\hbar^2 / me^2} = \frac{r}{a}, \quad \varepsilon = \frac{2E\hbar^2}{me^4} = \frac{E}{E_1} \quad (40.14)$$

Burada

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ sm} \quad (40.15)$$

birinci Bor orbitinin radiusu (uzunluğun atom vahidi),

$$E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a} = 13,55 \text{ eV} \quad (40.16)$$

($\frac{e^2}{a} = 27,21 \text{ eV}$ – enerjinin atom vahidi). Onda (40.13) tənliyi:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0 \quad (40.17)$$

şəklinə düşür.

Dalğa funksiyasının bundan qabaqkı paraqrafda aparılan asimptotik xassələrinin tədqiqinə əsasən (40.17) tənliyinin $\rho \rightarrow \infty$ da ($r \rightarrow \infty$) sonlu qalan həllini

$$u(\rho) = e^{-\alpha\rho} f(\rho), \quad \alpha = \sqrt{-\varepsilon} \quad (40.18)$$

şəklində axtarmaq olar. Burada tələb olunur ki, $f(\rho)$ funksiyası $\rho \rightarrow \infty$ da $e^{-\alpha\rho}$ -nun sıfıra yaxınlaşmasına nisbətən daha kiçik sürətlə sonsuzluğa yaxınlaşsın. Burada $f(\rho)$ üçün

$$\frac{d^2f(\rho)}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f(\rho) = 0 \quad (40.19)$$

tənliyi alınır.

İndi də (40.19) tənliyinin $\rho=0$ ($r=0$) -da sonlu qalan ümumi həllini (39.24)-ə əsasən

$$f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \quad (40.20)$$

şəklində axtaraq. $f(\rho)$ -nun bu ifadəsini (40.19)-da yerinə yazıb, birinci və dördüncü hədlərində k -nı $k+1$ ilə əvəz etməklə sırada bütün hədlərin üstlərini bərabərləşdirsək (sırada sıfıra bərabər olan hədləri aradan çıxarsaq),

$$\sum_{k=0}^{\infty} \{[(k+l+1)(k+l+2) - l(l+1)]a_{k+1} - [2\alpha(k+l+1) - 2Z]a_k\} \rho^{k+l} = 0 \quad (40.21)$$

(40.20) sırası o vaxt (40.19) tənliyinin həlli olar ki, (40.21) bərabərliyi ρ -nun $(0, \infty)$ intervalındakı bütün qiymətlərində eynilik kimi ödənilsin, başqa sözlə, ρ -nun hər bir üstünün əmsalı sıfıra bərabər olsun:

$$[(k+l+1)(k+l+2) - l(l+1)]a_{k+1} - [2\alpha(k+l+1) - 2Z]a_k = 0$$

və buradan a_k əmsalları üçün

$$a_{k+1} = \frac{2\alpha(k+l+1) - 2Z}{(k+l+1)(k+l+2) - l(l+1)} a_k \quad (40.22)$$

rekurent düsturu alınır,

Asanlıqla göstərmək olar ki, (40.20) sırası, yaxud (40.12) funksiyası ρ -nun kifayət qədər böyük qiymətlərində sonsuzluğa yaxınlaşır, yəni $\rho=0$ -da sonlu qalan həll, $\rho \rightarrow \infty$ -da ümumiyyətlə sonlu qalmaya bilər. $R(\rho)$ radial funksiyanın $R(\rho \rightarrow \infty)=0$ şərtini ödəməsi üçün (40.20) sırasının ən yüksək üstlü həddi sonlu qalmalıdır. Bu şərt o zaman ödənilər ki, (40.20) sırası hər hansı bir $k=n_r$ həddində kəsilsin. Bu halda $f(\rho)$ funksiyası çoxhədlilyə (polinoma) çevrilir və $R(\rho)$ funksiyası $\rho \rightarrow \infty$ -da sıfıra yaxınlaşır.

(40.20) sırasının $k=n_r$ həddində kəsilməsi üçün a_k əmsalları

$$\begin{aligned} a_k &\neq 0, & k &\leq n_r \\ a_k &= 0, & k &> n_r \end{aligned} \quad (40.23)$$

şərtini ödəməlidir. (40.22) bərabərliyində (40.23) şərtinin ödənilməsi üçün

$$2\alpha(n_r + l + 1) - 2Z = 0 \quad (40.24)$$

olmalıdır. Buradan, α parametri üçün

$$\alpha = \frac{Z}{n_r + l + 1} = \frac{Z}{n}, \quad n = n_r + l + 1 \quad (40.25)$$

alınır, yəni sıranın kəsilməsi α parametrinin (40.25) ilə verilmiş qiymətində baş verir. n_r və l müsbət tam ədədlər olduğundan, $n = n_r + l + 1$ ədədi də

müsbət tam ədəd olur. Burada n – baş kvant ədədi, l – azimutal (orbital) kvant ədədi və n_r – radial kvant ədədi adlanır. n_r və l ədədlərinin hər ikisi sıfırdan başlayaraq qiymət aldığından, baş kvant ədədi n vahiddən ($n=1$) ∞ -luğa kimi tam müsbət qiymətlər alır: $n=1, 2, 3, \dots, \infty$.

§14-də l -in yuxarı sərhədi təyin edilməmişdi. (40.25)-dən çıxır ki, l -in yuxarı sərhədi ($n_r=0$ -a uyğun) $l_{max}=n-1$ olur, yəni n -in verilmiş qiymətində l -orbital (azimutal) kvant ədədi $0, 1, 2, \dots, n-1$ qiymətlərini alır.

(40.14), (40.18) və (40.25)-dən

$$\varepsilon = \frac{E}{E_1} = -\alpha^2 = -\frac{Z^2}{n^2} \text{ və ya } E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{\hbar R Z^2}{n^2}, \quad (40.26)$$

burada $R = \frac{me^4}{2\hbar^3}$ – *Ridberq sabiti* adlanır.

Buradan görünür ki, sistemin tam enerjisi baş kvant ədədi n ilə təyin olunur. n -in müxtəlif qiymətlərinə uyğun E_1, E_2, \dots enerji səviyyələri hidrogen və hidrogenəbənzər atomların **stasionar kvant halları** adlanır. E_n -in yalnız (40.26) ilə verilmiş qiymətlərində $R(r)$ radial funksiyası birqiymətli və sonlu qalır.

Nüvənin Kulon sahəsində hərəkət edən elektronun enerji səviyyələri üçün (40.26) ifadəsi, ilk dəfə Nils Bor tərəfindən, özünün yarımklassik kvant nəzəriyyəsində alınmışdı. Lakin Bor nəzəriyyəsində əsassız qeyd olunurdu ki, r ədədi $r=0$ qiyməti ala bilməz. Kvant mexanikasında isə belə əsassız qeydə heç bir ehtiyac yoxdur, (40.25)-dən görünür ki, r -in ən kiçik qiyməti $r=1$ -dir. Kulon sahəsində hərəkət edən zərrəciyin $r=1$ qiymətinə ən aşağıda yerləşmiş enerji səviyyəsi (əsas halı) uyğundur, r artdıqca enerji səviyyələri arasındakı məsafə (yəni ΔE enerjilər fərqi) kiçilir, $r \rightarrow \infty$ da $\Delta E \rightarrow 0$ yaxınlaşır və enerjinin diskret spektri kəsilməz spektrə çevrilir (bax. şəkil 14).

Bildiyimiz kimi, hər bir kvant mexaniki tənliyin həlli uyğun operatorun məxsusi qiymətlər spektrinin və məxsusi funksiyalar çoxluğunun tapılması ilə nəticələnəlməlidir. (40.26) ifadəsi (40.9) tənliyinin məxsusi qiymətlər spektrini verir. İndi də onun məxsusi funksiyalarını tapaq.

α -nın (40.25) ilə verilmiş qiymətini (40.22) -də yazıb

$$(k+l+1)(k+l+2) - l(l+1) = (k+1)(k+2l+2)$$

bərabərliyini nəzərə alsaq,

$$a_{k+1} = -\frac{2Z(n - (k + l + 1))}{n(k + 1)(k + 2l + 2)} a_k \quad (40.22')$$

alınar. Burada k -ya qiymət verməklə (40.20) sırasına daxil olan bütün əmsallar (a_n , -ə kimi) ixtiyari a_0 əmsalı ilə ifadə edilə bilər. a_0 isə dalğa funksiyasının normalanma şərtindən tapılar. Doğrudan da (40.22')-dən

$$a_1 = -\frac{2Z}{n} \cdot \frac{n-l-1}{1!(2l+2)} a_0$$

$$a_2 = -\frac{2Z}{n} \cdot \frac{n-l-2}{2!(2l+3)} a_1 = \left(\frac{2Z}{n}\right)^2 \cdot \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)} a_0$$

və i. a. Beləliklə, $f(\rho)$ funksiyası üçün

$$f(\rho) = \rho^{l+1} a_0 \left\{ 1 - \frac{n-l-1}{1!(2l+2)} \frac{2Z\rho}{n} + \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)} \left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^2 - \dots + (-1)^{n_r} \frac{(n-l-1)(n-l-2) \dots 1}{n_r!(2l+2)(2l+3) \dots (2l+n_r+1)} \left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^{n_r} \right\}. \quad (40.27)$$

Riyazi fizikada hiperhəndəsi funksiyalar nəzəriyyəsiindən məlumdur ki, çirəlmş hiperhəndəsi funksiya

$$F(\beta, \gamma, z) = 1 + \frac{\beta z}{\gamma 1!} + \frac{\beta(\beta+1) z^2}{\gamma(\gamma+1) 2!} + \frac{\beta(\beta+1)(\beta+2) z^3}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2) 3!} + \dots \quad (40.28)$$

şəklinə malikdir; burada β və γ ixtiyari kompleks parametrlər, z dəyişəni də ümumiyyətlə, kompleks ola bilər.

Asanlıqla göstərmək olar ki, bu sıra $z \rightarrow \infty$ -da e^z kimi sonsuzluğa yaxınlaşır. Buradan çıxır ki, sistemin dalğa funksiyasını (40.28) sırası ilə ifadə etmək istəsək, o, qüvvə mərkəzindən istənilən qədər uzaq məsafələrdə sonluluq şərtini ödəməzdi. Lakin, (40.21) sırası z -in bütün sonlu, β -nın ixtiyari, γ -nın isə sıfır və mənfi tam ədədə bərabər olmayan qiymətlərində sonlu qalır. β da tam mənfi ədədə və ya sıfır bərabərdirsə, (40.20) sırası $|\beta|$ üstlü polinoma çevrilir.

Beləliklə, $\beta = -(n-l-1)$, $\gamma = 2l+2$, $z = \frac{2Z\rho}{n}$ qəbul etsək, (40.28) sırası (40.27)-də böyük mətərizədə verilmiş polinom olur:

$$\begin{aligned}
F(-(n-l-1), 2l+2, \frac{2Z\rho}{n}) &= 1 - \frac{n-l-1}{l!(2l+2)} \frac{2Z\rho}{n} + \\
&+ \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)} \left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^2 + \dots \\
&\dots + (-1)^{n_r} \frac{(n-l-1)(n-l-2)\dots 1}{n_r!(2l+2)\dots(2l+n_r+1)} \left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^{n_r}. \quad (40.29)
\end{aligned}$$

Bunu (40.27)-də nəzərə alsaq,

$$f(\rho) = \rho^{l+1} a_o F(-(n-l-1), (2l+2), \frac{2Z\rho}{n}).$$

(40.12), (40.18) və (40.27) bərabərliklərinə əsasən $R(r)$ radial funksiyası üçün (n və l kvant ədədlərindən asılı olduğundan)

$$R_{n,l}(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^l F(-(n-l-1), 2l+2, \xi) \quad (40.30)$$

ifadəsi alınır, burada

$$\xi = \frac{2Z\rho}{n} \quad (40.31)$$

işarəsi qəbul olunmuşdur.

Cırılşmış hiperhəndəsi funksiyanın polinoma çevrilməsi, yəni $-(n-l-1)$ -in mənfi ədəd olması tələbindən alınır ki,

$$n-l-1 \geq 0 \text{ və ya } n \geq l+1 \quad (40.32)$$

olmalıdır. l müsbət tam ədəd olduğundan, n -in də müsbət tam ədəd olması bir daha təsdiq olunmuş olur.

(40.29) ilə verilmiş $F(-k, \gamma, z)$ polinomu daha yığcam şəkildə yazıla bilər:

$$F(-k, \gamma, z) = \frac{1}{\gamma(\gamma+1)\dots(\gamma+k-1)} z^{1-\gamma} e^z \frac{d^k}{dz^k} (e^{-z} z^{\gamma+k-1}). \quad (40.33)$$

γ parametri $\gamma=m$ tam müsbət ədədə bərabər olub, $0 \leq m \leq k$ intervalında dəyişirsə, $F(-k, m, z)$ polinomu sabit dəqiqliyi ilə ümumiləşdirilmiş Lager polinomu üzərinə düşür:

$$L_k^m(z) = (-1)^k \frac{(k!)^2}{m!(k-m)!} F(-(k-m), m+1, z) =$$

$$= \frac{k!}{(k-m)!} e^z \frac{d^k}{dz^k} (e^{-z} z^{k-m}) = (-1)^m \frac{k!}{(k-m)!} e^z z^{-m} \frac{d^{k-m}}{dz^{k-m}} (e^{-z} z^k) \quad (40.34)$$

$m=0$ -a uyğun

$$L_k^0(z) = e^z \frac{d^k}{dz^k} (e^{-z} z^k)$$

polinomu sadəcə Lager polinomu adlanır. (40.33) və (40.34) bərabərliklərindən alınır ki, ümumiləşmiş polinom Lager polinomu ilə

$$L_k^m(z) = \frac{d^m}{dz^m} L_k^0(z) \quad (40.35)$$

kimi əlaqədardır.

(40.30)-a daxil olan hiperhəndəsi funksiya ilə ona uyğun ümumiləşdirilmiş Lager polinomu arasındakı əlaqəni yazsaq. (40.34)-də $m=2l+1$ $k-m=n-l-1$ götürsək, $k=n-l-1+m=n-l-1+2l+1=n+l$ və

$$L_{n+l}^{2l+1}(\xi) = (-1)^{n+l} \frac{[(n+l)!]}{(2l+1)!(n-l-1)!} F(-(n-l-1), 2l+2, \xi) \quad (40.36)$$

olar.

Məsələnin həllində və bu axırda təsadüf olunan sabitləri radial funksiyanın normalayıcı vuruğunun tərkibinə daxil etsək, $R_{nl}(\xi)$ üçün

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) \quad (40.37)$$

ifadəsi alınır. N_{nl} vuruğu

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^2(\xi) r^2 dr = 1 \quad (40.38)$$

normalanma şərtindən tapılır:

$$N_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l)!}} \left(\frac{2Z}{na}\right)^{3/2}. \quad (40.39)$$

(39.9) düsturuna əsasən hidrogenəbənzər atomların ümumi dalğa funksiyası $R_n(r)$ radial funksiya ilə hərəkət miqdarı momenti operatorunun $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ məxsusi funksiyası hasilinə bərabərdir:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = R_{nl}(r)P_l^m(\cos \theta)e^{im\varphi} \quad (40.40)$$

və bu kvant mexaniki sistemlərin $\{\Psi_{nlm}\}$ məxsusi funksiyalar çoxluğu n, l və m kvant ədədləri çoxluğu ilə təyin olunur.

Sferik simmetrik sahədəki hərəkət halında sistemin Hamilton operatoru \bar{H} , hərəkət miqdarı momenti kvadratı operatoru \bar{L}^2 , hərəkət miqdarı momentinin z oxu üzrə proyeksiyası operatoru \bar{L}_z və fəza koordinatlarının inversiya operatoru \bar{I} qarşılıqlı kommutasiya etdiyindən (39.2)–(39.5) tənliklərinə görə $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ funksiyası bu dörd operatorun məxsusi funksiyası olur. Başqa sözlə,

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} \quad (40.41)$$

$$L^2 = \hbar^2l(l+1) \quad (40.42)$$

$$L_z = m\hbar \quad (40.43)$$

$$I = \lambda(-1)^l \quad (40.44)$$

kəmiyyətləri eyni zamanda müəyyən qiymət alır.

Buradan görünür ki, baş kvant ədədi n –stasionar halın enerjisini, orbital (və ya azimutal) kvant ədədi l –hərəkət miqdarı momentini və uyğun stasionar halın cütliyünü, nəhayət, maqnit kvant ədədi m –hərəkət miqdarı momentinin ixtiyarı z oxu üzrə götürülmüş proyeksiyasını təyin edir. Beləliklə, (n, l, m) kvant ədədlər çoxluğu sistemin mümkün olan stasionar halların diskret çoxluğunu birqiymətli təyin etməyə imkan verir.

Doğrudan da, (40.44)-də daxil olan λ vuruğu sistemin daxili cütliyünü təyin edir. O, sistemin təbiətindən aslıdır. Atomda elektronun nüvəyə nəzərən hərəkəti baxımından, hidrogen və hidrogenəbənzər atomların stasionar halları, nüvənin sferik simmetrik sahəsində hərəkət edən elektronun kvant hallarının eynidir. Bu halda λ elektronun təbiətini xarakterizə edir. Elektronun atomdakı bütün stasionar halları üçün o, eyni bir qiymətə

malik olur və stasionar halların cütlüyü $J=(-1)^l$ vuruğu ilə təyin olunur. l -in sıfır və cüt qiymətlərində baxılan halın cütlüyü müsbət ($J=1$), tək qiymətlərində isə mənfi ($J=-1$) olur.

Enerjinin (40.41) ilə verilmiş ifadəsindən görünür ki, sistemin tam enerjisi yalnız n baş kvant ədədindən, stasionar halların (40.40)-la verilmiş dalğa funksiyası isə üç (n, l, m) kvant ədədindən asılıdır. n -in verilmiş qiymətində l kvant ədədi 0-dan $n-1$ -ə qədər n müxtəlif qiymət alır, yəni hamiltonianın hər bir E_n məxsusi qiymətinə l -in qiyməti ilə fərqlənən n ($l=0, 1, 2, \dots, n-1$) sayda xətti asılı olmayan məxsusi funksiya uyğun gəlir. l -in verilmiş qiymətində isə m maqnit kvant ədədi $-l$ -dən $+l$ -ə kimi $(2l+1)$ müxtəlif qiymət alır, yəni n və l -in verilmiş qiymətləri ilə təyin olunan enerji səviyyəsinə m ilə fərqlənən ($m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$) $2l+1$ xətti asılı olmayan məxsusi funksiya uyğun olur. Beləliklə, enerjinin verilmiş E_n qiymətinə

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = (n-1)n + n = n^2 \quad (40.45)$$

sayda müxtəlif dalğa funksiyaları uyğundur.

Buradan alınır ki, hidrogen və hidrogenəbənzər atomların hər bir E_n enerji səviyyəsi cırlaşmışdır və cırlaşma dərəcəsi n^2 -na bərabərdir.

Qeyd edək ki, sistemin əsas stasionar ($n=1, l=0, m=0$) halından başqa, onun enerjisinin hər bir qiymətinə cütlüyü həm müsbət (l -cüt) və həm də mənfi (l -tək) olan hallar uyğundur. Doğrudan da, eyni bir enerji səviyyəsinə uyğun iki müxtəlif məxsusi funksiyanın xətti kombinasiyası olan

$$\Psi_{nl'} = a \Psi_{nl} + b \Psi_{n'l'}$$

funksiya da həmin E_n enerji səviyyəsinə uyğundur. Lakin (nl) və $(n'l')$ halların cütlüyü əks işarəlidirsə $\Psi_{nl'}$ funksiyası ilə təsvir olunan hal müəyyən cütliyə malik olmur. Deməli, Kulon sahəsində hərəkət edən müəyyən enerjili zərrəcik yalnız cütliyi müəyyən olan halda yox, cütliyi qeyri-müəyyən olan halda da ola bilər.

Stasionar halların m -ə görə «məcburi» adlanan cırlaşması bütün mərkəzi sahələrdəki hərəkət üçün xasdır. Bu, qüvvə mərkəzindən keçən bütün istiqamətlərin eynihüquqlu (ehtimalı) olması ilə əlaqədardır. Bu halda sistemin enerjisi, hərəkət miqdarı momenti vektorunun fəzadakı istiqamətindən, xüsusi halda onun oz oxu üzrə götürülmüş proyeksiyasından asılı olmur.

Orbital kvant ədədinə görə «təsadüfi» adlanan cırlaşma isə yalnız Kulon qarşılıqlı təsire xasdır. Kulon sahəsində təsadüfi cırlaşma hamiltonianın sferik simmetriyadan əlavə daha başqa bir simmetriyaya malik olması nəticəsidir. Kulon potensialı daxil olan Şredinger tənliyi $O(4)$ dördölçülü fir-

lanma qrupuna görə invariantdır. \tilde{H} -in belə simmetriyası Şredinger tənliyində həm sferik və həm də parabolik koordinat sistemlərində dəyişənlərə ayırmaq əməliyyatını aparmağa imkan verir. Başqa təbiətli mərkəzi sahələrdə isə, məsələn, bir optik elektronlu atomlarda daxili elektronların valent elektrona təsirinin nəzərə alınması hesabına (bax §89) və bəzi başqa hallarda l -ə görə cırılma ortadan götürülür. Bu halda hər bir E_n səviyyəsi n sayda müxtəlif E_{nl} alt səviyyəyə parçalanır. Sistem sferik simmetriyanı pozan hər hansı xarici sahədə olduqda, məsələn, maqnit sahəsini də əlavə etsək, m -ə görə cırılma da aradan qalxır. Bu halda E_n enerji səviyyəsi n^2 sayda E_{nlm} alt səviyyələrə parçalanmış olur (bax §77 və 78).

Beləliklə, n baş kvant ədədi ilə təyin olunan enerjinin hər bir qiymətinə sistemin l orbital və m maqnit kvant ədədləri ilə fərqlənən n^2 müxtəlif halı uyğun gəlir. Bu halların təsnifatını verək. Bunun üçün bir də yada salaq ki, n -in hər bir verilmiş qiymətində l kvant ədədi $l=0, 1, 2, \dots, n-1$ -ə qədər, l -in hər bir verilmiş qiymətində isə m kvant ədədi $m=-l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l$ -ə qədər $2l+1$ müxtəlif qiymət alır.

Kvant mexanikasında n baş kvant ədədinin $n=1$ qiymətinə uyğun hallar çoxluğu K -təbəqə, $n=2$ -yə uyğun hallar çoxluğu L -təbəqə, $n=3$ -ə uyğun hallar çoxluğu M -təbəqə, $n=4$ -ə uyğun hallar çoxluğu N -təbəqə və i.a. adlanır. Hər bir təbəqə bir neçə örtükdən ibarətdir. Belə ki, $l=0$ qiymətinə uyğun hallar çoxluğu s -örtük, $l=1$ -ə uyğun hallar çoxluğu p -örtük, $l=2$ -də d -örtük, $l=3$ -də f -örtük, $l=4$ -də g -örtük və i.a. adını daşıyır. Baxılan örtüyün hansı təbəqəyə aid olduğunu göstərmək üçün örtüyün işarəsi qabağında n -in uyğun təbəqəni təyin edən qiyməti yazılır: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ və i.a. $n=1$ olduqda, $l=0, m=0$ olduğundan K təbəqəsi yalnız $1s$ örtüyündən ibarət olur və Ψ_{100} -dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. $n=2$ -də l və m ədədləri $l=0, m=0$ ($2s$) və $l=1, m=1, 0, -1$ ($2p$) qiymətlərini alır və L təbəqəsi $2s$ və $2p$ kimi iki örtükdən təşkil olunur. L -təbəqəsinə $2s$ -örtüyü Ψ_{200} , $2p$ örtüyünə isə $\Psi_{210}, \Psi_{211}, \Psi_{21-1}$ kimi funksiyalar ilə təsvir olunan kvant halları daxil olur. Deməli, sistemin E_2 enerji səviyyəsində atomun dörd kvant halı bir-birinin üzərinə düşür, yəni seçilmir və səviyyənin cırılma tərtibi dördə bərabərdir. $n=3$ -də l və m kvant ədədləri $l=0, m=0$ ($3s$), $l=1, m=1, 0, -1$ ($3p$) və $l=2, m=2, 1, 0, 1, -1, -2$ ($3d$) qiymətlərini alır və M -təbəqəsi $3s, 3p$ və $3d$ kimi üç örtükdən ibarət olur.

Atomun E_3 enerji səviyyəsində Ψ_{300} ($3s$), $\Psi_{311}, \Psi_{310}, \Psi_{23-1}$ ($3p$), $\Psi_{322}, \Psi_{321}, \Psi_{320}, \Psi_{32-1}, \Psi_{32-2}$ ($3d$) kimi dalğa funksiyaları ilə təsvir olunan doqquz kvant halı bir-birinin üzərinə düşür. Səviyyə doqquzuncu tərtibdən cırılma olmuş olur. Buna oxşar olaraq $n=4$ -ə uyğun N təbəqəsi $4s, 4p, 4d, 4f$ kimi dörd örtükdən təşkil olunur və sistemin E_4 səviyyəsi on altı müxtəlif kvant halının yığınıni təşkil edir və i.a.

Aşağıdakı cədvəldə $n=1, 2, 3$ enerji səviyyələrinin radial funksiyaları göstərilmişdir:

n	l		halın ifadəsi $R_{nl}(\xi)$	halın cırlaşma tərtibi
1	0	1s	$\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} 2e^{-\xi/2}$	1
2	0	2s	$\left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} (2-\xi)e^{-\xi/2}$	4
	1	2p	$\left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{\xi}{\sqrt{3}}e^{-\xi/2}$	
3	0	3s	$\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} 2\left(1-\xi+\frac{\xi^2}{6}\right)e^{-\xi/2}$	9
	1	3p	$\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} \frac{4}{3\sqrt{2}}\xi\left(1-\frac{\xi}{4}\right)e^{-\xi/2}$	
	2	3d	$\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} \frac{\xi^2}{3\sqrt{10}}e^{-\xi/2}$	

r radius vektorun mütləq qiymətinin müxtəlif üstlərinin ixtiyari (nlm) halında orta qiymətlərinin ifadələrini də burada göstərək (onlar bizə sonra lazım olacaq)*:

$$\bar{r} = \int \Psi_{nlm}^+(r)r\Psi_{nlm}(d\bar{r}) = \int_0^{\infty} R_{nl}(r)rR_{nl}(r)r^2 dr = \frac{a}{2Z} [3n^2 - l(l+1)].$$

Buna oxşar olaraq

$$\bar{r}^2 = \frac{a^2 n^2}{2Z} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] \quad (40.46)$$

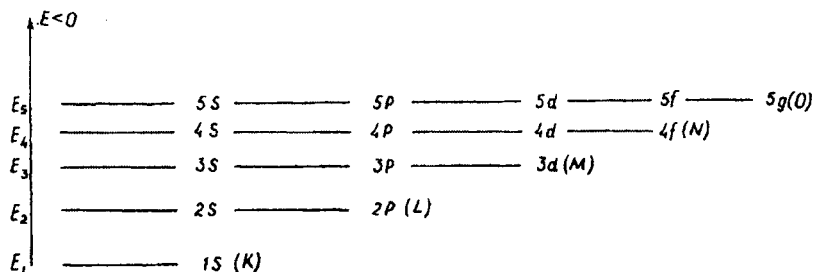
$$\bar{r}^{-1} = \frac{Z}{an^2}, \bar{r}^{-2} = \frac{Z^2}{a^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)}.$$

Hidrogen və hidrogenəbənzər atomların 1s halı onun əsas halı (bu hal cırlaşmamış olur), qalan 2s, 2p, 3s, 3p, 3d və i.a. halları isə cırlaşmış hallar

* Onların hesablanması yolu A.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский, «Квантовая механика», 1979 kitabının 217-ci səhifəsində göstərilmişdir.

adlanır.

Atomun təbəqə və örtükləri 15-ci şəkildə göstərilmişdir.



Şəkil 15. Hidrogen və hidrogenəbənzər atomların təbəqə və örtükləri.

Bu enerji spektri Borun təklif etdiyi köhnə kvant nəzəriyyəsində alınan enerji spektrinın üzərinə düşür və təcrübədə alınan nəticələri kifayət qədər yaxşı izah edir.

Bor nəzəriyyəsi spektrdə xətlərin paylanmasını (yerləşməsini) qabaqcadan söyləyə bilər. Lakin spektr xətlərinin təcrübədə müşahidə olunan incə quruluşunu izah edə bilmir. Bu məsələnin şərhı üzərində biz §75-də ətraflı dayanacağıq.

b) Rotator

$r=a$ sabit radiuslu sfera boyunca sərbəst hərəkət edən zərrəciyə *rotator* deyilir. Belə hərəkətə, sferik simmetrik sahədə potensial enerji sabit qalmaq şərtilə baş verən hərəkətin xüsusi halı kimi baxmaq olar. Doğrudan da, hər hansı bir hərəkətdə potensial enerji sabit qalırsa, onun həmin qiymətini həmişə enerjinin ölçü başlanğıcı kimi götürmək olar:

$$V(r)=\text{const}=0.$$

Onda belə hərəkət sərbəst hərəkəti xatırladır.

İndi də atomda elektronun hərəkəti zamanı onun radius vektorunun qiymətcə dəyişmədiyini və onun $r=a$ radiuslu sfera boyunca hərəkət etdiyini fərz edək. Yəqin ki, elektronun bu hərəkəti də (40.9) tənliyi ilə təsvir olunar. Baxılan halda potensial enerji $V(a)=\text{const}=0$ götürüldüyündən, (40.9) tənliyinin həlli olan (40.40) funksiyalarında bucaqlardan asılı $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ funksiyaları dəyişmir. $R_n(r)$ radial funksiya isə $R_n(r=a)=\text{const}$ olur. Bu zaman (40.13) tənliyində $r=a$, $\nabla^2 u(a) = 0$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$\left(E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2} \right) u(a) = 0$$

və belə fırlanma hərəkətinin–rotatorun tam enerji spektri

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_a} \quad (40.47)$$

(burada $I_a = ma^2$ rotatorun ətalət momentidir) məxsusi funksiyalar spektri isə

$$\Psi_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) = C_{lm} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta) \quad (40.48)$$

olur.

Bildiyimiz kimi, klassik mexanikada müəyyən mərkəz ətrafında yalnız fırlanma hərəkətində iştirak edən cismin tam enerjisi

$$E_\phi = \frac{M^2}{2I} \quad (40.49)$$

bərabərliyi ilə təyin olunur, burada M –fırlanma hərəkət miqdarı momenti, I isə cismin mərkəzə nəzərən ətalət momentidir. (40.47) və (40.49) ifadələrinə görə kvant fırlanma hərəkətinin klassikdən fərqi ondan ibarətdir ki, kvantda hərəkət miqdarı momentinin kvadratı $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ kimi diskret qiymətlər alır və (40.49) ifadəsi (40.47)-yə keçir. Klassik hərəkətdə isə o, kəsilmədən dəyişir.

(40.47) və (40.48) ifadələrində rotatorun tam enerjisi E_l yalnız l orbital kvant ədədindən, dalğa funksiyaları l və maqnit kvant ədədi m -dən asılıdır. Yuxarıda gördük ki, l -in verilmiş qiymətində m kvant ədədi $-l$ -dən $+l$ -ə kimi $2l+1$ müxtəlif qiymətlər alır. Deməli, rotatorun hər bir enerji səviyyəsi $2l+1$ tərtibdən cırlaşmış olur. l və m -ə görə cırlaşmanın səbəbləri isə yuxarıda şərh edilmişdir.

(40.40) və (40.48) ifadələrinin müqayisəsindən görünür ki, elektronun hidrogen atomundakı hərəkətinin bucaq məxsusi funksiyaları ($Y_{lm}(\theta, \varphi)$ - sferik funksiyaları) rotatorun məxsusi funksiyaları üzərinə düşür. Buradan da onların bucaqlara görə paylanma funksiyaları eyni olur. Aşağıdakı paraqrafda atomda elektronun bucaqlara görə paylanması haqqında deyilən bütün sözlər rotator üçün də doğru olacaq.

c) Radial və bucaq paylanma funksiyaları

(40.40) ifadəsi ilə verilmiş $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ dalğa funksiyasının modulunun kvadratı verilən n, l, m kvant halında olan elektronun r, θ, φ dəyişənləri ilə təyin olunan hər hansı $A(r, \theta, \varphi)$ nöqtəsinin yaxın ətrafında müşahidə olunma ehtimalını təyin edir. Bu ehtimal

$$dW_{nlm} = |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (40.50)$$

burada $dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$ sferik koordinat sistemində həcm elementi, $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ isə cisim bucağıdır. Ψ_{nlm} -in ifadəsini burada yazsaq,

$$dW_{nlm} = R_{nl}^2(r) r^2 dr |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (40.51)$$

alınar. Bu axırıncı bərabərlikdə θ və φ bucaqlarına görə inteqral alsaq, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ -nin normalanma şərtinə əsasən, θ və φ -nin ixtiyari qiymətlərində elektronun radiusu r və $r+dr$ -ə bərabər olan iki kürevi səthin (sferanın) arasında müşahidə olunma ehtimalını taparıq:

$$dW_{nl}(r) = R_{nl}^2(r) r^2 dr = w_{nl}(r) dr. \quad (40.52)$$

Buradan paylanmanın ehtimal sıxlığı

$$\frac{dW_{nl}}{dr} = R_{nl}^2(r) r^2 = w_{nl}(r) \quad (40.53)$$

atomda elektronun elektrik yükünün *radial paylanma funksiyası* adlanır.

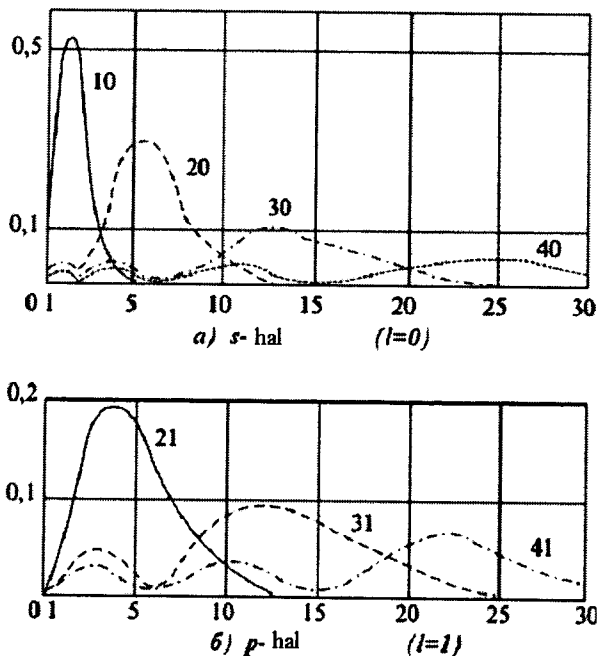
Elektronun ns və np hallarının bəziləri üçün paylanma şəkil 16 *a, b*-də göstərilmişdir*. Absis oxu boyunca Borun birinci orbitinin radiusu vahidlərində elektronun mərkəzdən olan məsafəsi ($\rho = \frac{r}{a}$ -nın qiymətləri), ordinat oxu boyunca isə $w_{nl}(r)$ ehtimal sıxlığı göstərilmişdir.

Şəkildən görünür ki, hər bir $R_{nl}(r)$ funksiyası $n_r = n - l - 1$ sayda düyün nöqtələrinə (əslində düyün səthlərinə) malikdir ($r=0$ və $r=\infty$ -a uyğun qiymətlərindən başqa).

İndi də bucaqlara görə paylanmanın təhlilinə keçək. (40.51) ifadəsini r -in bütün dəyişmə $(0, \infty)$ intervalında inteqrallasaq, elektronun radius vektoru-

* [1]-in 211-ci səhifəsində a) və b) qrafikləri.

nun istiqamətinin $d\Omega$ cisim bucağı daxilinə düşmə, yəni elektronu $d\Omega$ cisim bucağı altında müşahidə etməehtimalı, $R_n(r)$ -in (40.38) normalanma şərtinə əsasən,



Şəkil 16. a,b. Elektronun r və $r+dr$ radiuslu iki kürəvi səthin daxilində müşahidə ehtimalı.

$$dW_{nl}(\theta, \varphi) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (40.54)$$

bərabər olar. Buradan bucaqlara görə paylanma funksiyası

$$\frac{dW_{lm}}{d\Omega} = w_{lm}(\theta, \varphi) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \quad (40.55)$$

bucaq paylanma funksiyası adlanır. $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ funksiyasının (14.28') ifadəsindən görünür ki, bu paylanma φ bucağından asılı deyildir:

$$w_{lm}(\theta, \varphi) = w_{lm}(\theta) = C_{lm}^2 |P_{lm}(\cos \theta)|^2, \quad (40.55')$$

burada

$$C_{lm} = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}$$

normalayıcı vuruqdur (bax (14.27'')).

$w_{lm}(\theta)$ paylanma funksiyasının müxtəlif l, m halları üçün qrafikləri şəkil 17-də verilmişdir. Burada w_{lm} və θ polyar koordinat sistemindən istifadə edilir. Radius-vektor boyunca $w_{lm}(\theta)$ -nin qiymətləri götürülür. 0, φ -dən asılı olmadığına görə qrafiklər yz müstəvisində təsvir olunur.

Müxtəlif örtüklərin bütün ns təbəqələri üçün $l=0$ və $m=0$ və

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad \text{və} \quad W_{00}(\theta) = \frac{1}{4\pi} = \text{const} \quad (40.56)$$

olduğundan, bütün ns təbəqələrində yükün paylanması sferik simmetriyaya malikdir.

Bor nəzəriyyəsinə görə belə hərəkət dairəvi orbitlər boyunca baş verməli və o, müəyyən hərəkət miqdarı momentinə malik olmalıdır, hərəkət miqdarı momenti sıfır ($l=0$) olan hallar isə mövcud olmamalıdır. Ona görə də Bor ns ($l=0, m=0$) halları np ($l=1, m=0, \pm 1$) hallarından biri hesab edirdi. Bu isə Bor nəzəriyyəsinin çətinliklərindən biri idi. Buradan çıxır ki, ns hallarının klassik analoqu (oxşarı) yoxdur.

np təbəqələrində yükün paylanması qrafiklərini qurmaq üçün, yəqin ki, $l=1, m=0, 1, -1$ götürmək lazımdır. Onda (14.28') əsasən

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \quad (40.57)$$

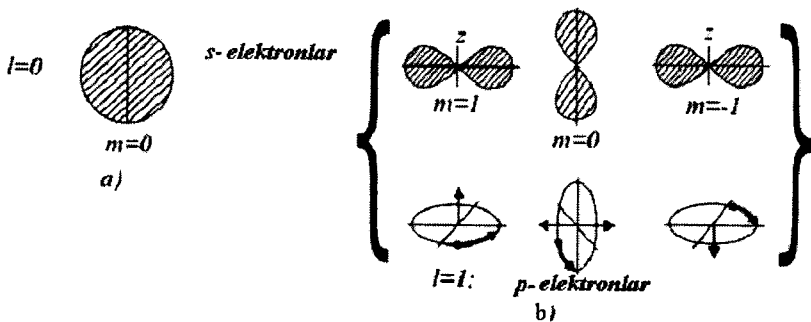
və

$$w_{10} = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta, \quad w_{11} = w_{1-1}(\theta) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \quad (40.58)$$

olar.

(40.58) ifadəsindən və şəkil 17-dən görünür ki, np təbəqələrindəki $l=1, m=0$ halında elektronun $\theta=0$ bucağının yaxın ətrafında olma ehtimalı ən çox, $\theta = \frac{\pi}{2}$ -yə uyğun ehtimal isə sıfıra bərabərdir. Bu halda onun Bor nəzəriyyəsinə uyğun orbit w_{10} -in maksimum qiyməti z oxundan keçən müstəvidə yerləşir və hərəkət miqdarı momenti z oxuna perpendikulyar olur

($L_z = m\hbar = 0$, $m = 0$), $l=1$, $m=\pm 1$ hallarına gəldikdə isə biz bunun əksini müşahidə edirik. $l=1$, $m=1$ və $l=1$, $m=-1$ hallarında elektronun $\theta=\pi/2$ bucağının yaxın ətrafında olma ehtimalı ən çox, $\theta=0$ -a uyğun ehtimalı isə sıfır bərabər olur. Bu hallarda onun Bor nəzəriyyəsinə uyğun orbitləri (w_{II} və $w_{I,-I}$ -in maksimum qiyməti) xy müstəvisində yerləşir və $l=1$, $m=1$ halında hərəkət miqdarı momenti z oxu istiqamətində ($L_z = m\hbar = \hbar$), $l=1$, $m=-1$ halında isə z -oxunun əks istiqamətində ($L_z = m\hbar = -\hbar$) yönəlmiş olur. Buna oxşar olaraq nd ($l=2$), nf ($l=3$) və i.a.hallarını da təhlil etmək olar (öhdənizə verilir).



Şəkil 17. Atomda elektronun bucaqlara görə paylanma ehtimalı.

$w_{nl}(\theta)$ ehtimal sıxlığının ifadələrindən və qrafiklərdən görünür ki, $P_l^m(\cos\theta)$ funksiyası $l=0$ -da düyün nöqtəsinə (düyün səthinə) malik deyil, onun forması sfera şəklindədir (şəkil 17-də qrafikin z oxu ətrafında fırlanmasından alınan fiqur). Bunu bütün ns halları haqqında demək olar. $l=1$, $m=0$ və $l=1$, $m=1$ hallarında isə o, bir düyün səthinə malik olur. Ümumiyyətlə isə $P_l^m(\cos\theta)$ funksiyası $l-|m|$ sayda düyün səthlərinə malikdir.

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ funksiyasının $e^{im\varphi}$ tərkib hissəsinə gəldikdə o, düyün nöqtələrinə malik deyil, lakin onun həqiqi hissəsi $\cos m\varphi$ və xəyalı (kompleks) hissəsi $i\sin m\varphi$ isə m düyün nöqtəsinə, fəzada isə düyün müstəvisinə malikdir. Beləliklə, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ funksiyası $n_r=n-l-1$ sayda sferik səthə, $l-|m|$ sayda düyün səthinə və m sayda polyar oxdan keçən düyün müstəvisinə malikdir.

q) $E>0$ halının təhlili

a) bəndində biz qarşılıqlı təsir enerjisi

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (40.59)$$

və E tam enerjisi isə diskret spektrə malik olan $E < 0$ halını təhlil etdik. İndi də $E > 0$ olan hala baxaq.

Fərz edək ki, Kulon qarşılıqlı təsirdə iştirak edən zərrəciklərin elektrik yükləri eyni işarəlidir. Belə zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir enerjisi ümumi şəkildə

$$V(r) = \frac{Z'Z''e^2}{r} \quad (40.60)$$

və $E > 0$ olar. Burada Z' və Z'' ədədləri – elektronun yük vahidlərində qarşılıqlı təsirdə olan zərrəciklərin yüklərinin sayını göstərir.

Yəqin ki, bu paragrafda alınan nəticələr elektronun atomun hüdudlarından kənara çıxmış halda da doğru qalar, çünki bu zaman elektronun tam enerjisi $E > 0$ olur.

(40.60) potensial enerjisi radius vektorun yalnız mütləq qiymətindən asılı olduğuna görə

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

dalğa funksiyasının bucaqlardan asılı $Y(\theta, \varphi)$ hissəsi heç bir dəyişikliyə uğramır və o, (14.28') əsasən

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = C_{lm} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta)$$

olur. $R(r) = \frac{\nu(r)}{r}$ radial funksiyası üçün isə (40.17) tənliyi əvəzində

$$\frac{d^2\nu(\rho)}{d\rho^2} + \left(k^2 - \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \nu(\rho) = 0 \quad (40.61)$$

tənliyi alınır. Burada $Z = Z'Z''$ və

$$k^2 = \frac{2\hbar^2 E}{me^4} \quad (40.62)$$

(40.18) oxşar olaraq, bu tənliyin $\rho \rightarrow \infty$ -a uyğun asimptotik həlli

$$\nu(\rho) = ae^{ik\rho} + be^{-ik\rho} \quad (40.63)$$

a və b sabitlərinin qiymətindən asılı olmayaraq, k -nın istənilən qiymətində (40.61) tənliyinin (40.63) həlli sonlu qalır.

(40.61) tənliyinin $\rho \rightarrow 0$ -a uyğun asimptotik həllini isə, $E < 0$ halında olduğu kimi

$$\nu(\rho \rightarrow 0) \approx \rho^{l+1}$$

şəklində təyin olunur. Beləliklə, (40.61) tənliyinin ümumi həlli

$$\nu(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} \sum a_\nu \rho^\nu \quad (40.64)$$

şəklində yazıla bilər. Bu halda (40.22) oxşar olaraq a_ν əmsalları üçün

$$a_{\nu+1} = \frac{2ik \left[(\nu+l+1) - \frac{Z}{ik} \right]}{(\nu+1)(\nu+2l+2)} a_\nu \quad (40.65)$$

rekurent düstur alınır. $\nu=0,1,2,\dots$ qiymətlərini verməklə bütün a_ν əmsallarını a_0 ilə ifadə edib, onları (40.64) sırasında yerinə yazsaq,

$$\begin{aligned} \nu(\rho) = e^{\pm ik\rho} \rho^{l+1} a_0 & \left[1 + \frac{l+1 \pm \frac{Z}{ik}}{!(2l+2)} (\pm 2ik\rho) + \right. \\ & \left. + \frac{\left(l+1 \pm \frac{Z}{ik} \right) \left(l+2 \pm \frac{Z}{ik} \right)}{2!(2l+2)(2l+3)} (\pm 2ik\rho)^2 + \dots \right] \end{aligned} \quad (40.66)$$

alınır. Bu axırıncı sıra cırılmış hiperhəndəsi funksiyanın ifadəsidir:

$$F\left(l+1 \pm \frac{Z}{ik}, 2l+2, \pm 2ik\rho\right) = 1 + \frac{l+1 \pm \frac{Z}{ik}}{!(2l+2)} (\pm 2ik\rho) + \quad (40.67)$$

$$+ \frac{(l+1 \pm \frac{Z}{ik})(1+2 \pm \frac{Z}{ik})}{2l(2l+2)(2l+3)} (\pm 2ik\rho)^2 + \dots$$

(40.66)-dan görünür ki, $\nu(\rho)$ funksiyası bir tərəfdən kəsilmədən dəyişən k dalğa ədədi, digər tərəfdən isə diskret dəyişən l orbital kvant ədədi ilə təyin olunur. Beləliklə, $R(\rho)$ radial funksiya üçün

$$R_{kl}(\rho) = \frac{\nu(\rho)}{\rho} = e^{\pm ik\rho} \rho^l F(l+1 \pm \frac{Z}{ik}, 2l+2, \pm 2ik\rho) \quad (40.68)$$

alınır. Beləliklə, $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ enerjinin, $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ hərəkət miqdarı momenti kvadratının və hərəkət miqdarı momentinin $L_z = m\hbar$ proyeksiyasının məxsusi qiymətlərinə uyğun Şredinger tənliyinin xüsusi həlli

$$\Psi_{klm} = R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (40.69)$$

və enerjinin müəyyən E_k qiymətinə uyğun ümumi həlli isə

$$\Psi_k = \sum_{l,m} C_{lm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (40.70)$$

olur.

Qeyd edək ki, R_{kl} funksiyasından, məsələn, α -zərrəciklərin ${}^A_Z X$ nüvəsinin Kulon sahəsində səpilməsi məsələsində (bu halda $Z = Z$, $Z' = 2$ və $V(r) = \frac{2Ze^2}{r}$ olar), yaxud da protonun və yaxud α -zərrəciyin nüvə daxilində hərəkətini təsvir etmək üçün istifadə edilə bilər. Bu zaman $\rho = \frac{me^2}{\hbar^2} r$ və $k^2 = \frac{\hbar^2 E}{me^4}$ ifadələrində m -i α -zərrəciyin M_α və ya protonun m_p kütləsi ilə əvəz etmək lazımdır.

§41. Hidrogenəbənzər atomların şüalanma (udulma) spektrləri və seçmə qaydası

a) Seçmə qaydası. Hələ Bor nəzəriyyəindən məlumdur ki, atom bir

stasionar enerji səviyyəsindən digərinə keçdikdə bu səviyyələrin enerjiləri fərfinə bərabər enerji buraxır və ya udur. Bu enerji şüalanma şəklində buraxılıb və ya udulursa, atomar şəklində olan maddələrin buraxdığı enerji – şüalanma spektrləri, udduğu enerji isə – udulma spektrləri şəklində təcrübədə müşahidə olunur. Bu spektrlər xəttidir və hər bir spektr xəttinin tezliyi

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad (41.1)$$

kimi təyin olunur. Burada $E_m - n'$, l' – kvant ədədləri ilə verilən stasionar səviyyənin ((40.26) bax), E_n isə n, l ilə verilən səviyyənin enerjiləridir.

Kvant mexanikasında hər hansı bir fiziki hadisənin başvermə imkanı uyğun ehtimalla xarakterizə olunur.

Şüalanma nəzəriyyəsində görəcəyimiz kimi (bax §50) atomun şüa-buraxma və şüaudma hadisələrinin ehtimalı, birinci yaxınlaşmada, onun müxtəlif multipol (dipol, kvadrupol, maqnitdipol və i.a.) momentləri operatorlarının baxılan keçidə uyğun matrisa elementlərinin kvadratının additiv cəmi ilə mütənasibdir. Axırıncılar isə öz növbəsində x, y və z koordinat operatorları matrisa elementlərinin müxtəlif üstləri ilə təyin olunur.

Atomun bir enerji səviyyəsindən digərinə keçidi zamanı n baş, l orbital, m maqnit kvant ədədlərinin bu keçidə uyğun $\Delta n = n' - n$, $\Delta l = l' - l$, $\Delta m = m' - m$ dəyişmələrində baxılan matrisa elementi (keçid ehtimalı) sıfıra bərabər olarsa, belə keçid *qadağan olunmuş keçid*, əks halda isə *mümkün olan keçid* adlanır. Qeyd edək ki, atomun multipol şüalanmasında baxılan keçid multipol momentlərdən biri üçün qadağan, digəri üçün isə mümkün ola bilər. Bu haqda biz şüalanmanın kvant nəzəriyyəsi paraqrafında ətraflı danışacağıq. İndi isə x, y, z operatorlarına uyğun matrisa elementlərinin $\Delta n, \Delta l, \Delta m$ dəyişmələrinin hansı qiymətləri üçün sıfırdan fərqli qaldığını göstərək.

Dekart koordinatlardan sferik koordinatlara keçək və x, y, z dəyişənləri əvəzinə aşağıdakı dəyişənləri götürək:

$$\begin{aligned} \xi &= x + iy = r \sin \theta e^{i\varphi}, \\ \eta &= x - iy = r \sin \theta e^{-i\varphi}, \\ \zeta &= z = r \cos \theta. \end{aligned} \quad (41.2)$$

Fiziki baxımdan bu, elektronun atomdakı hərəkətinin $\zeta=z$ oxu boyunca irəliləmə, xy müstəvisində isə $\xi=x+iy$ ilə təsvir olunan sağ fırlanma, $\eta=x-iy$ ilə təsvir olunan sol fırlanma hərəkətlərinə ayırmaq deməkdir.

Yəqin ki, (41.2) ilə verilmiş operatorların

$$\xi_{n'l'm'l'n'm} = \langle n', l', m' | \xi | n, l, m \rangle = \int \Psi_{n'l'm}^+ r \sin \theta e^{i\varphi} \Psi_{nlm} r^2 dr d\Omega \quad (41.3a)$$

$$\eta_{n'l'm',nlm} = \langle n', l', m' | \eta | n, l, m \rangle = \int \Psi_{n'l'm'}^+ r \sin \theta e^{-i\varphi} \Psi_{nlm} r^2 dr d\Omega \quad (41.3b)$$

$$\zeta_{n'l'm',nlm} = \langle n', l', m' | \zeta | n, l, m \rangle = \int \Psi_{n'l'm'}^+ r \cos \theta \Psi_{nlm} r^2 dr d\Omega \quad (41.3v)$$

matrisa elementlərindən hər hansı birinin sıfırdan fərqli qalması $\langle n'l'm' | \rightarrow |nlm\rangle$ keçidinin mümkün olduğuna dəlalət edəcək. $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ dalğa funksiyasının (40.40) ilə verilmiş ifadəsini burada yazsaq,

$$\langle n', l', m' | \xi | n, l, m \rangle = \int_0^\infty R_{n'l'} R_{nl} r^3 dr \int Y_l^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta e^{i\varphi} Y_l^m d\Omega \quad (41.4a)$$

$$\langle n', l', m' | \eta | n, l, m \rangle = \int_0^\infty R_{n'l'} R_{nl} r^3 dr \int Y_l^{m'}(\theta, \varphi) \sin \theta e^{-i\varphi} Y_l^m d\Omega \quad (41.4b)$$

$$\langle n', l', m' | \zeta | n, l, m \rangle = \int_0^\infty R_{n'l'} R_{nl} r^3 dr \int Y_l^{m'}(\theta, \varphi) \cos \theta Y_l^m d\Omega \quad (41.4v)$$

Burada $Y_l^m(\theta, \varphi)$ funksiyaları arasındakı

$$\cos \theta Y_l^m = a Y_{l+1}^m + b Y_{l-1}^m \quad (41.5)$$

və

$$\sin \theta e^{\pm i\varphi} Y_l^m = a_{\pm} Y_{l+1}^{m\pm 1} + b_{\pm} Y_{l-1}^{m\pm 1} \quad (41.6)$$

rekurent düsturlardan istifadə edib, həmin funksiyaların ortonormalanma şərtini ödədiyini nəzərə aldıqda

$$\langle n', l', m' | \xi | n, l, m \rangle = \chi \cdot (a_+ \delta_{r,l+1} + b_+ \delta_{r,l-1}) \delta_{m',m+1} \quad (41.7a)$$

$$\langle n', l', m' | \eta | n, l, m \rangle = \chi \cdot (a_- \delta_{r,l+1} + b_- \delta_{r,l-1}) \delta_{m',m-1} \quad (41.7b)$$

$$\langle n', l', m' | \zeta | n, l, m \rangle = \chi \cdot (a \delta_{r,l+1} + b \delta_{r,l-1}) \delta_{m',m} \quad (41.7v)$$

olur, burada χ ilə

$$\chi = \int_0^\infty R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) r^3 dr \quad (41.8)$$

inteqralı işarə olunmuşdur, a , b , a_{\pm} və b_{\pm} əmsalları bilavasitə hesablanır*:

$$a = \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}; \quad b = \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}, \quad (41.9)$$

eləcə də

$$a_{\pm} = \sqrt{\frac{(l+2 \pm m)(l+1 \pm m)}{(2l+1)(2l+3)}}; \quad b_{\pm} = \mp \sqrt{\frac{(l \mp m)(l-1 \mp m)}{(2l+1)(2l-1)}} \quad (41.10)$$

(41.7b) bərabərliyindən

$$\Delta m = m' - m = 0, \quad \Delta l = l' - l = \pm 1 \quad (41.11a)$$

(41.7a,b)-dən isə

$$\Delta m = m' - m = \pm 1, \quad \Delta l = l' - l = \pm 1 \quad (41.11b)$$

alınır.

χ inteqralına gəldikdə isə (41.11a) və (41.11b) münasibətlərinə görə burada

$$\int_0^{\infty} R_{n',l \pm 1} R_{nl} r^3 dr$$

kimi iki inteqrala təsadüf edirik. Onların bilavasitə hesablanması göstərir ki, n' və n baş kvant ədədlərinin istənilən qiymətləri üçün bu inteqrallar sıfırdan fərqlidir (bax [29], səh. 230). Deməli, mümkün keçidlər zamanı n baş kvant ədədi istənilən kimi dəyişə bilər.

Beləliklə, atomun iki stasionar səviyyə arasında o vaxt keçid mümkün olar ki, onun üçün

$$\Delta n \text{ -istənilən, } \Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1 \quad (41.12)$$

seçmə qaydaları ödənilsin**.

*Bax A.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский, «Квантовая механика», Москва, «Наука», 1979, səh. 199.

** (41.12) seçmə qaydaları yalnız atomun dipol şüalanması, yəni onun dipol momentinin dəyişməsi hesabına baş verən şüalanma üçün doğrudur. Yüksək tərtibli momentlərin dəyişməsi hesabına atomun şüalanması üçün seçmə qaydaları başqadır (bax §51).

b) Şüalanma (şüaudma) spektrləri

Atomun stasionar səviyyəsinin enerjisi $E_{n,l}$, hidrogen atomundan başqa bütün digər elementlərin atomları üçün yalnız n baş kvant ədədindən yox, l orbital kvant ədədindən də asılı olur (bax §89).

$\frac{E_{nl}}{\hbar}$ nisbəti atomun spektral termi adlanır, onu $\frac{E_{nl}}{\hbar} = (nl)$ kimi işarə edirlər. Onda (41.1) ilə verilmiş şüalanma tezliyini, ümumi şəkildə

$$\omega_{n'n} = \frac{E_{n'l'}}{\hbar} - \frac{E_{nl}}{\hbar} = (n'l') - (nl) \quad (41.13)$$

kimi yazmaq olar. Hidrogenəbənzər atomlarda isə spektral term

$$(n,l) = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{me^4 Z^2}{2n^2 \hbar^3} = \frac{RZ^2}{n^2}, \quad (41.14)$$

burada

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3} \quad (41.15)$$

Ridberq sabiti adlanır. Bu halda şüalanma tezliyi üçün

$$\omega_{n'n} = RZ^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (41.16)$$

alınır.

Atomar hidrogenin ($Z=1$) şüalanma spektrində təcrübədə müşahidə olunan Layman seriyası $n \leq 1$ səviyyəsinə $n > 1$ səviyyələrindən keçidlər zamanı alınır. $n \leq 1$ olanda $l=0$ qiyməti aldığından bu səviyyə $1s$ səviyyəsi olur, n və l kvant ədədləri üçün alınmış (41.12) seçmə qaydalarını nəzərə alsaq, Layman seriyasının spektral xətləri (np) səviyyələrindən ($1s$) səviyyəsinə keçidlərin nəticəsidir:

$$\omega = (1s - np) = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (41.17)$$

burada $n=2, 3, 4, \dots$, -dir.

Balmer seriyası isə $n \leq 2$ səviyyəsinə $n > 2$ səviyyələrindən keçidlərin

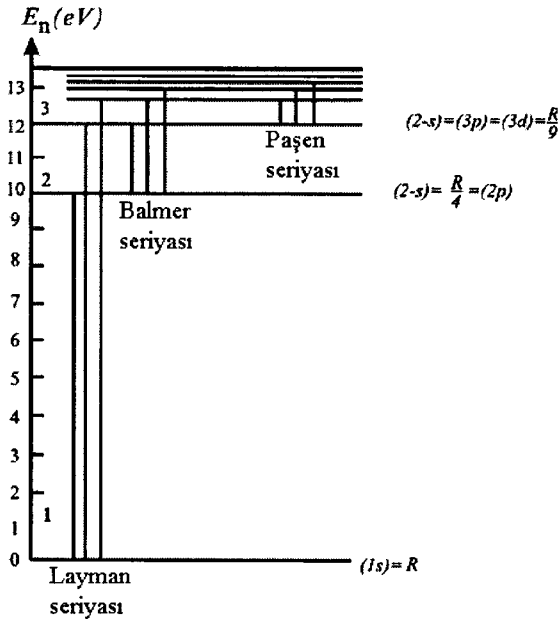
nəticəsidir. Burada $n=2, l=0, 1$ olduğundan (41.12) seçmə qaydalarına görə burada

$$\begin{aligned}\omega_1 &= (2s - np) \\ \omega_2 &= (2p - ns) \\ \omega_3 &= (2p - nd)\end{aligned}\quad (41.18)$$

kimi üç növ keçid mövcuddur. Lakin hidrogenəbənzər atomlarda $n=2, l=0$ və $l=1$ səviyyələri bir-birinin üzərinə düşdüyündən (cırılaşma), üç keçid nəticəsi olan şüalanma xətləri bir-birinin üzərinə düşür və n -in fiksə edilmiş qiymətində spektrdə

$$\omega_B = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n=3, 4, 5, \dots \quad (41.19)$$

keçidinə uyğun bir xətt kimi görünür (şəkil 18).



Şəkil 18. Hidrogen atomunun spektr seriyaları.

Eyni şəkildə Paşen seriyası

$$\omega_p = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=4, 5, 6, \dots \quad (41.20)$$

keçidlərinə uyğun xətlər çoxluğu, Pfund seriyası

$$\omega_{pf} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), n=5, 6, 7, \dots \quad (41.21)$$

keçidlərinə uyğun xətlər çoxluğu kimi və i.a. müşahidə olunur.

Atomun diskret səviyyələri arasındakı keçidlərə uyğun atomun şüaburaxma və şüaudma proseslərindən başqa, atomun ionizasiyası və atomun sərbəst elektron zəbtətmə prosesi kimi daha iki proses baş verə bilər. Atomun ionizasiyası zamanı atomun diskret səviyyələrin birindəki elektron atomu tərk edir, yəni o spektrin $E < 0$ oblastından $E > 0$ oblastına keçir. Bu proses atom tərəfindən enerjinin udulması hesabına baş verir və atomun ionizasiyası adlanır. İonizasiya enerjisi

$$E^{ion} = K - E_n$$

fərqlə təyin olunur, burada $K = \frac{m v^2}{2}$ atomdan kənara zıxan elektronun kinetik enerjisi, E_n isə elektronun tərk etdiyi diskret səviyyənin enerjisidir. Hidrogen atomu üçün ionizasiya enerjisinin minimal qiyməti $K=0$, $n=1$ -ə uyğundur; yəni elektronun K -təbəqəsindən $E=0$ səviyyəsinə keçidin enerjisinə bərabərdir:

$$E_{\min}^{ion} = -E_1 = \frac{m e^4}{2 \hbar^2} = 13,5 eV . \quad (41.22)$$

Elektronun atom tərəfindən zəbt edilməsi prosesində isə sərbəst elektron atomun diskret səviyyələrindən birinə keçir və bu zaman uyğun enerji ayrılır (buraxılır).

Qeyd edək ki, hidrogenəbənzər atomların yuxarıda şərh edilmiş nəzəriyyəsinə (40.9) tənliyinə daxil olan gətirilmiş kütlə, (40.11)-ə əsasən, elektronun m_e kütləsi ilə əvəz edilmişdi. Bu baxımdan verilmiş nəzəriyyəyə o vaxt tam dəqiq olar ki, nüvənin kütləsi sonsuz böyük olsun. Yünlük nüvələr üçün bu nəzəriyyəni, yəqin ki, yalnız birinci yaxınlaşma kimi qəbul etmək olar. Doğrudan da, yüngül atomlar üçün yuxarıda nəzəriyyədən alınan nəticələrin təcrübi faktlarla müqayisəsi onlar arasında hiss olunacaq tərtibdə uyğunsuzluğun olduğunu göstərdi.

Hidrogenəbənzər atomlar üçün (40.13) tənliyi əvəzində (40.9) tənliyini həll etmiş, yəni nüvənin hərəkəti də nəzərə alınmış olsaydı, enerji spektri üçün eynilə (40.26) ifadəsi alınardı, lakin onun ifadəsinə sonsuz kütləyə

uyğun $R = R_\infty = \frac{me^4}{2\hbar^3}$ Ridberq sabiti əvəzinə, nüvənin sonlu kütləsinə

uyğun $R_M = \frac{m_e e^4}{2\hbar^3}$ Ridberq sabiti daxil olar. (40.11)-ə əsasən

$$R_M = \frac{e^4}{2\hbar^3} \cdot \frac{mM}{m+M} = \frac{me^4}{2\hbar^3} \cdot \frac{1}{1+\frac{m}{M}} = \frac{me^4}{2\hbar^3} \left(1+\frac{m}{M}\right)^{-1} \approx R_\infty \left(1-\frac{m}{M}\right) \quad (41.23)$$

olar, burada M – nüvənin, m – isə elektronun kütləsidir.

Bu halda şüalanma tezliyi

$$\omega_{n'n} = R_M Z^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_\infty Z^2 \left(1 - \frac{m}{M} \right) \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (41.24)$$

kimi təyin olunur.

(41.24) düsturu hidrogenin izotopları olan deyterinin ${}^2_1H(D)$ və tritiyin ${}^3_1H(T)$ kəşfində mühüm rol oynamışdır. Hidrogen üçün R_M sabiti

$$R_H = R_\infty \left(1 - \frac{1}{1836} \right), \quad (41.25)$$

deyteriy üçün

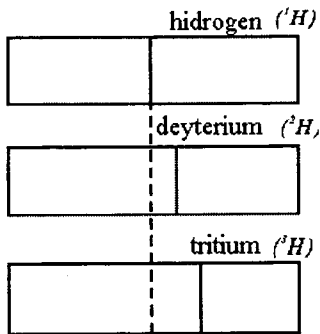
$$R_D = R_\infty \left(1 - \frac{1}{3680} \right) \quad (41.26)$$

və tritiy üçün isə

$$R_T = R_\infty \left(1 - \frac{1}{5520} \right). \quad (41.27)$$

$R_T > R_D > R_H$ olduğundan bu atomlara uyğun spektrlərdə hər hansı bir seriyanın spektr xətləri şüalanma tezliyinin böyüməsi istiqamətində $\omega_H < \omega_D < \omega_T$

ardıcılığı ilə biri digərinə nəzərən sürüşmüş olacaqdır. Məhz bu da spektroskopik tədqiqatlarda müşahidə olunmuşdur (şəkil 19).



Şəkil 19. Hidrogen atomu izotoplarının spektral xətlərinin nisbi vəziyyəti.

(41.24) düsturundan çıxan ikinci mühüm nəticə ilk dəfə Günəşdə helium elementinin kəşfindən ibarət olmuşdur. Doğrudan da, Günəşin atmosferində ionlaşmış ${}^4_2\text{He}^+$ helium qazı mövcudursa, onun spektrində spektral xətlərin düzülüşü (41.24) düsturu ilə verilməlidir. Bu halda $Z=2$ olur.

Günəş spektrini tədqiq etdikdə xətləri

$$\omega_{2n_1} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (41.28)$$

qanunu ilə düzülmiş seriya müşahidə olunmuşdur. Lakin burada n_i həmişə tam yox,

$$n_1 = 5/2; 3; 7/2; 4; 9/2, \dots \quad (41.29)$$

kimi qiymətlər alırdı. Bu seriya *Pikering seriyası* adlanmışdı. Bu seriya mahiyyətə $n_1=3, 4, 5, \dots$ uyğun spektr xətləri arasında $n_1=5/2, 7/2, 9/2, \dots$ uyğun spektr xətləri yerləşmiş hidrogenin Balmer seriyasını xatırladırdı, lakin seriyanın n_1 -in tam yarım qiymətlərinə uyğun xətləri onu tam Balmer seriyası adlandıрмаğa imkan vermirdi.

Uzun mübahisələrdən sonra alimlər bu seriyanın, nüvəsinin kütləsi $M=7360 m$ (m – elektronun kütləsi) və tezlikləri

$$\omega_{\text{He}} = R_{\text{He}} 2^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (41.30)$$

ifadəsi ilə verilən ionlaşmış heliumun ($Z=2$) seriyası olduğu qərarına gəldilər. (41.30)-da $n_1=4$ götürüb, hər bir həddi 2^2 -na bölsək,

$$\omega_{\text{He}} = R_{\text{He}} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{(n/2)^2} \right) \quad (41.31)$$

ifadəsi alınır, burada $n=5, 6, 7, 8, \dots$ qiymətlərini aldığıni fərz etmiş olsaq, seriyanın xətləri üçün (41.28) ilə verilmiş düzülüş qanunu alınmış olur.

(41.23) uyğun olaraq

$$R_{\text{He}} = R_{\infty} \left(1 - \frac{m}{M_{\text{He}}} \right) = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{7360} \right) \quad (41.32)$$

olur. Lakin bu seriyanın, doğrudan da, ionlaşmış heliuma aid olduğunu təsdiq etmək üçün hidrogenə və heliuma uyğun R_{H} və R_{He} Ridberq sabitlərinin təcrübi yolla ölçülməsi tələb olunurdu. Belə ölçülər Pikering seriyasının doğrudan da ionlaşmış helium qazına aid olduğunu təsdiq etmiş oldu.

§42. Atomun maqnit momenti

Elektronun atomdakı hərəkətinə qapalı cərəyan kimi baxmaq olar. Elektrodinamikadan məlumdur ki, hər bir qapalı cərəyan

$$\vec{M} = \frac{I\vec{S}}{c} \quad (42.1)$$

kimi təyin olunan maqnit momentinə ekvivalentdir. Burada I – cərəyan şiddəti, $\vec{S} = \vec{n}S$, S – qapalı cərəyanın qapadığı səth, \vec{n} – həmin səthin xarici normalı istiqamətində yönəlmiş vahid vektordur.

Bundan əvvəlki paragrafda gördük ki, elektron atomda E enerjisinin, L^2 hərəkət miqdarı momenti kvadratının və hərəkət miqdarı momentinin z oxu boyunca L_z proyeksiyasının müəyyən qiymətləri ilə təyin olunan stasionar hallarda ola bilər və bu hallar

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \quad (42.2)$$

dalğa funksiyası ilə təsvir olunur.

Baxılan Ψ_{nlm} stasionar halda elektrik cərəyanı şiddətinin sıxlığı (17.12)-yə görə

$$\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2\mu} (\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi) \quad (42.3)$$

burada μ , e – elektronun kütləsi və yükü, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h – Plank sabitidir.

Sferik koordinat sisteminde $\vec{\nabla}$ -nin proyeksiyaları $\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}$; $\nabla_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$,

$\nabla_\varphi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ olduğundan \vec{j} cərəyan şiddəti sıxlığının uyğun komponentləri

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{ie\hbar}{2\mu} \left(\Psi_{nlm} \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{nlm}^+ - \Psi_{nlm}^+ \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{nlm} \right), \\ j_\theta &= \frac{ie\hbar}{2\mu} \left(\Psi_{nlm} \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi_{nlm}^+}{\partial \theta} - \Psi_{nlm}^+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \Psi_{nlm} \right), \\ j_\varphi &= \frac{ie\hbar}{2\mu} \left(\Psi_{nlm} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Psi_{nlm}^+}{\partial \varphi} - \Psi_{nlm}^+ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Psi_{nlm}}{\partial \varphi} \right). \end{aligned} \quad (42.4)$$

Ψ_{nlm} -in (42.2) ifadəsində $R_n(r)$ – radial funksiya və $P_l^m(\cos \theta)$ – Lejandr polinomu həqiqi funksiyalardır. Onlar üçün $\frac{\partial R_{nl}}{\partial r} = \frac{\partial R_{nl}^+}{\partial r}$, $\frac{\partial P_l^m}{\partial \theta} = \frac{\partial P_l^{+m}}{\partial \theta}$ bərabərlikləri ödənildiyindən $j_r = j_\theta = 0$ olur. φ -dən asılı $\Phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$ funksiyası isə kompleks funksiya. Onun üçün $\frac{\partial \Phi_m^+}{\partial \varphi} = -\frac{\partial \Phi_m}{\partial \varphi} = -ime^{im\varphi}$ olduğundan, (42.4)-dən

$$j_\varphi = -\frac{e\hbar}{\mu r \sin \theta} m |\Psi_{nlm}|^2 \quad (42.5)$$

olur.

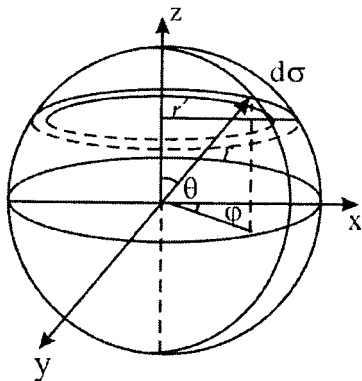
Adi fiziki mülahizələrdən alınır ki, j_r və j_θ proyeksiyaları sıfır bərabər olmalıdır. Doğrudan da, atomu elektrik yükü ilə yüklənmiş bir küre təsəvvür edək. Onun üçün j_r proyeksiyası sıfırdan fərqli olsaydı, elektrik yükü ya kürənin mərkəzinə toplanar, ya da ondan kənara axardı.

Eyni şəkildə j_θ -nın sıfırdan fərqli olması, yükün kürənin qütblərinə yığılmasına gətirərdi. Atom üçün təbiətdə bunların heç biri müşahidə olunmur. Deməli, atomda elektrik yükü en dairələr boyunca axır (şəkil 20).

(42.5) ifadəsi bizə atomun maqnit momentini hesablamağa imkan verir. Fərz edək ki, cərəyan en kəsiyi $d\sigma$ olan borudan axır. Onun cərəyan şiddəti

$$dJ = j_\varphi d\sigma.$$

olur.



Şəkil 20

Belə sonsuz kiçik şiddətli qapalı cərəyana uyğun maqnit momenti (42.1)-ə görə

$$dM_{\varphi} = \frac{dJS}{c} = \frac{j_{\varphi} S d\sigma}{c} \quad (42.6)$$

olar. Burada $S=dJ$ cərəyanının qapadığı səthin sahəsi, $r' = r \sin \theta$ onun radiusu, $S = \pi r'^2 = \pi r^2 \sin^2 \theta$ – onun ədədi qiymətidir. Səthin xarici normalı z oxu istiqamətində yönəldiyindən, (42.5)-dən

$$dM_{\varphi} = dM_z = -\frac{\pi r^2 \sin^2 \theta e\hbar}{\mu c r \sin \theta} |\Psi_{nlm}|^2 m. \quad (42.7)$$

olur. $2\pi r' d\sigma = 2\pi r \sin \theta d\sigma = dV$ – borunun həcmidir. Buradan atomun tam maqnit momentini tapmaq üçün (42.7)-dən onun həcmi boyu inteqral almaq lazımdır:

$$M_z = \frac{e\hbar}{2\mu c} m \int |\Psi_{nlm}|^2 dV. \quad (42.8)$$

Ψ_{nlm} – funksiyaları normalanmış funksiyalar olduğundan, (42.8)-dəki inteqral vahidə bərabər olar. Beləliklə, atomun maqnit momentinin oz oxu boyunca proyeksiyası

$$M_z = \frac{e}{2\mu c} m\hbar = m M_B \quad (42.9)$$

olar. Burada $M_B = -\frac{e\hbar}{2\mu c}$ – Bor maqnetonudur.

(42.9)-dan görünür ki, atomun maqnit momenti Bor maqnetonunun tam misillərinə ($m=0, \pm 1, \dots, \pm l$) bərabər olub, kvant təbiətlidir. Digər tərəfdən elektronun orbital hərəkətinə uyğun atomun hərəkət miqdarı momentinin L_z proyeksiyası $L_z = m\hbar$ (bax (40.43)) bərabərdir. (42.9)-da $L_z = m\hbar$ götürsək,

$$M_z = -\frac{e}{2\mu c} L_z \quad (42.10)$$

və ya

$$\frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2\mu c} \quad (42.11)$$

münasibətlərini alırıq.

z oxunun istiqaməti ixtiyari seçildiyindən (41.10) münasibəti yalnız M_z və L_z üçün yox, vektorların özləri üçün də doğru olar:

$$\vec{M} = -\frac{e}{2\mu c} \vec{L}. \quad (42.12)$$

Atomun (42.10) və (42.12) münasibətləri ilə rəbitədə olan maqnit və hərəkət miqdarı momentləri onun orbital maqnit momenti və orbital hərəkət miqdarı momenti adlanır. Elektronun spin momentinə malik olması faktı nəzərə alındıqda, spin momenti ilə rəbitədə olan spin maqnit momenti meydana çıxır. Atomun bu əlavə momentlərinin

$$\frac{M_{sz}}{L_{sz}} = -\frac{e}{\mu c}, \quad \vec{M}_s = -\frac{e}{\mu c} \vec{s} \quad (42.13)$$

nisbəti iki dəfə (42.12)-dən böyükdür (bax (61.6)). \vec{s} spin momentidir.

§43. Sferik simmetrik potensial çuxurda zərrəciyin hərəkəti (Üçölçülü izotrop harmonik ossilyator)

Xətti harmonik ossilyatorun potensial enerji qrafikini (bax: şəkil 13) fəzada $U(x)$ -oxu ətrafında 360° fırlatdıqda alınan fiqur üçölçülü sferik simmetrik potensial çuxur olar. Belə çuxurda hərəkət edən zərrəciyin potensial enerjisi bucaqlardan asılı olmayıb, yalnız radius vektorun mütləq qiymətinin kvadratından asılıdır

$$U(r) = \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}. \quad (43.1)$$

Belə potensial enerjili sistem izotrop harmonik ossilyator adlanır, burada μ -onun kütləsi, ω -dövri tezliyidir. Belə hərəkətin tədqiqi atom nüvələrinin bəzi xassələrinin öyrənilməsində xüsusi əhəmiyyət kəsb edir.

Baxılan sistemin halları stasionar hallar olduğundan, potensial enerjinin minimumunu enerjinin başlanğıcı kimi qəbul etsək, stasionar hallar müsbət enerjiyə uyğun olar və bu hallar

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}\Psi(x, y, z) = E\Psi \quad (43.2)$$

tənliyi ilə təsvir olunur. Burada

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2$$

olduğundan (bax (39.8)), (43.2) tənliyinin həlli sferik koordinat sistemində

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (43.3)$$

şəklində axtarıla bilər.

(14.5) əsasən (14.28') ilə verilmiş $Y(\theta, \varphi)$ sferik funksiya üçün

$$\nabla_{\theta\varphi}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = -l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (43.4)$$

tənliyi ödənilir. Onda $R(r)$ radial funksiya

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - E \right) R(r) = 0 \quad (43.5)$$

tənliyini ödəyər.

Burada $R = \frac{\nu(r)}{r}$ götürüb

$$\xi = \frac{r}{a}, \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

əvəzlərini qəbul etməklə adsız dəyişənlərə keçsək, $\nu(r)$ funksiyası üçün

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} + 2\varepsilon \right) \nu(\xi) = 0 \quad (43.6)$$

tənliyi alınar.

§35 və §39 əsasən bu tənliyin $-\infty \leq \xi \leq \infty$ intervalında sonlu qalan həlli

$$\nu(\xi) = e^{-\xi^2/2} \xi^{2s} f(\xi) \quad (43.7)$$

şəklində axtarıla bilər (asimptotik həllərin axtarılması əməliyyatı). Bu zaman $f(\xi)$ üçün

$$\begin{aligned} & f''(\xi) + \left(-2\xi + \frac{4s}{\xi}\right) f'(\xi) + \\ & + \left[-1 - 4s + \frac{2s(2s-1) - l(l+1)}{\xi^2} + 2\varepsilon \right] f(\xi) = 0. \end{aligned} \quad (43.8)$$

Dalğa funksiyasının $\xi \rightarrow 0$ -də sonlu qalması tələbindən

$$2s(2s-1) - l(l+1) = 0, \quad (43.9)$$

s parametri üçün

$$2s = l+1 \text{ və ya } s = \frac{1}{2}(l+1) \quad (43.10)$$

qiyməti alınır. s -in bu qiymətini (43.8)-də yazsaq,

$$f''(\xi) + 2\left(-\xi + \frac{l+1}{\xi}\right) f'(\xi) + [-1 - 2(l+1) + 2\varepsilon] f(\xi) = 0 \quad (43.8')$$

alınar. Burada $z = \xi^2$ kimi yeni dəyişənə keçib,

$$\frac{1}{2\xi} f'(\xi) = f'(z), \quad f''(\xi) = 2f'(z) + 4zf''(z)$$

bərabərliklərini nəzərə alsaq, $f(z)$ üçün

$$zf''(z) + (l + 3/2 - z)f'(z) - \frac{1}{2}(l + 3/2 - \varepsilon)f(z) = 0 \quad (43.11)$$

tənliyi alınır.

Qeyd edək ki, (43.11) tənliyi

$$zf''(z) + (\gamma - z)f' - \alpha f(z) = 0 \quad (43.12)$$

tənliyinin xüsusi halıdır, burada z -dəyişəni və eləcə də α , γ parametrləri ümumiyyətlə, kompleks də ola bilər. Doğrudan da,

$$\alpha = \frac{1}{2}(l + 3/2 - \varepsilon), \quad \gamma = l + 3/2 \quad (43.13)$$

olarsa, (43.11) tənliyi (43.12)-nin üzərinə düşür. (43.12) tənliyinin həlli isə riyazi-fizikada məlumdur*. O,

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha z}{\gamma \cdot 1!} + \frac{\alpha(\alpha + 1)}{\gamma(\gamma + 1)} \frac{z^2}{2!} + \dots \quad (43.14)$$

sırası şəklində təyin olunan $F(\alpha, \gamma, z)$ cırılmış hiperhəndəsi funksiyadır. (43.14)-dən görünür ki, $z=0$ nöqtəsində funksiya sonlu qalır və o, $F(\alpha, \beta, 0)=1$ olur. Funksiyanın $z \rightarrow \infty$ -da sonlu qalması üçün α -parametri mənfi tam ədədə bərabər olmalıdır, yəni $\alpha = -n$, n isə 0, 1, 2, 3, ... kimi qiymətlər alır.

α -nın bu qiymətini (43.13)-yə yerinə yazsaq, sistemin enerji spektri üçün

$$\varepsilon = 2n + l + \frac{3}{2} = \frac{E}{\hbar\omega}$$

və buradan

$$E_{nl} = \hbar\omega(2n + l + 3/2) \quad (43.15)$$

alınır. (43.12) -nin həlli olan $f(z)$ funksiyası üçün isə

*Bax [1], səh. 225

$$f(z) = F\left(-\frac{1}{2}(l+3/2-\varepsilon), l+3/2, z\right) \quad (43.16)$$

ifadəsi alınır. Buradan

$$v_{nl}(z) = e^{-\frac{z}{2}} z^l F(-n, l+3/2, z) \quad (43.17)$$

və ya

$$v_{nl}(\xi) = e^{-\xi^2/2} \xi^{l+1} F(-n, l+3/2, \xi^2) \quad (43.17')$$

və $R = \frac{v(r)}{r}$ radial funksiya üçün

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} e^{-\xi^2/2} \xi^l F(-n, l+3/2, \xi^2) \quad (43.18)$$

alınır, burada N_{nl} normalayıcı vuruqdur.

Üçölçülü izotrop harmonik ossilyatorun ümumi dalğa funksiyası

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (43.19)$$

olur.

(43.15)-dən görünür ki, izotrop ossilyatorun stasionar enerji səviyyələri iki n və l kvant ədədlərindən asılıdır. Lakin onun enerjisini xətti ossilyatorun enerjisinə oxşar şəkildə (bax §35) yazmaq üçün

$$\Lambda = 2n + l \quad (43.20)$$

kimi yeni Λ kvant ədədi daxil edək. O, baş kvant ədədi adlanır. l -in verilmiş qiymətində

$$\Lambda = l, l+2, l+4, \dots \quad (43.21)$$

qiymətlərini alır. (43.20)-dən (43.15) ifadəsi

$$E_{\Lambda} = \hbar\omega(\Lambda + 3/2) \quad (43.22)$$

olur. Üçölçülü izotrop harmonik ossilyatorun stasionar səviyyələrini işarə

etmək üçün (A, l) kvant ədədləri əvəzinə

$$\left[\frac{1}{2}(A-l) + 1, l \right] \text{ və ya } (n+1, l) \quad (43.23)$$

kvant ədədləri kombinasiyası götürülür. Mərkəzi sahədəki hərəkətdə olduğu kimi l -in müxtəlif qiymətlərinə uyğun səviyyələr

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$s, p, d, f, \dots$$

kimi işarə edilir. Lakin bu hərflərin qabağında n -in yox, $n+1$ -in qiyməti yazılır, yəni stasionar səviyyə $(n+1)X(X=s, p, d, f, \dots)$ kimi işarə olunur.

A -nın verilmiş qiymətində orbital kvant ədədi l , A -nın cüt qiymətlərində, (43.20)-ə əsasən, $l=0, 2, 4, \dots, A-2$; A -nın tək qiymətlərində isə $l=1, 3, 5, \dots, A-2$ qiymətlərini alır. l -in hər bir qiymətinə n -in yalnız bir qiyməti, m -maqnit kvant ədədinin isə $(2l+1)$ sayda müxtəlif qiymətləri uyğun gəlir. (43.23)-ə əsasən $A=0$ ($l=0, n=0, n+1=1$) qiymətinə uyğun $1s$ və $A=1$ ($l=1, n=0, n+1=1$) qiymətinə uyğun $1p$ səviyyələri l -ə görə cırlaşmış olmur. $A \geq 2$ -yə uyğun səviyyələr isə l -ə görə cırlaşmış olur.

Doğrudan da, $A=2$ olanda $n=1, l=0$ və $n=0, l=2$ olduğundan $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$ səviyyəsi, (43.23)-ə əsasən $2s$ və $1d$ kimi iki qat cırlaşmış olur. Eyni şəkildə $A=3$ -də $E_3 = \frac{11}{2}\hbar\omega$ səviyyəsi $2p$ və $1f$ səviyyələrindən ibarət olur.

l -in verilmiş qiymətinə uyğun səviyyə isə m -ə görə $(2l+1)$ tərtibdə cırlaşmış olur. Məsələn, $2s$ və $1d$ -dən ibarət olan E_2 səviyyəsinin cırlaşma dərəcəsi 6-ya bərabərdir. Onlardan biri ($2s$) üçün $l=0, m=0$, qalan beş səviyyə üçün isə $l=2, m=-2, -1, 0, 1, 2$ olur. Beləliklə, A -nın verilmiş qiymətinə uyğun səviyyənin ümumi cırlaşma dərəcəsi

$$N_A = \frac{1}{2}(A+1)(A+2) \text{-yə bərabərdir.}$$

Qeyd edək ki, səviyyənin m -ə görə cırlaşması potensial sahənin sferik simmetriyası ilə bağlı olduğu halda, səviyyənin «təsadüfi cırlaşması» adlanan l -ə görə cırlaşma isə məsələnin simmetriyası ilə yox, potensial enerjinin məsafədən kvadratik asılılığı ilə əlaqədardır.

Aşağıdakı cədvəldə aşağı stasionar halların kvant ədədləri, radial funksiyaları və enerji səviyyələrinin N_A cırlaşma dərəcəsi göstərilmişdir.

A	n	l	Halın işarəsi	$R_n(\xi)$	N_A
0	0	0	1s	$\frac{2}{\pi^{1/4} a^{3/2}} e^{-\xi^2/2}$	1
1	0	1	1p	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4} a^{3/2}} \xi e^{-\xi^2/2}$	3
2	1	0	2s	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4} a^{3/2}} \left(\xi^2 - \frac{3}{2} \right) e^{-\xi^2/2}$	6
	0	2	1d	$\frac{\sqrt{16/15}}{\pi^{1/4} a^{3/2}} \xi^2 e^{-\xi^2/2}$	

§44. Periodik sahədə hərəkət

Bərk cismin əsas xüsusiyyətlərindən biri onun kristal quruluşu – qəfəs quruluşuna malik olmasıdır. Bərk cismin kristal qəfəsinin təpə nöqtələrində yerləşmiş atomları qəfəsdə müəyyən nizamla düzülüb olur və bu nizam bütün cisim boyu təkrar olunur. Beləliklə, qəfəsin quruluşu məlum olarsa, bərk cismin quruluşu da məlum olmuş olur. Qəfəsdə atomlararası məsafə sabit qalarsa və onun quruluşu cisim boyu deformasiya olunmadan təkrar olunarsa, belə bərk cisim *ideal kristal* adlanır.

Bərk cismə yüngül zərrəciklər sistemi (elektronlar) ilə ağır zərrəciklər sistemindən (nüvələrdən) ibarət iki müxtəlif sistemin vəhdəti kimi baxsaq, onun elektronlar sistemi nüvələrin yaratdığı sahədə hərəkət edir. Ideal kristalda belə sahə tam periodik sahə olar.

Bərk cismin optik, elektrik, maqnit və bəzi başqa xassələri əsasən onun elektron sisteminin verilmiş halı ilə təyin olunur. Kvant mexanikası baxımından bu məsələni tədqiq etmək istəsək, biz, əslində çoxelektronlu sistem ilə təsadüf etmiş oluruq. Lakin çoxzərrəcikli sistem üçün yazılmış Şredinger tənliyini həll etmək çox mürəkkəb məsələdir. Belə mürəkkəb məsələnin təhlili üçün tətbiq olunan təxmini metodlardan ən əhəmiyyətlisi *birelektronlu yaxınlaşma metodudur*. Bu metodda elektronların əslində mürəkkəb hərəkəti bir elektronun nüvənin və digər elektronların yaratdığı bircə sahədəki hərəkəti ilə əvəz olunur.

Belə ümumi sahənin potensialını (o, *efektiv potensial* adlanır) tapmaq məsələsinin özü də çox mürəkkəb məsələdir. Lakin kristal bərk cisimdə effektiv potensialın periodunun kristalın fəza qəfəsinin perioduna bərabər olması faktı məsələnin həllini xeyli asanlaşdırır.

Əlbəttə, yuxarıdakı yaxınlaşmanın nə dərəcədə doğru olması, ondan

çıxan nəticələrin təcrübədə təsdiq edilib-edilməməsi ilə təyin olunur. Qeyd edək ki, bu yaxınlaşma bərk cismin bir çox xassələrinin xarakterini keyfiyyətcə və bəzən də kəmiyyətcə aydınlaşdırmağa imkan verir.

Effektiv potensialın periodikliyi üç ölçülü hərəkəti bir-birindən asılı olmayan üç birölçülü hərəkətə gətirməyə imkan verdiyindən, burada birölçülü hərəkətin tədqiqi ilə kifayətlənəcəyik, belə ki, alınan nəticələri üçölçülü hərəkət üçün ümumiləşdirmək heç bir çətinlik törətmir.

Fərz edək ki, elektron periodu birölçülü kristal qəfəsin a perioduna bərabər

$$V(x) = V(x+a) \quad (44.1)$$

effektiv potensialın sahəsində soldan sağa hərəkət edir. Bu hərəkətdə elektron atomların elektronları tərəfindən dəf, atomların mərkəzinə yaxın məsafələrdə isə nüvələr tərəfindən cəzb olunur. Birinci halda potensial enerji müsbət, ikinci halda mənfidir və $x=na$ ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$) nöqtələrində 0, birinci tərtib polyusa malik olur. Potensial enerjinin məsafəyə görə belə dəyişməsi, yəqin ki, kifayət qədər böyük enerjili elektronlar üçün doğru olar. Kiçik enerjili elektronlar isə atomların elektron örtüyünün təsiri nəticəsində nüvələrə kifayət qədər kiçik məsafəyə yaxınlaşa bilmir.

Kristalın daxilindəki elektrik sahəsinin potensialı zamandan asılı olmadığından sistemin halları stasionar olar və baxılan hərəkət stasionar halların

$$\tilde{H}\Psi = E\Psi \quad \text{və ya} \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (44.2)$$

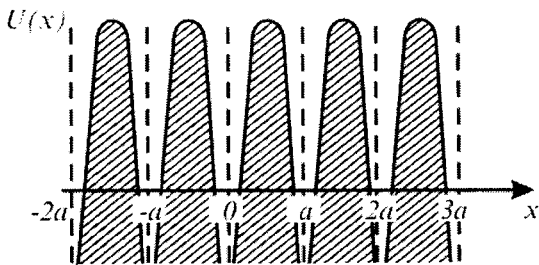
Şredinger tənliyi ilə təsvir olunur. μ – elektronun kütləsidir.

(44.2) tənliyini həll etmək üçün impuls təsvirinə keçək, (11.8) əsasən

$$\Psi(x) = \int C(p)\Psi_p(x)dp = \int C(k) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} dk, \quad (44.3)$$

burada $k = \frac{p}{\hbar}$ – dalğa vektorudur.

$V(x)$ effektiv potensialın (44.1) periodiklik şərti onu Furye sırasına ayırmağa imkan verir:



Şəkil 21. Kristalda elektronun potensial enerji ayrısı.

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{i \frac{2\pi n}{a} x}, \quad (44.4)$$

$$V_n = V_{-n}^* (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

(44.3) ilə (44.4)-ü (44.2)-də yazsaq,

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \int k^2 C(k) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} dk + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int C(k) \frac{e^{i(k + \frac{2\pi n}{a})x}}{\sqrt{2\pi}} dk = E \int C(k) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} dk$$

alınar. Bu tənliyi soldan $\frac{e^{-ik'x}}{\sqrt{2\pi}}$ -yə vurub, bütün birölçülü fəza üzrə $(-\infty, \infty)$ intervalında inteqrallayandan sonra

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} dx,$$

δ -funksiyanın

$$\int f(k) \delta(k' - k) dk = f(k')$$

xəssəsindən istifadə etdikdə

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 - E \right) C(k) + \sum_n V_n C(k + \frac{2\pi n}{a}) = 0 \quad (44.5)$$

tənliyini alırıq. (44.5) tənliyi impuls fəzasında yazılmış (44.2) tənliyidir. Bu

tənlikdə n üzrə cəm aparıldıqda, ona impuls fəzasında verilmiş və arqumentləri bir-birindən $\frac{2\pi}{a}$ kəmiyyəti ilə fərqlənən $C(k)$ -hal funksiyaları daxil olar. Asanlıqla göstərmək olar ki, bu funksiyalar biri digəri ilə təyin olunur. Bunu göstərmək üçün (44.5)-də k -nı $k + \frac{2\pi}{a}m$ ilə əvəz edib, m -ə $m = 0, \pm 1, \pm 2, +\dots$ qiymətləri versək, $C(k)$ funksiyaları üçün

$$m=0, \left(\frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 - E \right) C(k) + \sum_n V_n C(k + \frac{2\pi}{a}n) = 0$$

$$m=1, \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(k + \frac{2\pi}{a} \right)^2 - E \right] C\left(k + \frac{2\pi}{a} \right) + \sum_n V_n C\left(k + \frac{2\pi}{a} + \frac{2\pi m}{a} \right) = 0 \quad (44.6)$$

$$m=-1, \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(k - \frac{2\pi}{a} \right)^2 - E \right] C\left(k - \frac{2\pi}{a} \right) + \sum_n V_n C\left(k - \frac{2\pi}{a} + \frac{2\pi m}{a} \right) = 0$$

.....

sonsuz sayda tənlik daxil olan xətti bircins cəbri tənliklər sistemi alınır.

(44.6) sisteminin sıfırdan fərqli həllinin olması üçün $C(k)$ -ların əmsallarından təşkil olunmuş determinant sıfıra bərabər olmalıdır. Bu determinant E , k kəmiyyətlərindən və V_n əmsallarından asılıdır:

$$\Delta(E, k, V_n) = 0. \quad (44.7)$$

Onu açsaq, E üçün transendent (üstlü) tənlik alınar. Bu tənliyin E_j kökləri dalğa vektoru k -nın funksiyası olub, funksiyanın aşkar şəkli V_n əmsalları, yaxud $V(x)$ effektiv potensialın ifadəsi ilə təyin olunar:

$$E \rightarrow E_j(k) \quad j=1, 2, 3, \dots \quad (44.8)$$

Beləliklə, periodik sahədəki hərəkətin spektri diskret dəyişən j və kəsilmədən dəyişən k -dan asılı olur. j -nın verilmiş qiymətində k -nın kəsilmədən dəyişməsi nəticəsində enerji səviyyələri sxemində (44.7) tənliyinin $E_j(k)$ kökünə onun $E_j^{\min}(k)$ və $E_j^{\max}(k)$ qiymətləri ilə məhdudlaşan bütöv bir zolaq (zona) uyğun gəlir. Məsələn, $j=1$ və $j=2$ qiymətlərinə uyğun zonalar

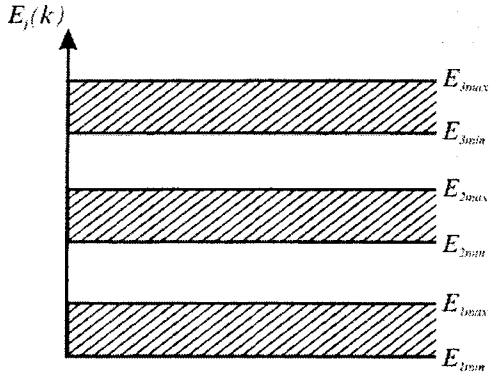
şəkil 22-də göstərilmişdir. E_1^{\max} ilə E_2^{\min} arasında $E_j(k)$ qiymət almadığından bu zolaq *qadağan olunmuş zolaq* (zona) adlanır. Beləliklə, periodik sahədə hərəkət edən zərrəciyin (xüsusi halda elektronun) enerji spektri mümkün və qadağan olunmuş zonalardan ibarət zonal spektr təşkil edir.

Asanlıqla göstərmək olar ki, hər bir zolaqda enerji k -nın periodu $\frac{2\pi}{a}$ -ya bərabər periodik funksiyadır. Doğrudan da, (44.6) sistemində k -nı $k \pm \frac{2\pi}{a}$ ilə əvəz etsək, sistem öz-özünə keçir və onun $E_j(k)$ kökləri dəyişməz qalır. Başqa sözlə, $E_j(k)$ üçün

$$E_j\left(k \pm \frac{2\pi}{a}\right) = E_j(k) \quad (44.9)$$

periodiklik şərti ödənilir.

$E_j(k)$ funksiyasının və eləcə də ona uyğun $\Psi_{jk}(x)$ dalğa funksiyasının aşkar şəklini tapmaq (44.6) sisteminə daxil olan tənliklərin sonsuz sayıda olması nəticəsində çox çətindir. Lakin onun effektiv $V(x)$ potensialının ifadəsindən asılı olmayan bəzi xassələrini aydınlaşdırmaq və $\Psi_{jk}(x)$ -dalğa funksiyasının ümumi ifadəsini tapmaq olar.



Şəkil 22. Kristalda hərəkət edən elektronun zolaqlı enerji spektri.

$E_j(k)$ köklərinin hər istənilən birini (44.6) sistemində yerinə yazıb, sistemi həll etsək, baxılan kökə uyğun həlli tapmış olarıq. Bu həllə $C_j(k)$ funksiyasından başqa, ondan $\frac{2\pi}{a}$ vuruğunun tam misilləri ilə fərqlənən

$C_j\left(k \pm \frac{2\pi}{a}\right); C_j\left(k \pm 2\frac{2\pi}{a}\right), \dots$ funksiyaları daxil olar. Müəyyən kökə

uyğun sistemin həllini bir funksiya şəklində yazmaq istəsək, onu δ -funksiya vasitəsilə etmək olar:

$$C_{jk}(k') = C_j(k') \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(k + \frac{2\pi n}{a} - k'\right). \quad (44.10)$$

Bu, enerjinin $E_j(k)$ məxsusi qiymətinə (j, k fiksə olunmuşdur) uyğun \tilde{H} operatorunun ((44.3) bərabərliyinə bax) impuls təsvirində verilmiş məxsusi funksiyasıdır. Bu funksiyanın koordinat təsvirindəki ifadəsi, (44.3)-ə əsasən,

$$\Psi_{jk}(x) = \int C_{jk}(k') \Psi_{k'}(x) dk' = \int C_{jk}(k') \frac{e^{ik'x}}{\sqrt{2\pi}} dk' \quad (44.11)$$

olar. (44.10)-u (44.11)-də yazsaq,

$$\begin{aligned} \Psi_{jk}(x) &= \int C_j(k') \sum_n \delta\left(k + \frac{2\pi n}{a} - k'\right) \frac{e^{ik'x}}{\sqrt{2\pi}} dk' = \\ &= \sum_n C_j\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right) \frac{e^{i\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right)x}}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned} \quad (44.12)$$

alınar. Bu ifadədə n -dən asılı olmayan e^{ikx} vuruğunu cəmdən kənara çıxarsaq,

$$\Psi_{jk}(x) = e^{ikx} \sum_n C_j\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right) \frac{e^{\frac{i2\pi n}{a}x}}{\sqrt{2\pi}} = u_{jk}(x) e^{ikx} \quad (44.13)$$

olar. $u_{jk}(x) = u_{jk}(x+a)$ şərtini ödəyən və periodu a -ya bərabər olan periodik funksiyadır.

Deməli, (44.13) ilə verilmiş $\Psi_{jk}(x)$ funksiyası $E_j(k)$ enerji zolağında k dalğa ədədinin müəyyən qiymətinə uyğun məxsusi funksiyadır. O, potensial enerjinin perioduna modullaşdırılmış müstəvi dalğa olub, *Blok funksiyası* adlanır. Onun üçün

$$\Psi_{j, k + \frac{2\pi}{a}}(x) = \Psi_{jk}(x) \quad (44.14)$$

periodiklik şərti ödənilir.

(44.14) şərtindən çıxır ki, k dalğa vektorunun dəyişmə intervalını

$(-\pi/a, \pi/a)$ intervalı ilə məhdudlaşdırmaq olar. Doğrudan da, k -nın dəyişmə oblastını uzunluğu $\frac{2\pi}{a}$ olan parçalara bölüb, sistemin (44.3) ümumi funksiyasını

$$\Psi(x) = \sum_{jk} C_{jk} \Psi_{jk}(x) = \sum_j \sum_n \sum_{k=-\frac{\pi}{a}(m-1)}^{k=\frac{\pi}{a}(m+1)} C_j(k) \Psi_{jk}(x)$$

kimi sıra şəklində göstərdikdən sonra k -ni $k + \frac{2\pi}{a}n$ ilə əvəz etsək, $\Psi(x)$ funksiyası

$$\Psi(x) = \sum_j \sum_{k=-\pi/a}^{k=\pi/a} b_{jk} \Psi_{jk}(x)$$

şəklində düşər, burada

$$b_{jk} = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} C_j \left(k + \frac{2\pi n}{a} \right).$$

Beləliklə, enerjinin məxsusi $E_j(k)$ qiyməti və uyğun $\Psi_{jk}(x)$ məxsusi funksiyası $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ intervalında qiymət alır. k -nın belə intervallarda aldığı qiymətlər çoxluğuna Brilluyen zonaları deyilir (enerji zonaları ilə qarışdırmamalı).

İndi də $E_j(k)$ funksiyasının bəzi xassələri ilə tanış olaq. $E_j(k)$ -nin (44.9) periodiklik şərtindən, onu Furiye sırasına ayırmaq olar:

$$E_j(k) = \sum_m E_{jm} \cos(mak). \quad (44.15)$$

Sadəlik xatirinə (44.15) sırasında birinci iki hədlə kifayətlənək:

$$E_j(k) = E_{j0} + E_{j1} \cos ak. \quad (44.16)$$

a) Fərz edək ki, k dalğa ədədi Brilluyen zonasının ortalarına yaxın ($k \rightarrow 0$ nöqtəsi ətrafında) qiymət alır. Onda $\cos(ak)$ sırasının birinci iki həddi ilə kifayətlənsək,

$$\begin{aligned}
 E_j(k) &= E_{j_0} + E_{j_1} \left(1 - \frac{a^2 k^2}{2}\right) = \\
 &= E_{j_0} + E_{j_1} - \frac{E_{j_1} a^2}{2} k^2 = \text{const} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu_1}.
 \end{aligned}
 \tag{44.17}$$

Burada

$$\mu_1 = -\frac{\hbar^2}{E_{j_1} a^2}
 \tag{44.18}$$

kəmiyyəti kütlə ölçüsünə malikdir və o, **effektiv kütlə** adlanır.

b) İndi də k dalğa ədədinin Brillüyen zonasının kənarında, məsələn, $k = \pi/a$ nöqtəsi ətrafında qiymət aldığıni fərz edək: $k = \frac{\pi}{a} - \xi$. Onda

$$E_j(k) = E_{j_0} + E_{j_1} \cos(\pi - a\xi) = E_{j_0} - E_{j_1} + \frac{E_{j_1} a^2}{2} \xi^2$$

yaxud

$$E_j(k) = \text{const} + \frac{\hbar^2 \xi^2}{2\mu_2}.
 \tag{44.19}$$

Burada zonanın kənarındakı μ_2 effektiv kütlə

$$\mu_2 = \frac{\hbar^2}{E_{j_1} a^2} = -\mu_1
 \tag{44.20}$$

qiymətcə zonanın ortasındakı μ_1 effektiv kütləsinə bərabər olub, işarəcə ondan fərqlənir.

(44.17) və (44.19)-dan çıxır ki, k -nın kiçik qiymətlərində zərrəciyin enerjisinin k -dan asılılığı sərbəst hərəkətdə olduğu kimidir. Lakin, burada zərrəciyin kütləsi əvəzində onun zonadakı effektiv kütləsi durur. Digər tərəfdən yüklü zərrəciyin elektrik və maqnit sahələrindəki hərəkətinin xarakteri $\frac{e}{m}$ nisbəti ilə təyin olunur. Deməli, periodik elektrik sahəsində

enerjisi zonanın ortalarında qiymət alan elektronun hərəkəti, enerjisi zonanın kənarında qiymət alan elektronun hərəkətinin əksinə yönəlmiş olur, yəni o, yükü müsbət olan zərrəcik (deşik) kimi hərəkət edir. Bununla da kvant mexanikasında metal və yarımcəçiricilərdə elektron və deşik keçiriciliyinin mövcud olduğu faktı izah edilir.

§45. Yüklü zərrəciyin bircins elektrik sahəsində hərəkəti

Yüklü zərrəcik intensivliyi $\vec{\mathcal{E}}$ olan bircins elektrik sahəsində hərəkət edirsə, onun potensial enerjisi $V = -\vec{d} \vec{\mathcal{E}}$ -yə bərabər olar. Burada $\vec{d} = -e\vec{r}$ zərrəciyin elektrik momentidir. $\vec{\mathcal{E}}$ -nin x boyunca yönəldiyini fərz etsək

$$V(x) = e \mathcal{E} x = Fx. \quad (45.1)$$

Zərrəciyin buradakı stasionar halları üçün Şredinger tənliyi

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + e\mathcal{E} x \Psi = E\Psi \quad (45.2)$$

olar. Bu sahədə e yükünə malik zərrəciyə təsir edən qüvvə $\vec{F} = e\vec{\mathcal{E}}$, ona uyğun $V = Fx$ potensial enerji $x \rightarrow \infty$ -da $V(x) \rightarrow \infty$, $x \rightarrow -\infty$ yaxınlaşanda isə $V(x) \rightarrow -\infty$ yaxınlaşır. Başqa sözlə, zərrəcik $(-\infty, \infty)$ oblastında sərbəst hərəkət edir, yəni elektrik sahəsi zərrəciyin hərəkət oblastını məhdudlaşdırmır, onun enerji və məxsusi funksiyalar çoxluğu kəsilməz spektr təşkil edir.

(45.2) tənliyini həll etmək üçün x -koordinat təsvirindən \vec{p} impuls təsvirinə keçək. $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ impuls operatorunun

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px}$$

məxsusi funksiyaların $\{\Psi_p(x)\}$ çoxluğu tam sistem təşkil etdiyindən, sistemin ümumi $\Psi(x)$ funksiyasını $\Psi_p(x)$ funksiyalarının superpozisiyası kimi göstərmək olar:

$$\Psi(x) = \int C(p) \Psi_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int C(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (45.3)$$

və buradan impuls təsvirindəki məxsusi funksiya

$$C(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx.$$

Bu ifadədən p -yə görə törəmə alıb

$$i\hbar \frac{\partial C(p)}{\partial p} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int x \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx,$$

alınan bu ifadədə yenidən x -təsvirinə keçsək,

$$x \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int i\hbar \frac{\partial C(p)}{\partial p} e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (45.4)$$

alınar. Sonra

$$-\hbar^2 \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int p^2 C(p) e^{\frac{i}{\hbar} px} dp \quad (45.5)$$

törəməsini hesablayıb, (45.4) və (45.5) ifadələrini (45.2)-də yazanda

$$\int \left(\frac{p^2}{2\mu} C(p) + i\hbar \mathcal{E} \frac{dC(p)}{dp} \right) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp = E \int C(p) \frac{e^{\frac{i}{\hbar} px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp$$

alınır. Axırıncı bərabərliyi sol tərəfdən $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p'x}$ funksiyasına vurub, x -in

bütün dəyişmə oblastı üzrə inteqrallandıqdan sonra alınan ifadədə ortaya çıxan

$$\delta(p' - p) = \frac{1}{2\pi} \int e^{\frac{i}{\hbar}(p' - p)x} dx$$

delta funksiyanın köməyi ilə p -yə görə inteqral alsaq,

$$\frac{p^2}{2\mu} C(p) + ie\hbar\mathcal{E} \frac{dC(p)}{dp} = EC(p) \quad (45.6)$$

tənliyi alınar. Bu birinci tərtib tənliyin həlli

$$C(p) = Ae^{\frac{p^3}{6\mu\hbar e\mathcal{E}} - i\frac{E}{\hbar e\mathcal{E}}p} \quad (45.7)$$

olur. Bunu (45.3)-də yazıb

$$p = (2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/3} z \text{ və } \xi = \left(\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(x - \frac{E}{e\mathcal{E}}\right) \quad (45.8)$$

əvəzlərini qəbul edək. Onda

$$\Psi_E(\xi) = \frac{A}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\xi z + \frac{z^3}{3})} dz = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\xi z + \frac{z^3}{3}\right) dz. \quad (45.9)$$

Axırıncı ifadədə $\cos x$ -in cüt, $\sin x$ -in isə tək funksiya olduğu nəzərə alınmışdır. (45.6) tənliyinin həlli olan (45.9) funksiyası x -in bütün $(-\infty, \infty)$ dəyişmə oblastında sonludur. Digər tərəfdən, zərrəciyin E enerjisinin istənilən qiymətində $\Psi(x)$ -in üzərinə qoyulan üç standart şərt ödənildiyindən, belə zərrəciyin enerji spektri kəsilməz olur.

$$\Psi_E(\xi) = A\Phi(\xi), \quad \Phi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\xi z + \frac{z^3}{3}\right) dz \quad (45.10)$$

funksiyası riyazi fizikada *Eyri funksiyası* adlanır.

Bildiyimiz kimi, bütöv spektrin dalğa funksiyaları $\delta(E-E')$ funksiya normalanır:

$$\int \Psi_{E'}^*(\xi) \Psi_E(\xi) dx = \delta(E - E')$$

və ya

$$A^2 \int_0^{\infty} \cos\left(\xi'z + \frac{z^3}{3}\right) \cos\left(\xi z + \frac{z^3}{3}\right) dx = \delta(E - E').$$

Axırıncı integralin sadə yolla hesablanması Landau və Lifşitsin, «Kvantovaya mexanika», kursunda verilmişdir*, A normallayıcı vuruq üçün

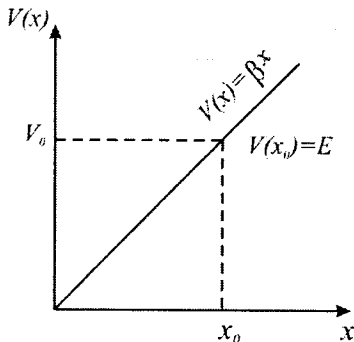
$$A = \frac{(2\mu)^{1/3}}{\pi^{1/2} (e\mathcal{E})^{1/6} \hbar^{2/3}} \quad (45.11)$$

qiyməti alınır.

Zərrəciyin xarici bircins elektrik sahəsində hərəkətinin stasionar hallarını

təsvir edən (45.9) həlli $x = x_0 = \frac{E}{e\mathcal{E}}$ nöq-

təsindən sol və sağda yerləşmiş oblastlarda (şəkil 23) özünü müxtəlif cür aparır. $x > x_0$ oblastında zərrəciyin E enerjisi təsir edən $F = e\mathcal{E}$ qüvvənin potensial enerjisindən kiçik olduğundan, klassik fizika qanunlarına görə zərrəcik həmin oblasta keçə bilmir və geri qaydır. Kvant mexa-



Şəkil 23

nikasına görə isə zərrəciyin bu oblastda olma ehtimalı sıfırdan fərqlidir. (45.9)-dan görüldüyü kimi $\Psi_E(\xi)$ nəinki $\xi > 0$ -da, hətta $\xi \gg 1$ -də sıfırdan fərqli qiymət alır və $\xi \rightarrow \infty$ yaxınlaşanda 0, eksponensial olaraq sıfıra yaxınlaşır. Doğrudan da, ξ -nin $\xi \gg 1$ kimi kifayət qədər böyük qiymətlərində $\Psi_E(\xi)$ -nin asimptotik ifadəsi

$$\Psi_E(\xi) = \frac{A}{2\xi^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \quad (45.12)$$

və $\xi \rightarrow \infty$ -da $\Psi_E(\xi) \rightarrow 0$ olur.

$x < x_0$ -da zərrəciyin E enerjisi potensial enerjiden böyük olur, ξ -nin $\xi \ll -1$ kimi kifayət qədər böyük mənfi qiymətlərində $\Psi_E(\xi)$ -nin asimptotik ifadəsi**

$$\Psi_E(\xi) = \frac{A}{|\xi|^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \quad (45.13)$$

*Bax [4], səh. 100

** Bax [4], səh. 736

və o , $(-\infty, x_0)$ oblastında sonlu qalır.

(45.2) tənliyi ikinci tərtib diferensial tənlik olduğundan onun iki xətti asılı olmayan həlli olmalıdır. $\xi \gg 1$ və $\xi \ll -1$ -də onun ikinci həllinin asimptotik ifadələri

$$\Psi_E(\xi) \approx \begin{cases} \frac{B}{\xi^{1/4}} e^{\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \\ \frac{B}{|\xi|^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \end{cases} \quad (45.14)$$

olur. Birinci həll $\xi \rightarrow \infty$ -da eksponensial olaraq sonsuzluğa yaxınlaşır, ikinci həll isə ξ -nin bütün dəyişmə oblastında sonlu qalır.

VI FƏSİL

HƏYƏCANLANMA NƏZƏRİYYƏSİ VƏ ONUN BƏZİ TƏTBİQLƏRİ

§46. Stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsi

Kvant mexanikasında yalnız bəzi sadə məsələlər (bax: IV və V fəsil) üçün Şredinger tənliyi dəqiq həll oluna bilər. Əksər məsələlərə uyğun tənliyi həll etmək üçün isə təqribi metodlardan istifadə olunur. Belə metodlardan ən çox istifadə olunanı və ən effektivliyi həyəcanlanma nəzəriyyəsi adlanır.

Kvant mexaniki sistemin \tilde{H} Hamilton operatorunun ifadəsinə qiymətə tərtibləri müxtəlif olan kəmiyyətlər daxil olur. Adətən xarici təsirin və ya sistemin müxtəlif hissələri arasındakı qarşılıqlı təsirin intensivliyini təyin edən nisbətən kiçik tərtibli kəmiyyətlər atılandan sonra alınan \tilde{H}_0 Hamilton operatoruna uyğun Şredinger tənliyi dəqiq həll olunursa, yəni ümumi məsələnin \tilde{H} Hamilton operatoru sadə məsələnin \tilde{H}_0 Hamilton operatoru ilə sadə sistemə göstərilən təsire uyğun \tilde{V} operatorunun

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{V} \quad (46.1)$$

cəmi şəklində göstərilə bilərsə, belə məsələlərin həlli üçün həyəcanlanma nəzəriyyəsi tətbiq oluna bilər. (46.1)-də \tilde{H}_0 həyəcanlanmamış sistemin

Hamilton operatoru, \tilde{V} isə həyəcanlanma və ya qarşılıqlı təsir operatoru adlanır. Yuxarıdakı şərtədən çıxır ki, bir tərəfdən \tilde{V} -nin \tilde{H}_o -a verdiyi əlavə \tilde{H}_o -a uyğun həddən xeyli kiçik olmalı, digər tərəfdən isə

$$\tilde{H}_o \Psi^o = E^o \Psi^o . \quad (46.2)$$

\tilde{H}_o operatorunun məxsusi funksiyalar çoxluğu və məxsusi qiymətlər spektri məlum olmalıdır. Onda həyəcanlanma nəzəriyyəsi vasitəsilə \tilde{H} operatorunun məxsusi funksiyalarını və məxsusi qiymətlərini təqribi hesablamaq olur. \tilde{H} operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı deyilsə, həyəcanlanma nəzəriyyəsi *Şredinger stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsi*, zamandan asılı olduqda isə *Dirak qeyri-stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsi* adlanır.

a) Stasionar hallar cırılmamış olduqda

Stasionar hallar üçün Şredinger tənliyi

$$\tilde{H} \Psi = E \Psi \quad (46.3)$$

və ya (46.1)-ə əsasən

$$(\tilde{H}_o + \tilde{V}) \Psi = E \Psi \quad (46.3')$$

şəklində yazılır (bax §18).

Ümumiliyi pozmadan \tilde{H}_o operatorunun diskret spektrə malik olduğu hal üçün həyəcanlanma nəzəriyyəsinə baxaq. \tilde{H}_o -ın kəsilməz spektrə malik olduğu halı nəzərə almaq üçün diskret spektr üzrə götürülmüş cəmlərə kəsilməz spektr üzrə götürülmüş inteqralları əlavə etmək lazımdır.

\tilde{H}_o operatorunun məxsusi qiymətlərinə uyğun hallar cırlanmamış olduqda həyəcanlanmamış sistemin E^o enerjisinin hər bir E_n^o məxsusi qiymətinə yekənə bir Ψ_n^o dalğa funksiyası uyğun gəlir. Kvant mexaniki sistemin ixtiyari funksiyasını istənilən operatorun tam məxsusi funksiyalar sistemi üzrə götürülmüş superpozisiyası şəklində göstərmək mümkün olduğundan (46.3) tənliyinin həllini \tilde{H}_o -ın $\{\Psi_n^o\}$ məxsusi funksiyalarının sırası şəklində axtaraq:

$$\Psi = \sum_m C_m \Psi_m^o. \quad (46.4)$$

Burada C_m -lər koordinat və zamandan asılı olmayan sabit əmsallardır. (46.4)-ü (46.3)-də yerinə yazanda

$$\sum_m (\tilde{H}_o + \tilde{V}) C_m \Psi_m^o = E \sum_m C_m \Psi_m^o.$$

Bu bərabərliyi soldan Ψ_k^{o*} -ya vurub, bütün fəza üzrə inteqrallayaq. Onda (46.2)-dən

$$\tilde{H}_o \Psi_m^o = E_m \Psi_m^o \quad \text{və} \quad \int \Psi_k^{o*} \Psi_m^o (d\vec{r}) = \delta_{km}$$

olduğunu nəzərə alsaq,

$$\sum_m (E_m^o - E) C_m \delta_{mk} + \sum_m V_{km} C_m = 0 \quad (46.5)$$

alınar, burada $V_{km} = \langle k | V | m \rangle = \int \Psi_k^{o*} \tilde{V} \Psi_m^o (d\vec{r})$ həyəcanlanma operatorunun matrisa elementidir.

(46.5) bircins cəbri tənliklər sistemi enerji təsvirində yazılmış dəqiq (46.3) tənliyidir. Onun sıfırdan fərqli həllərinin olması üçün C_m -lərin əmsallarından düzəldilmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır. Bu bərabərlikdən E üçün transcendent tənlik alınır. Onun kökləri \tilde{H} operatorunun $\{E_n\}$ məxsusi qiymətlər çoxluğu olur. Bu çoxluq məlum olduqda (46.5) sistemindən C_m əmsallarını tapmaq olar. Lakin (46.5) sonsuz tənliklər sistemi olduğundan E üçün alınmış tənliyin köklərini tapmaq ümumiyyətlə riyazi olaraq qeyri-mümkündür. Buna görə də (46.5) sistemini həll etmək üçün təqribi metodlardan istifadə edilir.

(46.5) sistemini həyəcanlanma nəzəriyyəsi vasitəsilə həll etmək üçün baxılan məsələdə kiçik parametr (kiçik kəmiyyət) olmalıdır. Belə parametr, adətən qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən \tilde{V} operatoruna daxil olur. Məlumdur ki, elektromaqnit qarşılıqlı təsirlərdə belə parametr incə quruluş sabiti adlanan $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$, zəif qarşılıqlı təsirlərdə belə sabit 10^{-6} , güclü qarşılıqlı təsirlərdə isə alçaq enerji oblastında $g \sim 10 \div 20$ tərtibindədir. Lakin son illərin tədqiqatları göstərir ki, yüksək enerji oblastında güclü qarşılıqlı təsiri səciyəyləndirən parametr enerjiden asılıdır. Enerji artdıqca o, kiçilir və enerjinin kifayət qədər böyük qiymətlərində sıfıra yaxınlaşır (asimptotik sərbəstlik).

Gələcəkdə istifadə olunacaq mühüm bir teoremin tərifinə gəlmək üçün (46.3') və (46.5) tənliklərini paralel həll edək. Qarşılıqlı təsir operatoru \check{V} -nin kiçik parametrlə mütənəsb olduğunu qəbul edib, (46.3') və (46.5) tənliklərində Ψ -ni, C_m -i və E -ni həmin parametrin üstlü sırası şəklində axtaraq:

$$\begin{aligned}\Psi &= \Psi^o + \Psi^{(1)} + \Psi^{(2)} + \dots \\ C_m &= C_m^o + C_m^{(1)} + C_m^{(2)} + \dots \\ E &= E^o + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots\end{aligned}\quad (46.6)$$

Ψ , C_m və E -nin yuxarıdakı ifadələrini (46.3') və (46.5)-də yazıb, (46.5) tənliyinin birinci həddindəki m üzrə cəmi δ_{mk} üzrə götürdükdə, tənliklər uyğun olaraq

$$\begin{aligned}(E^o + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots - \check{H}_o - \check{V})(\Psi^o + \Psi^{(1)} + \Psi^{(2)} + \dots) &= 0 \\ (E_k^o - E^o - E^{(1)} - E^{(2)} - \dots)(C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \dots) + \\ + \sum_m V_{km}(C_m^o + C_m^{(1)} + C_m^{(2)} + \dots) &= 0\end{aligned}\quad (46.7)$$

şəklini alır. Burada $\Psi^o, E^o, C_m^{(o)}$ kiçik parametərə görə sıfırıncı $\Psi^{(1)}, E^{(1)}, C_m^{(1)}$ – birinci, $\Psi^{(2)}, E^{(2)}, C_m^{(2)}$ – ikinci və i.a. tərtib kəmiyyətlərdir.

(46.7) bərabərliklərinə daxil olan sıralar üstlü sıralardır. Bərabərliklər o vaxt ödənilər ki, eyni tərtibli hədlərin cəmi sıfıra bərabər olsun. Onda

$$\begin{aligned}(E^o - \check{H}_o)\Psi^o &= 0 \\ (E^o - \check{H}_o)\Psi^{(1)} + (E^{(1)} - V)\Psi^o &= 0 \\ (E^o - \check{H}_o)\Psi^{(2)} + (E^{(1)} - V)\Psi^{(1)} + E^{(2)}\Psi^o &= 0\end{aligned}\quad (46.8)$$

və

$$\begin{aligned}(E_k^o - E^o)C_k^o &= 0 \\ (E_k^o - E^o)C_k^{(1)} - E^{(1)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^o &= 0 \\ (E_k^o - E^o)C_k^{(2)} - E^{(1)}C_k^{(1)} - E^{(2)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^{(1)} &= 0\end{aligned}\quad (46.9)$$

kimi cəbri tənliklər sistemi alınır.

Kvant mexaniki sistemin hər hansı ixtiyari n -ci halın $E = E_n^o$ enerjisinə və Ψ_n^o dalğa funksiyasına \tilde{V} – həyəcanlanmanın verdiyi müxtəlif tərtibli əlavələri hesablayaq.

Sıfırıncı yaxınlaşmada (46.8) və (46.9)-dan

$$\begin{aligned}(E_n^o - \tilde{H}_o)\Psi_n^o &= 0 \\ (E_k^o - E_n^o)C_k^o &= 0\end{aligned}\quad (46.10)$$

olar. Ümumiyyətlə, k cari indeksi n -ə bərabər və ya da ondan fərqli ola bilər. $k=n$ -dirsə, $E_k^o - E_n^o = 0$, $C_k^o = C_n^o \neq 0$; $k \neq n$ -dirsə, $E_k^o - E_n^o \neq 0$, $C_k^o = 0$ olar. Deməli, həyəcanlanma olmadıqda sistemin Ψ_n^o halında olduğunu qəbul etsək, (46.10)-da birinci tənliyin həlli Ψ_n^o -in analitik ifadəsinin tapılmasına, ikinci tənlikdə isə $E_k^o = E_n^o$, $C_k^o = C_n^o = 1$ gətirir. Bu iki şərtədən $C_k^o = \delta_{kn}$ olur.

Sistemin dalğa funksiyasına və enerjisinə birinci tərtib düzəlişləri tapanaq. Bu əlavələr (46.8) və (46.9) sistemlərinin ikinci tənliklərindən hesablanır:

$$\begin{aligned}(E_n^o - \tilde{H}_o)\Psi_n^{(1)} &= -(E_n^{(1)} - V)\Psi_n^o \\ (E_k^o - E_n^o)C_k^{(1)} - E_n^{(1)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^o &= 0\end{aligned}\quad (46.11)$$

İkinci tənlikdə $n=k$ götürək

$$-E_n^{(1)} + \sum_m V_{nm}\delta_{nm} = 0$$

və ya

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \Psi_n^{o*} V \Psi_n^o (d\vec{r}) \quad (46.12)$$

alınır, yəni həyəcanlanmamış stasionar halın E_n^o enerjisinə birinci tərtib düzəliş $E_n^{(1)}$, həyəcanlanma operatorunun Ψ_n^o həyəcanlanmamış halın dalğa funksiyaları ilə təyin olunan orta qiymətinə bərabərdir:

$$E_n = E_n^o + E_n^{(1)} = E_n^o + V_{nn}. \quad (46.13)$$

(46.11)-dəki birinci tənliyin köməyi ilə də eyni nəticə alınır. Bildiyimiz kimi, sistemin istənilən funksiyasını ixtiyari operatorun ortonormalanmış tam funksiyalar sisteminin sırası şəklində göstərmək olar:

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_m C_m \Psi_m^o.$$

Bunu (46.11)-in birinci tənliyində $\Psi_n^{(1)}$ -in yerinə yazsaq,

$$\sum_m C_m (E_n^o - \check{H}_o) \Psi_m^o = -(E_n^{(1)} - V) \Psi_n^o. \quad (46.14)$$

(46.14)-də

$$\check{H}_o \Psi_m^o = E_m^o \Psi_m^o \quad (46.15)$$

(46.14) tənliyini və Ψ_n^o funksiyaları üçün normalanma şərtini nəzərə alandan sonra onu soldan Ψ_n^{o*} -ə vurub, bütün fəza üzrə inteqralladıqda

$$\sum_m C_m (E_n^o - E_m^o) \delta_{nm} = \int \Psi_n^{o*} (V - E_n^{(1)}) \Psi_n^o (d\vec{r}) \quad (46.16)$$

alınır. Bu tənliyin sol tərəfində duran m üzrə cəm δ_{nm} simvolu vasitəsilə götürüldükdə o, eynilik kimi sıfıra bərabər olur və $E_n^{(1)}$ əlavəsi üçün (46.12) ifadəsi üzərinə düşən qiymət alınır.

Digər tərəfdən (46.11)-də birinci tənlik $\Psi_n^{(1)}$ funksiyasına görə qeyri-bircins tənlikdir. Onu soldan (44.15) bircins tənliyin həlli olan Ψ_n^o funksiyasına vurub inteqralladıqda

$$\int \Psi_n^o (E_n^o - \check{H}_o) \Psi_n^{(1)} (d\vec{r}) = \int \Psi_n^{o*} (V - E_n^{(1)}) \Psi_n^o (d\vec{r}) \quad (46.17)$$

alınar. (46.16) və (46.17) tənliklərinin sol tərəfləri bir-birinə bərabər və eynilik kimi sıfıra bərabər olduğundan, Ψ_n^o -in (46.11)-də birinci qeyri-

bircins tənliyin sağ tərəfi ilə skalyar hasilı də sıfıra bərabər olur:

$$(\Psi_n^o, (V - E_n^{(1)})\Psi_n^o) = \int \Psi_n^{o*} (V - E_n^{(1)})\Psi_n^o (d\vec{r}) = 0. \quad (46.18)$$

Bu, belə bir teorem şəklində ifadə olunur.

Teorem: Qeyri-bircins tənliyin sağ tərəfi uyğun bircins tənliyin həlli ilə ortaqaldır.

$n \neq k$ olduqda (46.11)-in ikinci tənliyi

$$(E_k^o - E_n^o)C_k^{(1)} + \sum_m V_{km} \delta_{mn} = 0$$

və ya

$$C_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^o - E_k^o} \quad (46.19)$$

olur.

İkinci tərtib düzəlişləri hesablamaq üçün (46.9) sisteminin üçüncü tənliyindən istifadə edək:

$$(E_k^o - E_n^o)C_k^{(2)} - E_n^{(1)}C_k^{(1)} - E_n^{(2)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^{(1)} = 0. \quad (46.20)$$

Burada $k=n$ götürdükdə (46.19)-a əsasən

$$-E_n^{(1)}C_n^{(1)} - E_n^{(2)} + \sum_m \frac{V_{nm}V_{mn}}{E_n^o - E_m^o} = 0. \quad (46.21)$$

$C_n^{(1)}$ əmsalı (46.19) ilə təyin oluna bilmir, çünki bu halda onun məxrəci sıfıra bərabər olur: $E_n^o - E_n^o = 0$. Onu təyin etmək üçün $\int \Psi^* \Psi d\vec{r} = 1$ və ya

$$\sum_k C_k^+ C_k = 1$$

normalanma şərtindən istifadə edək. Burada C_k -ları (46.6)-dan onun sırası ilə əvəz edib, $C_k^o = \delta_{kn}$ olduğunu nəzərə alaraq, birinci və ikinci tərtib hədlərlə kifayətləndikdə

$$C_n^{*(1)} + C_n^{(1)} + C_n^{*(2)} + C_n^{(2)} + \sum_{k \neq n} C_k^{*(1)} C_k^{(1)} = 0$$

alınır. Uyğun tərtibli hədlərin cəmini sıfır götürsək,

$$C_n^{*(1)} + C_n^{(1)} = 0 \quad C_n^{*(2)} + C_n^{(2)} + \sum_{k \neq n} C_k^{*(1)} C_k^{(1)} = 0$$

və buradan

$$C_n^{(1)} = 0 \quad C_n^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} C_k^{*(1)} C_k^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^o - E_k^o)^2} \quad (46.22)$$

olar. Bunları (46.21)-də nəzərə aldıqda

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk} V_{kn}}{E_n^o - E_k^o}. \quad (46.22')$$

İndi də (46.20) tənliyində $n \neq k$ götürək, onda

$$C_k^{(2)} = -\frac{V_{nn} V_{kn}}{(E_n^o - E_k^o)^2} + \sum_{m \neq k, n} \frac{V_{km} V_{mn}}{(E_n^o - E_k^o)(E_n^o - E_m^o)} \quad (46.23)$$

olar.

(46.22) bərabərliyindən görünür ki, sistemin əsas (ən kiçik enerjili) halına ikinci tərtib düzəliş həmişə mənfidir.

Beləliklə, ikinci tərtibə qədər kiçik hədləri nəzərə almaq dəqiqliyi ilə sistemin enerjisi

$$E_n = E_n^o + V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^o - E_k^o} \quad (46.24)$$

və sistemin həyəcanlanmış halının dalğa funksiyası

$$\Psi = \sum_k C_k \Psi_k^o = \sum_k (C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)}) \Psi_k^o$$

olar. Burada k indeksinin n -ə bərabər ola biləcəyini nəzərə aldıqda

$$\Psi = C_n^o \Psi_n^o + C_n^{(1)} \Psi_n^o + C_n^{(2)} \Psi_n^o + \dots + \sum_{k \neq n} (C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \dots) \Psi_k^o$$

kimi yazılır. Burada $C_k^o = \delta_{nk}$, $C_n^{(1)} = 0$ və $C_n^{(2)}$ -nin (46.22) ilə verdiyini nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} \Psi = \Psi_n^o - \frac{\Psi_n^o}{2} \sum_k \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^o - E_k^o)^2} + \sum_k \frac{V_{kn}}{E_n^o - E_k^o} \Psi_k^o - \sum_k \frac{V_{nn} V_{kn}}{(E_n^o - E_k^o)^2} \Psi_k^o + \\ + \sum_{k,m} \frac{V_{km} V_{mn}}{(E_n^o - E_k^o)(E_n^o - E_m^o)} \Psi_k^o. \end{aligned} \quad (46.25)$$

Həyəcanlanma nəzəriyyəsi metodunun tətbiqi o vaxt effektiv olar ki, ardıcıl yaxınlaşma yolu ilə alınmış (46.24) və (46.25) sıraları yığılsın, yəni sıranın hər sonrakı həddi əvvəlki həddindən kiçik qalsın. Bunun üçün, yəqin ki,

$$\left| \frac{V_{nk}}{E_n^o - E_k^o} \right| \ll 1 \text{ və ya } |V_{kn}| \ll |E_n^o - E_k^o| \quad (46.26)$$

şərti ödənməlidir. Deməli, həyəcanlanma nəzəriyyəsi, yalnız, həyəcanlanma operatorunun matrisa elementi uyğun həyəcanlanmamış səviyyələr arasındakı məsafədən kifayət qədər kiçik qaldıqda tətbiq oluna bilər.

b) Stasionar hallar cırlaşmış olduqda.

İndi də \tilde{H}_o operatorunun E_k^o məxsusi qiymətlərinə uyğun halların cırlaşmış olduğunu qəbul edək. Fərz edək ki, həyəcanlanmamış sistemin hər hansı E_k^o səviyyəsi f tərtibdə cırlaşmışdır, yəni eyni bir E_k^o məxsusi qiymətinə $\Psi_{k1}^o, \Psi_{k2}^o, \dots, \Psi_{kf}^o$ kimi qarşılıqlı ortoqonal f müxtəlif dalğa funksiyası uyğundur. Bu zaman sıfırıncı yaxınlaşmanın dalğa funksiyası E_k^o -a aid $\Psi_{k\beta}^o$ dalğa funksiyalarının superpozisiyası şəklində axtarılır:

$$\Psi_k^o = \sum_{\alpha=1}^f C_{k\alpha} \Psi_{k\alpha}^o. \quad (46.27)$$

Həyəcanlanmış halın Ψ_k dalğa funksiyasını və E_k enerjisini

$$\begin{aligned}\Psi_k &= \Psi_k^o + \Psi_k^{(1)} + \Psi_k^{(2)} + \dots \\ E_k &= E_k^o + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \dots\end{aligned}$$

sıraları şəklində axtaraq. Bu sıralarda hər bir hədd əvvəlkindən bir tərtib kiçik kəmiyyətdir. Bunları (46.3) tənliyində yerinə yazıb,

$$\begin{aligned}(\tilde{H}_o + V)(\Psi_k^o + \Psi_k^{(1)} + \Psi_k^{(2)} + \dots) = \\ = (E_k^o + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \dots)(\Psi_k^o + \Psi_k^{(1)} + \Psi_k^{(2)} + \dots)\end{aligned}$$

iki və daha yüksək tərtibli hədləri nəzərə almasaq,

$$(\tilde{H}_o - E_k^{(1)})\Psi_k^{(1)} = (E_k^{(1)} - V)\Psi_k^o$$

alırıq. Bu tənliyi $\Psi_{k\alpha}^{*o}$ -a vurub bütün fəza üzrə inteqralladıqda:

$$\int \Psi_{k\alpha}^{*o} H_o \Psi_k^{(1)}(d\vec{r}) - E_k^{(1)} \int \Psi_{k\alpha}^{*o} \Psi_k^{(1)}(d\vec{r}) = E_k^{(1)} \int \Psi_{k\alpha}^{*o} \Psi_k^o(d\vec{r}) - \int \Psi_{k\alpha}^{*o} V \Psi_k^o(d\vec{r}). \quad (46.28)$$

\tilde{H}_o operatoru ermit olduğundan

$$\int \Psi_{k\alpha}^{*o} \tilde{H}_o \Psi_k^{(1)}(dr) = \int \Psi_k^{*(1)} \tilde{H}_o \Psi_{k\alpha}^o(dr) = E_k^o \int \Psi_k^{(1)} \Psi_{k\alpha}^o(dr)$$

və (46.28) tənliyinin sol tərəfi sıfıra bərabər olur. Onda (46.28) tənliyi

$$E_k^{(1)} \int \Psi_{k\alpha}^{*o} \Psi_k^o(d\vec{r}) = \int \Psi_{k\alpha}^{*o} V \Psi_k^o(d\vec{r}) \quad (46.29)$$

şəklini alır. Bu tənliyə yalnız sıfırıncı yaxınlaşmanın dalğa funksiyaları daxildir, enerjiyə görə isə yalnız birinci tərtib kiçik hədlər daxil olur. Beləliklə, baxılan halda həyəcanlanmış sistemin (46.3) dalğa tənliyi dalğa funksiyalara görə sıfırıncı, enerjiyə görə isə birinci yaxınlaşma dəqiqliyi ilə həll olunur.

Ψ_k^o - funksiyasının (46.27) ilə verilmiş ifadəsini (46.29)-da yerinə yazıb.

$\Psi_{k\alpha}^o$ funksiyalarının qarşılıqlı ortoqonal olduğunu nəzərə alsaq

$$E_k^{(1)} C_{k\alpha} - \sum_{\beta} V_{k\alpha, k\beta} C_{k\beta} = 0 \quad (46.30)$$

bircins tənliklər sistemi alınır. Burada yalnız hər hansı ixtiyari E_k^o səviyyəsinə olan düzəlişləri axtardığımızdan, axırıncı tənlikdə k indeksini yazmamaq olar:

$$(V_{\alpha\alpha} - E_k^{(1)}) C_{\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} V_{\alpha\beta} C_{\beta} = 0 \quad (46.31)$$

burada

$$V_{\alpha\beta} = \int \Psi_{k\alpha}^o V \Psi_{k\beta}^o (d\vec{r}) .$$

α, β indeksləri $1, 2, \dots, f$ qiymətlərini alır. (46.31) sistemi C_{α} əmsallarına görə f cəyda birinci xətti tənliklər sistemidir. Onun qeyri-trivial həllinin mövcud olması üçün C_{α} -ların əmsallarından düzəldilmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır:

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E_k^{(1)} & V_{12} & \dots & \dots & V_{1f} \\ V_{21} & V_{22} - E_k^{(1)} & \dots & \dots & V_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_{f1} & V_{f2} & \dots & \dots & V_{ff} - E_k^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (46.32)$$

Bu tənlik *əsr*i və ya *sekulyar* tənlik adlanır. O, $E_k^{(1)}$ -ə görə f tərtibli üstlü tənlikdir. Onun $E_k^1 = E_{k1}^{(1)}, E_{k2}^{(1)}, \dots, E_{kf}^{(1)}$ kimi f həqiqi kökü (V qarşılıqlı təsir operatoru ermit olduğundan) vardır. Köklərin hamısı müxtəlif olduqda həyəcanlanmamış sistemin E_k^o səviyyəsi həyəcanlanma daxil olduğdan sonra f müxtəlif səviyyəyə parçalanır. Bu zaman cırlaşma tam aradan götürülür. Köklərdən bəziləri bir-birinin üzərinə düşdükdə cırlaşma qismən ortadan götürülür.

Hər bir $E_{k\alpha} = E_{k\alpha}^o + E_{k\alpha}^{(1)}$ səviyyəsinin dalğa funksiyasını tapmaq üçün

(46.31) sistemində $E_k^{(1)}$ -in əvəzinə $E_{k\alpha}^{(1)}$ qiyməti yazılır və sistem C_α -lara görə həll edilir. Bu zaman onlar üçün $C_{\alpha 1}, C_{\alpha 2}, \dots, C_{\alpha f}$ həlləri tapılır. Beləliklə, $E_{k\alpha}$ səviyyəsinin sıfırıncı yaxınlaşmada dalğa funksiyası

$$\Psi_{k\alpha}^o = \sum_{\beta} C_{k\alpha\beta} \Psi_{k\beta}^o \quad (46.33)$$

olur, yəni parçalanmada alınmış hər bir $E_{k\alpha}^o$ səviyyəsi sıfırıncı yaxınlaşma dəqiqliyi ilə tapılmış özünün $\Psi_{k\alpha}^o$ dalğa funksiyası ilə təsvir olunur.

§47. Qeyri-stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsi (kvant keçidləri nəzəriyyəsi)

Kvant mexaniki sistemin enerji spektrini hesablamaq məsələsi kvant mexanikasının əsas məsələlərindən biridir. Sistemin enerji spektri məlum olduqda, onun şüalanma spektrində müşahidə olunan qanunauyğunluqları izah etməyə, statistik metodlar vasitəsilə fiziki xassələrini öyrənməyə (termodinamik parametrləri hesablamaqla) və nəzəri nəticələri təcrübədə alınan nəticələrlə müqayisə etmək yolu ilə kvant mexanikasının əsas prinsiplərinin doğruluğunu təsdiq etməyə imkan verir. Bundan başqa kvant mexanikası sistemə təsir edən xarici həyəcanlanmaların sistemdə yaratdığı dəyişiklikləri də hesablamağa imkan verir. Belə dəyişikliklər, həyəcanlanma nəticəsində sistemin bir stasionar səviyyəsindən digərinə keçməsi, əlavə müxtəlif multipol momentlərin yaranması və i.a. ola bilər.

Stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsi (§46) fərqli olaraq, fərz edək ki, həyəcanlanma operatoru zamandan asılıdır $\tilde{V} = \tilde{V}(t)$. Bu halda sistemin Hamilton operatoru $\tilde{H} = \tilde{H}_o + V(t)$ zamandan asılı olduğundan (10.4') hərəkət tənliyinə görə sistemin enerjisi saxlanmır və onun stasionar halları mövcud olmur. Beləliklə,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\tilde{H}_o + V(t))\Psi(x, t). \quad (47.1)$$

Şredinger tənliyinin həlli, yalnız dalğa funksiyasının təqribi ifadəsinin tapılması ilə məhdudlanır. Başqa sözlə, həyəcanlanmamış sistemin stasionar hallarının dalğa funksiyalarına, yəni $\tilde{H}_o \Psi^o = E^o \Psi^o$ tənliyinin həlli olan

$\Psi_n^o(x, t)$ -lərə görə həyəcanlanmış sistemin Ψ dalğa funksiyası hesablanır. Burada (47.1) tənliyinin həlli H_0 operatorunun məxsusi funksiyalarının superpozisiyası şəklində axtarılır:

$$\Psi = \sum_k C_k(t) \Psi_k^o(x, t). \quad (47.2)$$

Stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsinə fərqli olaraq, burada fərz olunur ki, sistemin E_k halında olma ehtimalını təyin edən C_k əmsalları zamandan asılıdır. (47.1) tənliyinin bu həll metodu Dirak tərəfindən təklif olunmuşdur (1926-cı il). Bu metod diferensial tənliklərin həlli üçün istifadə olunan sabitlərin variasiyası metodunu xatırladır.

(47.2) ifadəsini (47.1)-də yazıb, stasionar halların dalğa funksiyalarının

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k^o}{\partial t} = \tilde{H}_0 \Psi_k^o$$

tənliyini ödədiyini yadıma salsaq,

$$i\hbar \sum_{k'} \frac{\partial C_{k'}(t)}{\partial t} \Psi_{k'}^o = \sum_{k'} C_{k'}(t) \tilde{V}(x, t) \Psi_{k'}^o$$

alırıq. Axırıncı bərabərliyin hər iki tərəfini soldan $\Psi_k^{o*}(x, t)$ -yə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallayaq. Onda

$$\int \Psi_{k'}^{o*} \Psi_k^o (d\vec{r}) = \delta_{kk'}$$

ortonormalanma şərtini nəzərə aldıqda, $C_k(t)$ əmsalları üçün

$$i\hbar \frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = \sum_{k'} V_{kk'}(t) C_{k'}(t) \quad (47.3)$$

tənliyi alınır. Burada

$$V_{kk'}(t) = \int \Psi_k^{o*} \tilde{V}(t) \Psi_{k'}^o (d\vec{r}) \quad (47.4)$$

$\check{V}(t)$ operatorunun matrisa elementidir. $C_k(t)$ əmsalları üçün alınmış (47.3) sonsuz tənliklər sistemi enerji təsvirində (\check{H}_o -operatoru təsvirində) yazılmış (47.1) Şredinger tənliyi olub, $C_k(t)$ əmsalları isə həmin təsvirdə verilmiş dalğa funksiyalarıdır. Onun dəqiq həlli mümkün deyildir. V -nin bir tərtib kiçik (\check{H}_o -a görə) kəmiyyət olduğunu fərz etsək, (47.3) tənliklər sistemini ardıcıl yaxınlaşma metodu (həyəcanlanma nəzəriyyəsi) vasitəsilə həll etmək olar:

$$C_k(t) = C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \dots \quad (47.5)$$

(47.5)-i (47.3) tənliyində yazıb, bərabərliyin sağ və sol tərəfində eyni tərtibli hədlərin bərabər olması şərtindən $C_k(t)$ əmsallarını təyin etmək üçün

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial C_k^o}{\partial t} &= 0, \\ i\hbar \frac{\partial C_k^{(1)}}{\partial t} &= \sum_k V_{kk'}(t) C_{k'}^o, \\ i\hbar \frac{\partial C_k^{(2)}}{\partial t} &= \sum_{k'} V_{kk'} C_{k'}^{(1)}(t) \\ &\dots \\ &\dots \end{aligned} \quad (47.6)$$

sonsuz tənliklər sistemini alırıq.

Bu sistemin birinci tənliyi göstərir ki, sıfırıncı yaxınlaşmada C_k^o əmsalı zamandan asılı olmamalıdır, yəni

$$C_k^o = \text{const.}$$

Onun qiyməti başlanğıc şərt ilə verilir və sistemin həyəcanlanma daxil edilməkdən əvvəlki halını xarakterizə edir. Fərz edək ki, $t=0$ anında sistem E_n^o halındadır, onda $C_k^o = \delta_{nk}$ kimi təyin edilir.

C_k^o -in qiymətini (47.6) sisteminin ikinci tənliyində yazaq. $\delta_{kk'}$ simvolu ilə cəmin götürülməsi qaydasına əsasən, birinci yaxınlaşmada dalğa funksiyasına birinci tərtib əlavəni təyin edən $C_k^{(1)}$ əmsalı üçün

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{kn}(t') dt' \quad (47.7)$$

ifadəsi alınır. $C_k^{(1)}$ -in bu ifadəsini (47.6) sisteminin üçüncü tənliyində yazsaq, ikinci yaxınlaşmada əlavəni təyin edən $C_k^{(2)}(t)$ əmsalını tapırıq və i.a. Biz burada yalnız birinci yaxınlaşma ilə kifayətlənəcəyik. Beləliklə, baxılan təsvirdə birinci yaxınlaşmada $C_k(t)$ dalğa funksiyası üçün

$$C_k(t) = C_k^o + C_k^{(1)}(t)$$

ifadəsi alınır. Dalğa funksiyasının fiziki mənasına görə sistemin t anında E_k halında olma ehtimalı

$$|C_k(t)|^2 = |C_k^o + C_k^{(1)}|^2$$

olar. Lakin $t=t_o=0$ anında sistemin E_n^o halında olduğunu fərz etdiyimizdən $C_k^o = \delta_{kn} = 0$. $t=0$ - dan fərqli hər hansı t anında sistemin ixtiyari E_k halında ($k \neq n$) olma ehtimalı isə

$$|C_k(t)|^2 = |C_k^{(1)}(t)|^2$$

və ya

$$C_k^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{kn}(t') dt' \right|^2 \quad (47.8)$$

olar. Deməli, xarici $V(t)$ həyəcanlanma nəticəsində sistem n halından k halına keçir, yəni $V(t)$ həyəcanlanma operatoru kvant keçidi yaradır.

Stasionar halların dalğa funksiyalarının zamandan asılılığı bizə məlum olduğundan $V_{kn}(t)$ matrisa elementi

$$V_{kn}(t) = \int \Psi_k^{o*}(x) \tilde{V}(t) \Psi_n^o(x) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k^o - E_n^o)t} (d\vec{r}) \quad (47.9)$$

şəklində yazıla bilər. Burada $\omega_{kn} = \frac{E_k^0 - E_n^0}{\hbar}$ keçid tezliyi və

$$V_{kn}^o(t) = \int \Psi_k^{o*}(x) \tilde{V}(t) \Psi_n^o(x) (d\vec{r}) \quad (47.10)$$

işarəsini qəbul etsək, (47.8) ilə təyin edilən ehtimal zamanın funksiyası olur. Buna görə də o, sistemin keçid ehtimalını birqiyəmətli təyin etmir. Kvant mexanikasında vahid zamandakı keçid ehtimalı hesablanır. Belə ehtimalı W_{kn} ilə işarə etsək (burada $k \neq n$ olduğundan)

$$W_{kn} = \frac{\partial}{\partial t} |C_k(t)|^2 \quad (47.11)$$

olur. Bu düstur bir qarşılıqlı təsir aktının nəticəsi olan (məsələn, atomun şüa buraxma və şüaudma, yüklü zərrəciyin Kulon sahəsində səpilməsi kimi) bir çox fiziki proseslərin təhlilinə imkan verir.

a) İndi də fərz edək ki, $V(x, t)$ həyəcanlanma operatoru zamanın periodik funksiyasıdır:

$$V(x, t) = V(x) e^{i\omega t}.$$

Onda (47.7) ifadəsi

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{kn}^o \int_0^t e^{i(\omega - \omega_{kn})t'} dt'$$

şəklinə düşər, burada

$$V_{kn}^o = \int \Psi_k^{o*}(x) \tilde{V}(x) \Psi_n^o(x) (dx) \quad (47.12)$$

$\tilde{V}(x)$ operatorunun matrisa elementidir.

$$\delta(\omega - \omega_{kn}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^t e^{i(\omega - \omega_{kn})t'} dt'$$

delta funksiyasını daxil etsək,

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{2\pi i}{\hbar} V_{kn}^o \delta(\omega - \omega_{kn}), \quad (47.13)$$

buradan, sistemin k halında olma ehtimalı üçün

$$\left| C_k^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \left| V_{kn}^o \right|^2 \delta^2(\omega - \omega_{kn}) \quad (47.14)$$

ifadəsi alınır. Müşahidə intervalının $(0, T)$ olduğu qəbul edilərsə, δ funksiyanın təyindən o, yalnız $\omega = \omega_{kn}$ -də sıfırdan fərqli qaldığından (47.14) ifadəsində δ funksiyasının birini

$$\delta(\omega - \omega_{kn}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^T e^{i(\omega - \omega_{kn})t} dt = \frac{1}{2\pi} \int_0^T dt = \frac{T}{2\pi}$$

ilə əvəz edə bilərik:

$$\left| C_k^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| V_{kn}^o \right|^2 T \delta(\omega - \omega_{kn}) \quad (47.14')$$

alınar. Bu halda (47.11)-dən vahid zamandakı keçid ehtimalı üçün

$$W_{kn} = \frac{\left| C_k^{(1)}(t) \right|^2}{T} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| V_{kn}^o \right|^2 \delta(\omega - \omega_{kn}) \quad (47.15)$$

ifadəsi alınır.

b) Bir xüsusi hala da baxaq. Fərz edək ki, $V(t)$ həyəcanlanma operatoru sistemə göstərilən təsir başlayandan ($t=0$) təsir qurtaran ana ($t=T$) qədər sabit qalır. Onda (47.10) - da $V_{kn}(t)$ matrisa elementi zamandan asılı olmur və keçid ehtimalının (47.15) ifadəsi

$$W_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| V_{kn}^o \right|^2 \delta(\omega_k - \omega_n) \quad (47.16)$$

şəklində düşər. Burada $\omega_{k,n} = \frac{E_{k,n}}{\hbar}$ olduğunu nəzərə alıb, δ -funksiyanın

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{\alpha} \delta(x) \text{ xassəsindən istifadə edəndə (47.16) düsturu}$$

$$W_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{kn}^o|^2 \delta(E_k - E_n) \quad (47.17)$$

şəklini alır.

(47.17)-dən görünür ki, keçid ehtimalı yalnız $E_k = E_n$ olduqda sıfırdan fərqlidir. Deməli, belə keçid o zaman mümkündür ki, sistem başlanğıc E_n kvant halından başqa həmin enerjiyə malik digər kvant halına da malik olsun. Başqa sözlə belə kvant keçidləri yalnız enerji səviyyələri cırlaşmış olan sistemlərdə mümkündür.

Mümkün son hallardan hər hansı birinə keçid ehtimalı W_{kn} -in bütün son E_k halları üzrə cəmə bərabər olar:

$$\sum_k W_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k |V_{kn}^o|^2 \delta(E_k - E_n). \quad (47.18)$$

Əgər verilmiş E_n halından kəsilməz spektrin hər hansı ixtiyari halına keçidin ehtimalını tapmaq istəsək, əvvəlcə sistemin $E_k, E_k + dE_k$ enerji intervalındakı kvant hallarının sayını tapmaq lazımdır. Bu sayı $\rho(E_k)dE_k$ ilə işarə etsək, axtarılan ehtimal

$$W = \sum_k W_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |V_{kn}^o|^2 \rho(E_k) \delta(E_k - E_n) dE_k$$

və ya

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{kn}^o|^2 \rho(E_n) \quad (47.19)$$

olur.

İndi də həyəcanlanma nəzəriyyəsinin bəzi tətbiqlərinə keçək.

§48. Anharmonik ossilyator

İstənilən qüvvənin təsiri altında rəqs edən sistemin potensial funksiyası ümumiyyətlə koordinatların mürəkkəb funksiyası olur. §35-də qeyd etdiyimiz kimi, yalnız kifayət qədər kiçik amplitudlu rəqslər üçün o, yerdəyişmənin üstlü sırası şəklində göstərilə bilər (§35.8)-ə bax):

$$U(x) = \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 + \lambda x^3 + \beta x^4 + \dots \quad (48.1)$$

Potensial funksiyası bu şəkllə malik olan sistem anharmonik ossilyator adlanır. (48.1) sırasının birinci üç həddi ilə kifayətlənsək, anharmonik ossilyatorun koordinat təsvirində Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 + \lambda x^3 + \beta x^4 \quad (48.2)$$

olar. \tilde{H} aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından sistemin halları stasionar hallar olur. Lakin (48.2)-yə uyğun

$$\left(\frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 + \lambda x^3 + \beta x^4\right)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (48.3)$$

Şredinger tənliyi dəqiq həll olunmur.

x -in kifayət qədər kiçik qiymətlərində (48.3) ifadəsində üçüncü və dördüncü hədlər birinci iki həddən xeyli kiçik qalır. Onda

$$\tilde{V}(x) = \lambda x^3 + \beta x^4 \quad (48.4)$$

operatoruna həyəcanlanma operatoru,

$$\tilde{H}_0 = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 \quad (48.5)$$

isə həyəcanlanmamış sistemin Hamilton operatoru kimi baxıb, (48.3) tənliyini həll etmək üçün həyəcanlanma nəzəriyyəsiindən istifadə etmək olar.

§35-dən bildiyimiz kimi, (48.5) ilə verilmiş \tilde{H}_0 operatoru harmonik xətti ossilyatorun Hamilton operatorudur. Onun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları §35-də tapılmışdır:

$$E_n^0 = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (48.6)$$

$$\Psi_n^0 = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi).$$

Xətti ossilyatorun kvant halları cırlaşmamış olduğundan (48.3) tənliyi Şredingerin belə hallar üçün inkişaf etdirdiyi stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsinin köməyi ilə həll oluna bilər. Lakin biz, anharmonik ossilyatorun yalnız enerji spektrini hesablamaqla kifayətlənəcəyik.

İkinci yaxınlaşma da nəzərə alınmaqla sistemin enerjisi

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}. \quad (48.7)$$

Enerjiyə birinci tərtib əlavə, məlum olduğu kimi (bax §47) \tilde{V} -nin baxılan haldakı otra qiymətinə bərabərdir:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \lambda(x^3)_{nn} + \beta(x^4)_{nn}. \quad (48.8)$$

Asanlıqla köstərmək olar ki,

$$(x^3)_{nn} = \int \Psi_n^o x^3 \Psi_n^o dx = 0.$$

Doğrudan da, burada inteqral altındakı funksiya tək funksiya olduğundan, belə funksiyalarda $(-a, a)$ intervalında götürülmüş inteqral həmişə sıfır bərabərdir. Onda

$$E_n^{(1)} = \beta(x^4)_{nn} = \beta \int \Psi_n^o x^4 \Psi_n^o(x) dx \quad (48.9)$$

olar. (48.6) ilə verilmiş Ψ_n^o funksiyalarının köməyiylə $(x^4)_{nn}$ -i bilavasitə hesablamaq olar. Lakin x_{nk} matrisa elementinin (35.42) ifadəsi məlum olduğundan, matrisaların vurma qaydasının köməyiylə o, daha asan hesablanabilir.

Əvvəlcə $(x^4)_{nn}$ -i

$$(x^4)_{nn} = \sum_k (x^2)_{nk} (x^2)_{kn} \quad (48.10)$$

şəklində yazmaq. Sonra da

$$(x^2)_{nk} = \sum_m x_{nm} x_{mk}$$

bərabərliyindən istifadə edərək $(x^2)_{nk}$ -ni hesablayaq. (35.42) əsasən

$$(x^2)_{nk} = x_o^2 \sum_m \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n-1} \right) \left(\sqrt{\frac{m}{2}} \delta_{k,m-1} + \sqrt{\frac{m+1}{2}} \delta_{k,m+1} \right).$$

Mötərizələri vurub, m üzrə cəmi δ -simvolu vasitəsilə götürsək,

$$(x^2)_{nk} = \frac{x_o^2}{2} \left\{ \sqrt{n(n-1)} \delta_{k,n-2} + (2n+1) \delta_{kn} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{k,n+2} \right\} \quad (48.11)$$

alınır. Buradan görünür ki, $(x^2)_{nk}$ matrisasının k -nın yalnız $k=n$ və $k=n\pm 2$ matrisa elementləri sıfırdan fərqlidir:

$$(x^2)_{nk} = (x^2)_{n,n-2} + (x^2)_{nn} + (x^2)_{n,n+2}. \quad (48.12)$$

Burada

$$\begin{aligned} (x^2)_{n,n-2} &= \langle n | x^2 | n-2 \rangle = \frac{x_o^2}{2} \sqrt{n(n-1)} \\ (x^2)_{n,n+2} &= \langle n | x^2 | n+2 \rangle = \frac{x_o^2}{2} \sqrt{(n+1)(n+2)} \\ (x^2)_{nn} &= \langle n | x^2 | n \rangle = \frac{x_o^2}{2} (2n+1) \end{aligned} \quad (48.13)$$

$(x^2)_{nk}$ -nin (48.11) ilə verilmiş ifadəsini (48.10)-da yerinə yazıb, $(x^2)_{nk} = (x^2)_{kn}$ bərabərliyini nəzərə alsaq,

$$(x^4)_{nn} = ((x^2)_{n,n-2})^2 + ((x^2)_{nn})^2 + ((x^2)_{n,n+2})^2 \quad (48.14)$$

və (48.13)-ə əsasən

$$(x^4)_{nn} = \frac{3}{2} x_o^4 \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right)$$

alınır. Beləliklə, enerjiyə birinci tərtib əlavə

$$E_n^{(1)} = \frac{3\beta}{2} \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) \quad (48.15)$$

olar.

Həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasında alınan nəticəni aşağıdakı kimi izah etmək olar. Bu yaxınlaşmada xətti harmonik ossilyatorun enerjisinə olan $\lambda(x^3)_{nn}$ kiçik əlavə yalnız $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ parabolunu cüzi təhrif edir və aşağı (əsas hala yaxın) enerji səviyyələri üçün onun enini dəyişmişir. Sistemin rəqs oblastının ölçüləri təxminən harmonik ossilyatorun rəqs oblastının ölçüləri ilə eyni olur və sistemin enerjisi dəyişmişir. $V(x)$ potensialın ifadəsindəki βx^4 həddi isə, simmetrik olaraq parabolun hər iki budağını ya yuxarı qaldırır ($\beta > 0$), ya da aşağı salır ($\beta < 0$). Nəticədə, hətta aşağı enerji səviyyələrində belə, parabolun eni və rəqs oblastının ölçüləri, uyğun olaraq, kiçilir və ya böyüyür. Bu isə sistemin bütün enerji səviyyələrinin $E_n^{(1)}$ -in işarəsindən asılı olaraq, yuxarı və ya aşağı sürüşməsinə səbəb olur.

(48.15)-dən görünür ki, $E_n^{(1)}$ əlavəsi \hbar^2 ilə ($E_n^o \sim \hbar$) mütənasibdir. (48.6) sırasının tərkibinə bu tərtibli başqa hədlər də daxil olursa, yəqin ki, onları da nəzərə almaq lazımdır. Hesablamalar göstərir ki, yalnız λx^3 həddi ikinci yaxınlaşmada \hbar^2 tərtibli əlavəyə gətirir.

Həyəcanlanma nəzəriyyəsində enerjiyə ikinci tərtib əlavə

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk} V_{kn}}{E_n^o - E_k^o} = \lambda^2 \sum_k \frac{(x^3)_{nk} (x^3)_{kn}}{E_n^o - E_k^o} \quad (48.16)$$

düsturu ilə verilir.

$(x^3)_{nk}$ -ni hesablamaq üçün yenə də matrisaların vurulma qaydasından istifadə edək:

$$(x^3)_{nk} = \sum_m (x^2)_{nm} (x)_{mk} .$$

$(x^2)_{nk}$ -in (48.12), (48.13) və x_{mk} -nin (35.42) ilə verilmiş ifadələrini burada yerinə yazsaq,

$$(x^3)_{nk} = \frac{x_o^3}{2\sqrt{2}} \sum_m \left\{ \sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{mn} + \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \right\} x$$

$$\times \left\{ \sqrt{\frac{m}{2}} \delta_{m-1,k} + \sqrt{\frac{m+1}{2}} \delta_{m+1,k} \right\}$$

olar. Burada m üzrə cəmi götürəndən sonra

$$(x^3)_{nk} = \frac{x_o^3}{2\sqrt{2}} \left\{ \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{k,n-3} + 3n\sqrt{n} \delta_{k,n-1} + 3(n+1)\sqrt{n+1} \delta_{k,n+1} + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \delta_{k,n+3} \right\}$$

alınır. Deməli, $(x^3)_{nk} = \langle n | x^3 | k \rangle$ matrisasının yalnız $k=n\pm 1$ və $k=n\pm 3$ matrisa elementləri sıfırdan fərqlidir.

$$\begin{aligned} \langle n | x^3 | n-1 \rangle &= 3x_o^3 \left(\frac{n}{2} \right)^{3/2}, \\ \langle n | x^3 | n+1 \rangle &= 3x_o^3 \left(\frac{n+1}{2} \right)^{3/2}, \\ \langle n | x^3 | n-3 \rangle &= \frac{x_o^3}{2} \left(\frac{n(n-1)(n-2)}{2} \right)^{1/2}, \\ \langle n | x^3 | n+3 \rangle &= \frac{x_o^3}{2} \left(\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (48.17)$$

Buradan enerjiyə görə ikinci tərtib əlavə

$$E_n^{(2)} = \lambda^2 \left[\frac{((x^3)_{n,n-1})^2}{E_n^o - E_{n-1}^o} + \frac{((x^3)_{n,n+1})^2}{E_n^o - E_{n+1}^o} + \frac{((x^3)_{n,n-3})^2}{E_n^o - E_{n-3}^o} + \frac{((x^3)_{n,n+3})^2}{E_n^o - E_{n+3}^o} \right].$$

(48.5) və (48.17) bərabərliklərindən istifadə edərək $E_n^{(2)}$ üçün

$$E_n^{(2)} = -\frac{15}{4} \frac{\lambda^2 \hbar^2}{m^3 \omega^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) \quad (48.18)$$

qiyməti alınır.

(48.5), (48.6), (48.15) və (48.18) ifadələrindən anharmonik ossilyatorun

enerji spektri üçün, \hbar -in kvadratı ilə mütənasib hədlər dəqiqliyi ilə,

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{3\beta\hbar^2}{2m^2\omega^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) - \frac{15}{4}\frac{\lambda^2\hbar^2}{m^3\omega^4}\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) \quad (48.19)$$

alınır.

Anharmonik ossilyatorun kvant səviyyələri üçün alınmış (48.19) ifadəsindən molekulların rəqsi enerji səviyyələrini hesablamaq üçün istifadə edilir. Rəqslərin harmonik olduğu fərz olunarsa, molekulların rəqs-kvant səviyyələri (48.6), harmoniklik şərti pozulduğu hallarda isə (48.19) ifadəsi ilə verilir.

§49. Ştark effekti

Təbiətdəki bütün maddələr yüklü zərrəciklərdən – nüvə və elektronlardan ibarət atomlardan təşkil olunmuşdur. Onlar arasında meydana çıxan Kulon qarşılıqlı təsiri maddələrin əksər xassələrini təyin edir. Nüvənin elektrik (Kulon) sahəsində hərəkət edən elektronun enerji spektri § 40-da hesablanmışdır. İndi də xarici elektrik sahəsinin yüklü zərrəciklərdən ibarət neytral sistemə (atoma) təsirini öyrənək.

Təcrübə göstərir ki, xarici bircins elektrik sahəsində atomların spektral xətləri bir neçə xəttə parçalanır. Bu hadisəyə *Ştark effekti* deyilir. Belə parçalanma, yəqin ki, atomun stasionar səviyyəsinin bir neçə səviyyəyə parçalanma nəticəsi olur.

Atom intensivliyi $\vec{\mathcal{E}}$ olan xarici elektrik sahəsinə daxil edildikdə, elektronun nüvə sahəsindəki hərəkətini təsvir edən $\check{H}_o = \frac{\check{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$ Hamilton operatoruna, atomla xarici sahə arasındakı qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən $\check{V} = -\vec{d} \vec{\mathcal{E}}$ operatoru əlavə olunur, burada $\vec{d} = -e\vec{r}$ atomun dipol momenti operatorudur.

Koordinat sisteminin z oxunu xarici sahə istiqamətində yönəltsək, elektrik sahəsində atomun Hamilton operatoru

$$\check{H} = \check{H}_o + \check{V} = \frac{\check{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + e\mathcal{E}z \quad (49.1)$$

olar. Buradan görünür ki, xarici sahə daxil edildikdə sistemin simmetriyası pozulur. Əvvəlcə sistemin \check{H}_o operatoru sferik simmetriyaya malik idi. Onun hərəkət miqdarı momenti (kvadratı mənasında) və momentin L_z proyeksiyası saxlanırdı (hərəkət inteqralları idi). İndi isə sistem aksial simmetriyaya

malikdir və hərəkət miqdarı momentinin yalnız L_z proyeksiyası hərəkət inteqralı olur. Başqa sözlə \tilde{H} operatoru yalnız z oxu (xarici sahə) ətrafında ixtiyari bucaq qədər fırlanmaya görə invariant qalır. Bundan başqa, (49.1) operatoru z oxundan keçən istənilən müstəvidəki fəza koordinatlarının inversiyasına ($x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$) görə də invariantdır. Fəza inversiyası zamanı $L_z = m\hbar$ proyeksiyası işarəsini dəyişdiyindən ($m \rightarrow -m$) hərəkət miqdarı momentinin L_z proyeksiyasının işarəsi ilə fərqlənən stasionar halların enerjisi eyni və onlar ikiqat cırlaşmış olur.

Xarici elektrik sahəsinin intensivliyi (təxminən $10^4 \div 10^5$ V/sm), atomun daxilində nüvənin yaratdığı sahənin intensivliyindən ($\sim 5 \cdot 10^9$ V/sm) xeyli kiçik olduğundan, birincinin təsiri altında parçalanmış E^o enerji səviyyələri arasındakı məsafə, iki ardıcıl stasionar səviyyə arasındakı məsafədən xeyli kiçik olur. Buna görə də \tilde{V} operatorunu həyəcanlanma operatoru qəbul edib, sistemin

$$E\Psi = (\tilde{H}_o + V)\Psi \quad (49.2)$$

Şredinger tənliyini həyəcanlanma metodu vasitəsi ilə həll etmək olar.

Həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasında həyəcanlanmamış sistemin enerjisinə birinci tərtib əlavə, həyəcanlanma operatorunun baxılan haldakı orta qiymətinə bərabərdir:

$$E_n^{(1)} = \langle n | V | n \rangle = \int \Psi_n^{o*} \tilde{V} \Psi_n^o (d\vec{r}). \quad (49.3)$$

(§ 40) və (§ 89) paraqraflarda hidrogen, hidrogenəbənzər və bir optik elektronlu atomların enerji spektrləri və dalğa funksiyaları spektrləri hesablanmışdır:

Hidrogen və hidrogenəbənzər atomlar üçün

$$E_n^o = -\frac{me^4 Z^2}{2n^2 \hbar^2}; \quad \Psi_{nlm}^o = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (49.4)$$

bir optik elektronlu atomlar üçün isə

$$E_{nl}^o = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 (n + \sigma_l)^2}; \quad \Psi_{nlm}^o = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (49.5)$$

alınır.

Birinci halda sistemin hər bir enerji səviyyəsi həm l və həm də m kvant

ədədlərinə görə n^2 tərtibdə, ikinci halda isə yalnız m -ə görə $2l+1$ tərtibdə cırlaşmışdır. Superpozisiya prinsipinə görə hidrogen atomunun E_n^o halının φ_n dalğa funksiyası Ψ_{nlm}^o funksiyaları ilə

$$\varphi_n(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} C_{lm} \Psi_{nlm}^o, \quad (49.6)$$

bir optik elektronlu atomların E_{nl}^o halının φ_{nl} dalğa funksiyası isə

$$\varphi_{nl}(r, \theta, \varphi) = \sum_m C_m \Psi_{nlm}^o \quad (49.7)$$

kimi ifadə olunur. Onda həyəcanlanmamış sistemin enerjisinə birinci tərtib əlavə hidrogen növlü atomlar üçün

$$E_n^{(1)} = \int \varphi_n^* V \varphi_n(d\vec{r}) = \langle n | V | n \rangle, \quad (49.8)$$

bir optik elektronlu atomlar üçün isə

$$E_{nl}^{(1)} = \int \varphi_{nl}^* V \varphi_{nl}(d\vec{r}) = \langle nl | V | nl \rangle \quad (49.9)$$

şəklində yazılır.

(49.8) və (49.9)-dan görünür ki, hər iki halda atomun əsas halına birinci tərtib əlavə həmişə sıfır bərabərdir. Həyəcanlanmış halların enerjisinə birinci tərtib əlavə isə sıfırdan fərqli ola bilər.

Doğrudan da, hər iki növ atomun əsas halı cırlaşmamış olur. Onların əsas halı eyni bir Ψ_{100}^o funksiyası ilə təsvir olunur və

$$E_1^{(1)} = E_{10}^{(1)} = e^2 \mathcal{E} \int \Psi_{100}^{o*} z \Psi_{100}^o(d\vec{r}) = 0$$

olur, belə ki, inteqralaltı funksiya tək funksiyadır. Əsas hala ikinci və yüksək tərtibli əlavələr isə sıfırdan fərqli olur. Məsələn, hidrogen atomunun əsas halının enerjisinə ikinci tərtib əlavə

$$E_1^{(2)} = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{nlm} \frac{\left| \int \Psi_{100}^{o*} z \Psi_{nlm}^o(d\vec{r}) \right|^2}{E_1^o - E_n^o}$$

ifadəsindən hesablanır və sıfırdan fərqli qiymət alır.

Həyəcanlanmış hallara gəldikdə, onlar bu və ya başqa tərtibdən cırlaşmış olur. Belə halların enerjisinə birinci tərtib əlavə

a) hidrogen növlü atomlar üçün (49.4) və (49.8)-dən

$$E_n^{(1)} = \langle n | V | n \rangle = e\mathcal{E} \sum_{l'm'm'} C_{l'm'm'}^* C_{lm} \int \Psi_{n'l'm'}^{\circ} z \Psi_{nlm}^{\circ} (d\vec{r}). \quad (49.10)$$

b) bir optik elektronlu atomlar üçün isə (49.5) və (49.9)-dan

$$E_{nl}^{(1)} = \langle nl | V | nl \rangle = e\mathcal{E} \sum_{m'm} C_m^* C_m \int \Psi_{nlm'}^{\alpha} z \Psi_{nlm}^{\circ} (d\vec{r}) \quad (49.11)$$

olur.

Bir optik elektronlu atomlarda atomun hər bir stasionar halı $(-1)^l$ ilə təyin olunan müəyyən cütliyə malikdir. (49.11)-də m' və m -in müxtəlif qiymətlər almasına baxmayaraq, inteqralaltı funksiya fəza koordinatlarının inversiyası zamanı öz işarəsini dəyişir, yəni o tək funksiyadır. Ona görə də

$\int \Psi_{nlm'}^{\alpha} z \Psi_{nlm}^{\circ} (d\vec{r})$ inteqralı həmişə sıfıra bərabər olur. Başqa sözlə, bir optik elektronlu atomlar üçün enerjiyə birinci tərtib əlavə həmişə sıfırdır:

$E_{nl}^{(1)} = 0$. Onlar üçün enerjiyə ikinci və yüksək tərtibli əlavələr isə sıfırdan fərqli qalır. Doğrudan da, xarici elektrik sahəsinin təsiri altında E_{nl}° səviyyəsi parçalananda alınan yeni enerji səviyyələri arasındakı

$$\Delta E_{nl} = E_{nl}^{(2)} = E_{nl} - E_{nl}^{\circ} = \sum_{n'l'm'} \frac{V_{nlm, n'l'm'} V_{n'l'm', nlm}}{E_{nl}^{\circ} - E_{n'l'}^{\circ}}$$

fərqi xarici sahənin intensivliyinin kvadratı ilə mütənasibdir. Bu *kvadratik Stark effekt* adlanır.

Hidrogen və hidrogenəbənzər atomlara gəldikdə isə, (49.6)-dan göründüyü kimi, onlar üçün E_n° stasionar halı müəyyən cütliyə malik olur.

(49.10) – da l' in l - ə bərabər qiymətlərində inteqralaltı funksiya tək, l' -in l -dən fərqli qiymətlərində isə cüt olur, birinci hallarda inteqral sıfır, ikinci hallarda isə sıfırdan fərqli qalır. Buna görə də $E_n^{(1)} = E_n - E_n^{\circ} = \Delta E_n$ əlavəsi ümumiyyətlə sıfırdan fərqli və xarici sahənin birinci dərəcəsi ilə mütənasib olur. Bu *xətti Stark effekti* adlanır.

Xarici elektrik sahəsində hidrogen atomunun E_n° stasionar səviyyələrinin parçalanması hadisəsinin ümumi kvant nəzəriyyəsi rus dilində

mövcud olan kvant mexanikası kurslarının əksəriyyətində verilmişdir. Lakin, hadisənin mahiyyətini aydınlaşdırmaq üçün hər hansı bir həyəcanlanmış stasionar səviyyənin parçalanmasını təhlil etməklə kifayətlənək.

Bu məqsədlə hidrogen atomunun həyəcanlanmış E_2^o ikinci kvant səviyyəsinin xarici sahədə parçalanmasını təhlil edək. Bildiyimiz kimi, hidrogen atomunun istənilən həyəcanlanmış səviyyəsi n^2 tərtibində cırlaşmışdır. Baxılan E_2^o kvant səviyyəsi $\Psi_{200}^o, \Psi_{210}^o, \Psi_{211}^o, \Psi_{21-1}^o$ kimi dalğa funksiyaları ilə xarakterizə olunan dörd müxtəlif haldan ibarətdir, yəni baxılan səviyyə dörd qat cırlaşmış olur.

Bu funksiyaları

$$\Psi_1^o = \Psi_{200}^o = R_{20} Y_{00}(\theta, \varphi), \quad \Psi_3^o = \Psi_{211}^o = R_{21} Y_{11}(\theta, \varphi) \quad (49.12)$$

$$\Psi_2^o = \Psi_{210}^o = R_{21}(r) Y_{10}(\theta, \varphi), \quad \Psi_4^o = \Psi_{21-1}^o = R_{21}(r) Y_{1-1}(\theta, \varphi)$$

kimi işarə edək. (14.28') və (40.40) -a əsasən

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}; \quad Y_{1\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

və

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \left(1 - \frac{r}{2a} \right), \quad R_{21} = \frac{1}{\sqrt{6a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \frac{r}{2a}$$

(burada a – Bor orbitinin radiusudur). Onda E_2^o halının dalğa funksiyası

$$\Psi_{n=2}^o = \sum_{\alpha=1}^4 C_{\alpha} \Psi_{\alpha}^o \quad (49.13)$$

olar.

Atomun \mathcal{E} xarici elektrik sahəsində parçalanmış kvant səviyyələrinin enerjisini və uyğun dalğa funksiyalarını tapmaq üçün həyəcanlanmamış ($\mathcal{E}=0$) sistemin hallarının cırlaşmış olduğu hal üçün inkişaf etdirilmiş həyəcanlanma nəzəriyyəsi istifadə etmək olar.

Bu hal üçün enerji təsvirində yazılmış Şredinger tənliyi (46.31) ilə verilmişdir. Orada $n=2$ götürsək, baxılan hal üçün (46.31) tənliyi

$$(E_2^o - E_2 + V_{\alpha\alpha})C_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} V_{\alpha\beta} C_\beta = 0 \quad (49.14)$$

kimi yazılır, burada

$$V_{\alpha\beta} = e\mathcal{E} \int \Psi_\alpha^o z \Psi_\beta^o(d\vec{r}) \quad (49.15)$$

və Ψ_α^o -funksiyaları (49.12) ilə verilmişdir. z -tək funksiya olduğundan (49.15) ilə verilmiş on altı integraldan yalnız elələri sıfırdan fərqli olacaq ki, integrallardakı Ψ_α^o və Ψ_β^o funksiya müxtəlif cüt lüye malik və $\int e^{i(m'-m)\varphi} d\varphi = 2\pi\delta_{m'm}$ bərabərliyinə əsasən maqnit kvant ədədləri isə bərabər olsun ($m=m'$).

Beləliklə, yalnız

$$V_{21} = V_{12} = e\mathcal{E} \int \Psi_{200}^o z \Psi_{210}^o(d\vec{r}) = -3ae\mathcal{E} \quad (49.16)$$

matrisa elementləri sıfırdan fərqli olur, burada a – birinci Bor orbitinin radiusudur. Onda (49.14) sistemi

$$\begin{aligned} (E_2^o - E_2)C_1 + V_{12}C_2 &= 0 \\ (E_2^o - E_2)C_2 + V_{21}C_1 &= 0 \\ (E_2^o - E_2)C_3 &= 0 \\ (E_2^o - E_2)C_4 &= 0 \end{aligned} \quad (49.17)$$

şəklinə düşür.

(49.17) bircins sistemin qeyri-trivial (sıfırdan fərqli) həllərinin olması üçün

$$\begin{vmatrix} E_2^o - E_2 & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & E_2^o - E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^o - E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^o - E_2 \end{vmatrix} = 0$$

bərabərliyi ödənilməlidir. Determinantı açsaq, E_2 -nin məxsusi qiymətləri

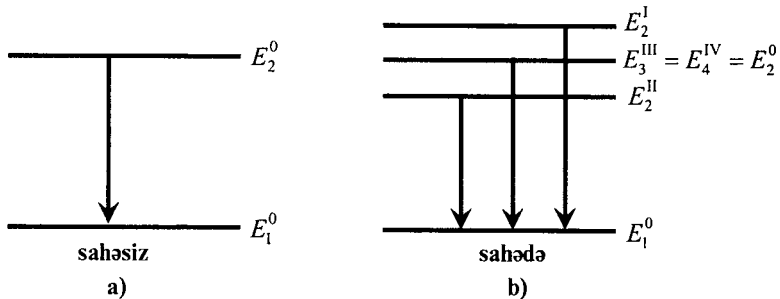
$$(E_2^o - E_2)^2[(E_2^o - E_2)^2 - V_{12}^2] = 0 \quad (49.18)$$

tənliyinin kökləri olar. Buradan E_2 üçün

$$E_2^I = E_2 + V_{12}, E_2^{II} = E_2 - V_{12}, E_2^{III} = E_2^{IV} = E_2^o \quad (49.19)$$

kimi üç müxtəlif kök alınır. Belə ki, dörd qat cırılmış E_2^o səviyyəsi xarici sahənin təsiri nəticəsində üç müxtəlif səviyyəyə parçalanır, yəni cırılma tam yox, qismən aradan qaldırılır və $E_2^{III} = E_2^{IV} = E_2^o$ halı iki qat cırılmış qalır. Xarici sahə olmadıqda spektrin $E_2^o \rightarrow E_1^o$ keçidinə uyğun xətti, xarici sahədə $E_2^I \rightarrow E_1^o$, $E_2^{II} \rightarrow E_1^o$ və $E_2^{III} = E_2^{IV} \rightarrow E_1^o$ keçidlərinə uyğun üç xəttə parçalanır (şəkil 24).

İndi də bu üç halın sıfırıncı yaxınlaşmada dalğa funksiyalarını tapmaq.



Şəkil 24. Atomun spektrində $2p-1s$ keçidinə uyğun spektr xəttinin (a) elektrik sahəsində üç xəttə (b) parçalanması.

Bu məqsədlə E_2 üçün tapılmış (49.19) köklərini ayrılıqda (49.17) sistemində yazıb. C_α əmsallarını tapmaq lazımdır. E_2 -nin yerinə onun $E_2^I = E_2^o + V_{12}$ kökünü (49.17)-də yazsaq, $C_1 = C_2 = C$; $C_3 = C_4 = 0$ alınır. (49.13)-dən bu səviyyənin dalğa funksiyası

$$\Psi_2^{oI} = C(\Psi_1^o + \Psi_2^o) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{200}^o + \Psi_{210}^o), E_2 = E_2^o + V_{12} \quad (49.20)$$

E_2 -nin $E_2^{II} = E_2 - V_{12}$ kökü üçün isə $C_1 = -C_2 = C$, $C_3 = C_4 = 0$ alınır. Onda

$$\Psi_2^{oII} = C(\Psi_1^o - \Psi_2^o) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{200}^o - \Psi_{210}^o); \quad E_2 = E_2^o - V_{12}. \quad (49.21)$$

(49.20) və (40.21) ifadələrindəki C vuruğu funksiyaların normalanma şərtindən tapılır.

Eynilə bunun kimi E_2 -nin E_2^{III} və E_2^{IV} köklərində $C_1=C_2=0$, $C_3 \neq 0$, $C_4 \neq 0$ olur. Uyğun dalğa funksiyası

$$\Psi_2^{o(III,IV)} = C_3 \Psi_3^o + C_4 \Psi_4^o; \quad E_2^{III} = E_2^{IV} = E_2^o$$

alınır, burada C_3 və C_4 - ixtiyari sabitlərdir.

Hidrogen atomu üçün yuxarıda alınan nəticələr aşağıdakı kimi izah oluna bilər.

Hidrogen atomunun həyəcanlanmış halları mərkəzi simmetriyaya və (49.6) -dan müəyyən cütlüyə malik deyildir. Bu hallarda hidrogen atomu müəyyən $\vec{d} = -e\vec{r}$ dipol momenti kəsb edir. Belə atom xarici elektrik sahəsinə düşdükdə onun sahə ilə qarşılıqlı təsiri həmin moment ilə təyin olunur: $V = -\vec{d} \vec{E}$. Atomun E_2^{III} və E_2^{IV} səviyyələrinin bir-birinə nəzərən sürüşməməsi göstərir ki, ya bu səviyyələrdə hidrogen atomu dipol momentinə malik deyil, ya da momentin istiqaməti sahənin istiqamətinə perpendikulyardır. E_2^I və E_2^{II} səviyyələrində isə dipol momenti, uyğun olaraq, sahə istiqamətində və ona əks istiqamətdə yönəlmişdir.

Birinci yaxınlaşmada hidrogen atomu üçün alınmış bu nəticələr intensivliyi $\vec{E} \sim 10^4$ V/sm olan nisbətən zəif sahələr üçün təcrübə ilə yaxşı uyğunlaşır. Nisbətən güclü ($\vec{E} \sim 10^5$ V/sm) sahələrdə isə m kvant ədədinə uyğun cırılmanın aradan götürülməsi nəticəsində kvadratik Ştark effekti hesabına səviyyələrin əlavə parçalanması baş verir. Daha güclü ($\vec{E} > 10^5$ V/sm) sahələrdə isə atomun ionlaşması nəticəsində Ştark effekt tam itir.

§50. Şüalanma nəzəriyyəsi

a) Eynşteyn əmsalları. Klassik nəzəriyyəyə görə təcillə hərəkət edən elektrik yükünə malik hər bir zərrəcik şüalanma mənbəyi ola bilər. O, bir saniyədə təcilin kvadratının qiymətilə mütənəsis

$$W^{\text{kl}} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} \ddot{r}^2 \quad (50.1)$$

miqdarda enerji şüalandırır. Belə zərrəcik atomda hərəkət edən elektron olarsa, onun qapalı orbit boyunca hərəkətinə nüvədən keçən hər hansı ox üzrə müəyyən ω dövrü tezliklə baş verən rəqsi hərəkət kimi baxmaq olar. Onda zərrəciyin radius vektoru zamana görə

$$\vec{r} = \vec{r}_0 \cos \omega t \quad (50.2)$$

qanunu ilə dəyişər. (50.2)-dən

$$\ddot{\vec{r}} = -\omega^2 \vec{r}_0 \cos \omega t = -\omega^2 \vec{r}$$

olduğundan

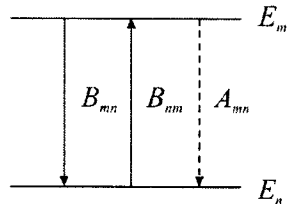
$$W^{kl} = \frac{2\omega^4}{3c^3} \overline{(e\vec{r})^2} = \frac{2\omega^4}{3c^3} \overline{d^2} \quad (50.3)$$

olar. Buradan çıxır ki, (50.2) qanunu ilə rəqs edən istənilən ossilyator və ya ossilyatorlar sistemi də şüalanma mənbəyi ola bilər.

Beləliklə, klassik nəzəriyyəyə görə hər hansı sistemin şüalandırdığı enerji onun dinamik xarakteristikaları ilə təyin olunur: şüalanan enerjinin tezliyi sistemin mexaniki rəqs tezliyinə bərabər və onun intensivliyi rəqsin \vec{r} amplitudunun və ya sistemin dipol momentinin zamana görə kvadratik orta qiymətilə mütənasib olur.

Kvant nəzəriyyəsi baxımından şüalanma mexanizmi klassik mexanizmdən tamamilə fərqlənir. Nils Bor tərəfindən fizikaya atomun stasionar kvant halları anlayışı daxil ediləndən sonra, onun ikinci postulatına görə, atomun və ya hər hansı kvant sistemin şüaburaxma və şüaudma prosesləri, sistemin bir stasionar kvant halından digər stasionar kvant halına keçməsi nəticəsidir. Enerjisi böyük olan (yuxarı) haldan enerjisi kiçik olan (aşağı) hala keçdikdə sistem bu halların enerjiləri fərqi bərabər enerji şüalandırır, aşağıdan yuxarı keçdikdə isə bu qədər enerji sistem tərəfindən udulur. Dediklərimizi sistemin iki enerji halları (səviyyələri) timsalında izah edək.

İxtiyari şəkildə seçilmiş iki E_m və E_n səviyyələri arasında üç cür keçid mümkündür (şəkil 25). Bütöv xətlərlə çəkilmiş keçidlər məcburi keçidlər adlanır. Məcburi keçidlər kvant sistemində edilən (məsələn, atoma) hər hansı xarici təsir nəticəsində baş verir. Qırıq xətlə çəkilmiş keçid isə spon-



Şəkil 25. Atomun E_m və E_n səviyyələri arasında mümkün olan məcburi (V_{mn} , B_{nm}) və spontan (A_{mn}) keçidlərin sxemi.

tan (özbaşına) keçid adlanır. Yuxarı səviyyədən aşağı səviyyəyə belə keçid sistemə heç bir xarici təsir olmadıqda belə «özbaşına» baş verir.

Şredinger nəzəriyyəsi çərçivəsində yalnız atomun xarici təsir, məsələn, elektromaqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində baş verən məcburi keçidlərin nəzəriyyəsini qurmaq olur, özbaşına keçidlərin səbəbi isə izah olunmadan qalır. Yalnız kvant elektrodinamikasında (ikinci kvantlanma metodu) spontan keçidləri yaradan təsiri müəyyən etmək və şüalanmanın tam kvant nəzəriyyəsini qurmaq mümkün olur (bax: 50.102). Buna görə də biz əvvəldə məcburi keçidlərin hesabına sistemin şüalanma və şüaudma proseslərinin yarım klassik nəzəriyyəsi üzərində dayanacağıq. Kvant elektrodinamikasının elementləri ilə tanış olduqdan sonra isə yığcam şəkildə şüalanmanın kvant nəzəriyyəsi şərh ediləcəkdir.

Şüalanma probleminin kvant nəzəriyyəsi baxımından təhlilini ilk dəfə 1917-ci ildə Eynşteyn vermişdi. O, məcburi və spontan keçidlərin ehtimallarını xarakterizə etmək üçün uyğun olaraq B və A əmsallarını daxil etmişdi. Onlar hazırda *Eynşteyn əmsalları* adlanır.

Kvant nəzəriyyəsinə görə atom hər hansı E_m həyəcanlanmış səviyyədən aşağı ixtiyari E_n enerji səviyyəsinə özbaşına keçmək ehtimalına malikdir. Belə keçidin vahid zamanda baş vermə ehtimalı A_{mn} ilə işarə olunur. Belə keçid zamanı enerjisi $\hbar \omega_{mn} = E_m - E_n$ olan foton buraxılır. Enerjisi E_m olan həyəcanlanmış atomların sayını N_m ilə işarə etsək, sistemin vahid zamanda spontan keçidlərin nəticəsində şüalandırdığı enerji

$$W_{mn}^{cn} = \hbar \omega_{mn} N_m A_{mn} \quad (50.4)$$

olar.

Sistem xarici elektromaqnit sahəsinin təsiri altında olarsa, bu təsir atomların yuxarı səviyyədən aşağı səviyyəyə və aşağı səviyyədən yuxarı səviyyəyə məcburi keçidlərini yarada bilər. Bu keçidlər zamanı atomlar birinci halda foton şüalandırır, ikinci halda isə xaricdən üzərinə düşən fotonları udur. Vahid zamanda E_m səviyyəsindən E_n səviyyəsinə məcburi keçidlərin ehtimalını B_{mn} və E_n -dən E_m -ə keçidin ehtimalını isə B_{nm} ilə işarə etsək, bu keçidlər nəticəsində vahid zamanda sistemin şüalandırdığı və ya udduğu enerjinin miqdarı uyğun səviyyələrdəki atomların N_m və N_n sayı və düşən elektromaqnit sahəsinin $\rho(\omega, T)$ spektral sıxlığı ilə mütənəsis olacaqdır:

$$W_{mn}^{m\acute{a}c} = N_m \rho(\omega, T) B_{mn} \hbar \omega_{mn}, \quad (50.5)$$

$$W_{nm}^{m\acute{a}c} = N_n \rho(\omega, T) B_{nm} \hbar \omega_{nm}.$$

Burada B_{mn} və B_{nm} – uyğun məcburi keçidlərin ehtimallarıdır.

Eynşteyn tarazlıqdakı şüalanma (mütləq qara cismin şüalanması) üçün A və B əmsalları arasındakı rəbitəni müəyyən etmişdi. Bu rəbitə kvant mexanikasında məcburi keçidlərin ehtimalını hesablaməqla, spontan keçidlərin ehtimalını tapmağa imkan verir.

Doğrudan da, əgər şüalanma onu şüalandıran cisim ilə dinamik tarazlıqdadırsa, onda yuxarıdan aşağıya keçidlərin (m -dən n -ə məcburi və m -dən n -ə spontan) hesabına şüalanan enerjinin miqdarı n -dən m -ə məcburi keçidlərdə udulan enerjinin miqdarına bərabər olmalıdır (sistemin temperaturu sabit saxlanır). Başqa sözlə, vahid zamanda cismin şüalandırdığı və onun şüalanma sahəsindən udduğu enerjilər orta hesabla bir-birinə bərabər olur. Bu halda (50.4) və (50.5) ifadələrindən

$$N_m B_{nm} \rho(\omega, T) \hbar \omega_{mn} + N_m A_{nm} \hbar \omega_{mn} = N_n B_{mn} \rho(\omega, T) \hbar \omega_{mn}$$

və ya

$$N_m B_{nm} \rho(\omega, T) + N_m A_{nm} = N_n B_{mn} \rho(\omega, T) \quad (50.6)$$

bərabərliyi alınar. Sistemdə elektronların (atomların) enerjiyə görə paylanmasını Maksvel–Bolsman paylanması şəklində olduğunu qəbul etsək, yəni

$$N_m = C e^{-\frac{E_m}{kT}} \quad \text{və} \quad N_n = C e^{-\frac{E_n}{kT}}$$

(burada k –Bolsman sabitidir). (50.6) bərabərliyi

$$B_{nm} \rho(\omega, T) e^{-\frac{E_m}{kT}} + A_{nm} e^{-\frac{E_m}{kT}} = B_{mn} \rho(\omega, T) e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad (50.7)$$

şəklinə düşər. Buradan şüalanmanın spektral sıxlığı üçün

$$\rho(\omega, T) = \frac{A_{nm} / B_{nm}}{\frac{B_{mn}}{B_{nm}} e^{-\frac{E_m - E_n}{kT}} - 1} \quad (50.8)$$

ifadəsi alınır.

Plank, mikrosistemlərin (atom və molekulların) enerjisinin kəsilmədən istənilən qiymət yox, yalnız müəyyən diskret qiymətlər ala bildiyini fərz edərək, tarazlıqdakı şüalanmanın spektral sıxlığı üçün

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{8\pi^2 c^3 (e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1)} \quad (50.9)$$

ifadəsini almışdı. (50.8) və (50.9) ifadələrinin müqayisəsindən

$$\frac{B_{nm}}{B_{nm}} = 1, \quad \frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar\omega^3}{8\pi^2 c^3}$$

alınır. Buradan çıxır ki, yuxarıdan aşağı və aşağıdan yuxarı olan məcburi keçidlərin ehtimalları bir-birinə bərabər, spontan keçidlərin A_{nm} ehtimalı isə həmin səviyyələr arasındakı məcburi keçidlərin B_{nm} ehtimalı ilə təyin olur:

$$B_{nm} = B_{mn}, \quad A_{nm} = \frac{\hbar\omega^3}{8\pi^2 c^3} B_{nm}. \quad (50.10)$$

Beləliklə, Şredinger nəzəriyyəsi vasitəsilə məcburi keçidlərin ehtimalı hesablanarsa, (50.10)-dan spontan keçidlərin ehtimalını tapmaq olar.

b) Sərbəst elektromaqnit sahəsi

Mənbələr olmayan fəzada elektromaqnit sahəsi

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{\mathcal{E}} &= \frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial t} & \operatorname{div} \vec{\mathcal{E}} &= 0, \\ \operatorname{rot} \vec{H} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & \operatorname{div} \vec{H} &= 0 \end{aligned} \quad (50.11)$$

Maksvel tənlikləri ilə təsvir olunur. $\vec{\mathcal{E}}$ və \vec{H} intensivlik vektorları isə sahənin $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektor-potensialı ilə

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{H} = \operatorname{rot} \vec{A} = [\vec{\nabla} \vec{A}] \quad (50.12)$$

kimi təyin olunur. (50.11) və (50.12)-dən $\vec{A}(\vec{r}, t)$ üçün

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (50.13)$$

dalğa tənliyi və

$$\operatorname{div} \vec{A} = 0 \quad (50.14)$$

şərti alınır.

(50.13) tənliyinin xüsusi həlli

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (50.15)$$

kimi axtarıla bilər. Bunu (50.13)-də yazsaq,

$$\ddot{\vec{A}}(\vec{k}, t) + c^2 k^2 \vec{A}(\vec{k}, t) = 0$$

və bunun xarakteristik tənliyi

$$m^2 + c^2 k^2 = 0, \text{ buradan } m = \pm ick$$

beləliklə

$$\vec{A}(\vec{k}, t) = \vec{a}_1(\vec{k}) e^{-ickt} + \vec{a}_2(\vec{k}) e^{ickt}$$

olar. Onda (50.15) xüsusi həlli

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{a}_1(\vec{k}) e^{-ickt + i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}_2(\vec{k}) e^{ickt + i\vec{k}\vec{r}} \quad (50.16)$$

müstəvi dalğası şəklində olar.

Maksvel tənlikləri xətti diferensial tənliklər olduğundan (50.13) tənliyinin ümumi həlli (50.16) xüsusi həllərin superpozisiyası olar. Digər tərəfdən, kvant mexanikasının ümumi prinsipinə görə, mikrosistemin sərbəst hərəkəti məhdud fəzada baş verirsə, o kvantlanır, yəni baxılan mikrosistemin enerji, impulsu və başqa dinamik kəmiyyətləri diskret qiymətlər alır. Sahənin ixtiyari $V=L^3$ həcmi ilə məhdud olduğunu fərz etsək, (50.13) tənliyinin V həcminə normallandırılmış ümumi həlli (50.16)-ya əsasən

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} \left\{ \vec{a}_1(\vec{k}) e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}_2(\vec{k}) e^{i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} \right\} \quad (50.17)$$

kimi yazıla bilər, burada $\omega = ck$ – dalğanın tezliyidir.

(50.17)-nin ikinci həddində \vec{k} -ni $-\vec{k}$ ilə əvəz etsək, həll dəyişməz,

çünki \vec{k} üzrə cəm k_x, k_y, k_z üzrə $(-\infty, +\infty)$ intervalında götürülmüş cəm kimi başa düşülür və belə əvəz cəmdə yalnız hədlərin ardıcılığını dəyişmiş olar. Onda

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} \left\{ \vec{a}_1(\vec{k}) e^{-i\alpha t + i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}_2(-\vec{k}) e^{i\alpha t - i\vec{k}\vec{r}} \right\}, \quad (50.18)$$

burada $\vec{a}_1(\vec{k})$ – yayılan və $\vec{a}_2(-\vec{k})$ – düşən dalğaların intensivliyini və polarlaşmanı təyin edən kompleks amplitudlar, \vec{k} – dalğanın yayılma istiqamətinə yönəlmiş dalğa vektorudur və o

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_1, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_2, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_3, \quad (50.19)$$

kimi diskret qiymətlər alır (bax (11.20)), $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots$ kimi tam müsbət qiymətlər alır.

(50.18) ifadəsində $\vec{a}_1(\vec{k}) = \vec{a}(\vec{k})$ və $\vec{a}_2(-\vec{k}) = \vec{a}^*(\vec{k})$ əvəzləməsini qəbul etsək,

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} \left\{ \vec{a}(\vec{k}) e^{-i\alpha t + i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}^*(\vec{k}) e^{i\alpha t - i\vec{k}\vec{r}} \right\} \quad (50.20)$$

olar.

c) Şüalanmanın yarım klassik nəzəriyyəsi

Bildiyimiz kimi Şredinger nəzəriyyəsində zərrəciyin hərəkəti kvantlanır; onun enerjisi, impulsu, hərəkət miqdarı momenti və başqa dinamik xarakteristikaları diskret qiymətlər alır, lakin sahələrə, xüsusi halda elektromaqnit sahəsinə isə klassik sistem kimi baxılır.

Elektromaqnit sahəsinin təsiri altında olan yüklü zərrəciyin Şredinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \Psi + e\varphi \Psi + U(\vec{r}) \Psi, \quad (50.21)$$

burada $\varphi(\vec{r}, t)$ və $\vec{A}(\vec{r}, t)$ – elektromaqnit sahəsinin skalyar və vektor potensiallarıdır.

Biz bu bölmədə yalnız atomun şüaburaxma və şüaudma proseslərinin təhlili ilə məşğul olacağıq, başqa sözlə, atomların şüalanma sahəsi ilə qarşı-

lıqlı təsirinı öyrənəcəyik. Şüalanma sahəsi isə yalnız $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektor potensialı ilə təsvir olunur, onun üçün skalyar potensial $\varphi = 0$ -dır.

Şüalanma sahəsi eninə sahədir, onun \vec{E} və \vec{H} intensivlik vektorları sahənin yayılma istiqamətinə perpendikulyardır. Bu şərt riyazi olaraq (50.14) şəklində yazılır. Beləliklə, baxılan hal üçün Şredinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} \vec{p}^2 + U(r) \right) \Psi - \frac{e}{mc} \vec{A} \vec{p} \Psi + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \Psi \quad (50.22)$$

şəklinə düşür.

Şredinger nəzəriyyəsində elektromaqnit sahəsi klassik sistem hesab olunmasına baxmayaraq, məcburi keçidlərin hesabına atomların şüaburaxma və şüaudma prosesləri üçün düzgün nəticə alınır. Bu, baxılan hallar üçün uyğunluq prinsipinin ödənilməsinin nəticəsidir.

Kvantlanmış şüalanma sahəsinə kvant ossilyatorlar (sahənin kvantları – fotonlar) çoxluğu (qazı) kimi baxmaq olar. Sahənin hər bir kvant halında, Boze – Eynşteyn statistikasına görə istənilən sayda foton ola bilər. Xarici şüalanma sahəsinin varlığı hesabına atom–şüalanma sisteminin hər bir kvant halında fotonların sayı kifayət qədər böyük olur. Bu da uyğunluq prinsipinin tələbinin ödənilməsinə gətirir: kvant və klassik nəzəriyyələrin nəticələri bir birinin üzərinə düşür. Digər tərəfdən, $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektorunun ödədiyi (50.13) tənliyi xətti tənlik olduğundan zəif intensivlikli şüalanma sahəsi halında da hər iki nəzəriyyə eyni nəticələrə gətirir.

Bu mülahizələr spontan şüalanma üçün öz mənasını itirir, çünki spontan keçidlər xarici elektromaqnit sahəsi olmadıqda belə baş verir və belə keçidlər zamanı bir foton da buraxıla bilər. Bir və hətta bir neçə on fotonlu hallar üçün uyğunluq prinsipi tətbiq oluna bilmir. Beləliklə şüalanma proseslərinin ardıcıl kvant nəzəriyyəsini qurmaq üçün, yəqin ki, şüalanma sahəsini də kvantlamaq lazımdır. Bu zaman hər iki növ keçidlərin səbəbi aydınlaşmış olar.

Atomun şüalanma (şüaudma) ehtimalını hesablayaq. Yuxarıda qeyd etdik ki, atomun məcburi keçidləri hesabına olan şüaburaxma və şüaudma proseslərinin ehtimalı bir-birinə bərabərdir. $\vec{A}(\vec{r}, t)$ -nin (50.20) ifadəsində ikinci hədd şüaburaxma, birinci həd isə şüaudma proseslərinə gətirir. Buna görə də atomun yalnız şüalanma prosesinin ehtimalını hesablamaqla kifayətlənmək olar.

(50.22) tənliyini

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\vec{H}_0 + \vec{V}) \Psi \quad (50.23)$$

kimi yazaq, burada

$$\check{H}_o = \frac{\check{p}^2}{2m} + U(r) \quad (50.24)$$

şüalanma sahəsi olmadıqda həyəcanlanmamış sistemin (atomun) Hamilton operatoru,

$$\check{V}(t) = -\frac{e}{mc} (\vec{A}\vec{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 \quad (50.25)$$

həyəcanlanma operatorudur. Şüalanma və şüaudma prosesləri atom sistemi ilə şüalanma sahəsi arasındakı bir aktlı qarşılıqlı təsirin nəticəsi olduğu üçün baxılan halda $V(t)$ operatorunun birinci həddini saxlamaq lazımdır. A^2 ilə mütənasib olan hədd isə iki aktlı proseslərə gətirir (bax §57 və §58).

Hesablamaları sadələşdirmək üçün müəyyən tezlikli dalğaların seçilmiş istiqamətdə şüalanması prosesinə baxaq. Fərz edək ki, atom

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{a} * (\vec{k}) e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}} = \vec{A}(\vec{r}) e^{i\omega t} \quad (50.26)$$

ilə xarakterizə olunan şüalanma ilə həyəcanlanır. Həyəcanlanma zamana görə periodik dəyişdiyindən, atomun E_m^0 stasionar halından E_n^0 stasionar halına məcburi keçidlərin ehtimalı §47-yə görə

$$W_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mn}^o|^2 \delta(\omega - \omega_{mn}) \quad (50.27)$$

olur, burada ω – düşən elektromaqnit sahəsinin tezliyi, $\omega_{mn} = \frac{E_m^o - E_n^o}{\hbar}$ keçid tezliyi, E_m^o və E_n^o – həyəcanlanmamış sistemin stasionar hallarının enerji-ləri,

$$V_{mn}^o = -\frac{e}{mc} \int \Psi_n^{o*}(\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}) \vec{p} \Psi_m^o(\vec{r}) (d\vec{r}) = -\frac{e}{mc} \int \Psi_n^{o*} e^{-i\vec{k}\vec{r}} (\vec{a}\vec{p}) \Psi_m^o (d\vec{r}) \quad (50.28)$$

keçid matrisa elementi, Ψ_m^o və Ψ_n^o – atomun uyğun stasionar hallarının dalğa funksiyaları və ya \check{H}^o operatorunun məxsusi funksiyalarıdır. $\vec{a} = a\vec{a}_o$ və

$$J_{nm} = \int \Psi_n^o(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{p} \Psi_m^o(\vec{r}) (d\vec{r}) \quad (50.29)$$

işarələrini qəbul etsək, (50.28) ifadəsini

$$V_{mn}^o = -\frac{ea}{mc} (\vec{a}_o \vec{J}_{nm}) \quad (50.30)$$

kimi yazmaq olar, burada \vec{a}^o – vahid vektordur. Optikada işıq dalğasının (şüasının) polyarlaşma istiqaməti $\vec{\mathcal{E}}$ elektrik intensivlik vektorunun istiqaməti ilə təyin olunur. (50.12)-dən $\vec{\mathcal{E}}$ -nin istiqaməti \vec{A} vektor potensialın istiqaməti üzərinə düşdüyündən \vec{a}^o vektoru şüalanmanın polyarlaşma istiqamətini təyin edən vahid vektor olur. a -dalğanın amplitudunun mütləq qiymətidir.

(50.30)-u (50.27)-də yazsaq, m - halından n - halına keçid ehtimalı

$$W_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{e^2 a^2}{m^2 c^2} \left| \vec{a}^o \vec{J}_{mn} \right|^2 \delta(\omega_{mn} - \omega). \quad (50.31)$$

Şüalanmanın intensivliyini xarakterizə edən a^2 -ni

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} [\vec{\mathcal{E}} \vec{H}] \quad (50.32)$$

Umov–Poyntinq vektorunun köməyiylə qiymətləndirmək olar. Bildiyimiz kimi, Umov–Poyntinq vektoru mənbəyi əhatə edən sferanın vahid səthindən vahid zamanda keçən şüalanma enerjisi selidir. (50.12) və (50.26) ifadələrindən $\vec{\mathcal{E}}$ və \vec{H} intensivlik vektorlarının həqiqi hissəsi üçün

$$\vec{\mathcal{E}} = \frac{\omega}{c} a \vec{a}^o \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}), \quad \vec{H} = a [\vec{a}^o \vec{k}] \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r})$$

$\vec{\mathcal{E}}$ və \vec{H} -in bu qiymətini (50.32)-də yazıb, alınan ifadədən zamana (rəqsin T perioduna) görə orta qiymət götürsək, şüalanın enerji selinin mütləq qiyməti üçün

$$S = \frac{\omega k a^2}{8\pi} = \frac{\omega^2 a^2}{8\pi c} \quad (50.33)$$

alınar (burada $k = \frac{\omega}{c}$). S-i, vahid zamanda vahid səthdən keçən işıq selini, şüalanmanın spektral sıxlığı $\rho(\omega, T)$ ilə də ifadə etmək olar

$$S = \frac{\omega^2 a^2}{8\pi c} = \rho(\omega)c, \quad (50.34)$$

burada c –ışıq sürətidir. (50.34)-dən

$$a^2 = \frac{8\pi c^2}{\omega^2} \rho(\omega).$$

Bunu (50.31)-də yazsaq,

$$W_{mn} = \frac{16\pi^2 e^2}{\hbar^2 m^2 \omega^2} \rho(\omega) \left| \bar{a}^o \bar{J}_{nm} \right|^2 \delta(\omega - \omega_{mn}). \quad (50.35)$$

Burada $\delta(\omega - \omega_{mn})$ funksiyanın iştirakı şüalanan işığın ω tezliyinin atomun $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ keçid tezliyinə bərabər olduğunu göstərir.

Qeyd edək ki, şüalanmanın atom sistemi tərəfindən udulma ehtimalı üçün də eynilə bu cür ifadə alınır, orada yalnız m ilə n indekslərinin yerini dəyişmək lazımdır.

Şüalanan və ya udulan işıq dalğalarının λ dalğa uzunluğu atomun ölçülərindən kifayət qədər böyük olan hallarda (50.29) ilə verilmiş \bar{J}_{nm} matrisa elementini hesablamaq olar. Məsələn, görünən işıq üçün $k = \frac{2\pi}{\lambda} \sim 10^5 \text{ sm}^{-1}$, atomun ölçüsü isə $r \sim 10^{-8} \text{ sm}$ olduğundan $kr \sim 10^{-3}$ tərtibində kəmiyyət olur. Deməli, belə hallarda $e^{-i\vec{k}\vec{r}}$ vuruğunu $i\vec{k}\vec{r}$ -in üstlərinə görə sıraya ayırmaq,

$$e^{-i\vec{k}\vec{r}} = 1 - i\vec{k}\vec{r} + \frac{1}{2!} (i\vec{k}\vec{r})^2 + \dots$$

və sıranın birinci iki həddi ilə kifayətlənmək olar:

$$\bar{J}_{nm} = \int \Psi_n^{o*}(\vec{r}) \bar{p} \Psi_m^o(\vec{r}) (d\vec{r}) - i \int \Psi_n^{o*}(\vec{r}) \bar{p} \Psi_m^o(\vec{r}) (d\vec{r}) = p_{nm} + i((\vec{k}\vec{r})\bar{p})_{nm}. \quad (50.36)$$

\vec{p}_{nm} -impuls operatorunun matrisa elementidir, $((\vec{k}\vec{r})\vec{p})_{nm}$ matrisa elementini isə

$$((\vec{k}\vec{r})\vec{p})_{nm} = m((\vec{k}\vec{r})\frac{d\vec{r}}{dt})_{nm} = \frac{m}{2} \frac{d}{dt} ((\vec{k}\vec{r})\vec{r})_{nm} - \frac{m}{2} \left(\left[\vec{k} \left[\vec{r} \frac{d\vec{r}}{dt} \right] \right] \right)_{nm} \quad (50.37)$$

kimi ifadə etmək olar. İxtiyari operator üçün matrisa şəklində yazılmış

$$\vec{L}_{nm} = \left(\frac{\partial \vec{L}}{\partial t} \right)_{nm} + \frac{i}{\hbar} [\vec{H}_o \vec{L}]_{nm}$$

hərəkət tənliyinin köməyiylə (burada \vec{H}_o operatoru (50.21) ilə verilmişdir)

$$p_{nm} = m(\dot{\vec{r}})_{nm} = m \left(\frac{d\vec{r}}{dt} \right)_{nm} \quad \text{və} \quad \frac{d}{dt} ((\vec{k}\vec{r})\vec{r})_{nm} \quad \text{matrisa elementləri üçün uyğun}$$

olaraq

$$p_{nm} = im\omega_{nm}\vec{r}_{nm}, \quad \frac{d}{dt} ((\vec{k}\vec{r})\vec{r})_{nm} = i\omega_{nm}((\vec{k}\vec{r})r)_{nm}$$

ifadələri alınır. Beləliklə

$$e\vec{J}_{nm} = i\omega_{nm}m\vec{e}\vec{r}_{nm} - \frac{m\omega_{nm}}{2} e((\vec{k}\vec{r})\vec{r})_{nm} + \frac{ie}{2} \left(\left[\vec{k} [\vec{r}\vec{p}] \right] \right)_{nm} \quad (50.38)$$

olur. Bu vektorun proyeksiyaları üçün

$$(eJ_{\alpha})_{nm} = im\omega_{nm}e(r_{\alpha})_{nm} - \frac{m\omega_{nm}}{2} e((\vec{k}\vec{r})r_{\alpha})_{nm} + \frac{ie}{2} \left(\left[\vec{k} [\vec{r}\vec{p}] \right]_{\alpha} \right)_{nm} \quad (50.39)$$

(burada $\alpha=1,2,3$). Klassik fizikada $e\vec{r} = \vec{d}$ - sistemin dipol momentini,

$\vec{M} = -\frac{e}{2mc} [\vec{r}\vec{p}] = -\frac{e}{2mc} \vec{L}$ - maqnit momentini ($\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$ - hərəkət miqdarı

momenti) və $Q_{\beta\alpha} = \frac{e^2}{2} r_{\beta} r_{\alpha}$ isə kvadrupol momentini (tenzoru) olduğunu

nəzərə alsaq,

$$(eJ_{\alpha})_{nm} = im\omega_{nm}(d_{\alpha})_{nm} - im\omega_{nm}([\vec{k}^{\circ} \vec{M}]_{\alpha})_{nm} - m\omega_{nm}(k_{\beta}^{\circ} Q_{\beta\alpha})_{nm} \quad (50.40)$$

olar (burada $\vec{k}^\circ = \frac{\vec{k}}{|k|}$).

(50.40) bərabərliyində birinci həd atomun dipol şüalanmasını, ikinci həd maqnit dipol şüalanmasını və üçüncü həd isə kvadrupol şüalanmasını təsvir edir.

Atomun dipol şüalanması üzərində dayanaq, yəni (50.40) ifadəsində birinci hədlə məhdudlaşaq, onda

$$e\vec{J}_{nm} = im\omega_{mn}e\vec{r}_{nm} \quad (50.41)$$

olar. Bu zaman (50.35) ifadəsini $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ tezliyinin şüalanması üçün Eynşteyn əmsalı ilə ifadə etmək olar:

$$W_{nm} = \frac{4\pi}{\hbar^2} \rho(\omega_{nm}) |\vec{a}^\circ \vec{d}_{nm}|^2 = B_{nm} \rho(\omega_{nm}), \quad (50.42)$$

burada e -yükün Qauss vahidi $\frac{e}{\sqrt{4\pi}}$ ilə əvəz olunmuşdur.

Şüalanan dalğanın yayılma istiqamətinin $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ cisim bucağı daxilində olma ehtimalı isə

$$dW_{nm} = W_{nm} d\Omega = \rho(\omega_{nm}) B_{nm} d\Omega \quad (50.43)$$

və ya

$$W_{nm} = \rho(\omega_{nm}) \int B_{nm} d\Omega \quad (50.43')$$

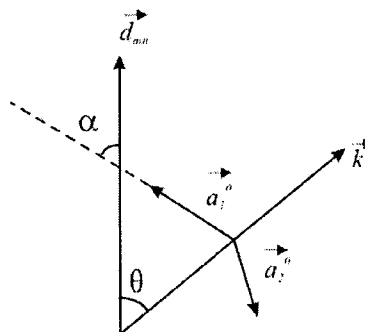
olar. (50.42)-dən alınır ki, məcburi şüalanmanın Eynşteyn əmsalı

$$B_{nm} = \frac{4\pi}{\hbar^2} |\vec{a}^\circ \vec{d}_{nm}|^2 \quad (50.44)$$

olur. Atomun elektrik (dipol) momenti ilə şüalanmanın polyarlaşma istiqamətini göstərən \vec{a}° vektoru arasındakı bucağı α ilə işarə etsək (şəkil 26),

$$B_{nm} = \frac{4\pi}{\hbar^2} |d_{nm}|^2 \cos^2 \alpha. \quad (50.45)$$

Şüalanma sahəsi eninə sahə olduğundan \vec{a}^o vektoru şüanın yayılma istiqaməti \vec{k} -ya perpendikulyar olmalıdır. Yəqin ki, iki polyarlaşma istiqamətindən biri (\vec{d}_{nm}, \vec{k}) müstəvisində \vec{k} vektoruna perpendikulyar: $\vec{a}^o = \vec{a}_1^o$, ikincisi isə həmin müstəvinin özünə perpendikulyar $\vec{a}^o = \vec{a}_2^o$ olar (şəkil 26).



$$\vec{a}^o = \vec{a}_1^o \text{ olanda } \alpha = \frac{\pi}{2} - \theta$$

Şəkil 26. Şüalanmanın ixtiyari \vec{a}_1 və \vec{a}_2 polyarlaşma istiqamətlərinin seçilməsi.

və

$$\cos \alpha = \cos \left(\frac{\pi}{2} - \theta \right) = \sin \theta$$

$$B_{nm}^{(1)} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |d_{nm}|^2 \sin^2 \theta, \quad (50.46)$$

$\vec{a}^o = \vec{a}_2^o$ olanda isə $\alpha = \frac{\pi}{2}$ olduğundan

$$B_{nm}^{(2)} = 0$$

olur. Deməli, atomun şüalandırdığı işığın polyarlaşma istiqamətini təyin edən \vec{E} elektrik intensivlik vektoru dipol şüalanması zamanı (\vec{d}_{nm}, \vec{k}) müstəvisində yerləşir.

Məcburi və spontan şüalanmaları xarakterizə edən, B_{nm} və A_{nm} əmsallarını əlaqələndirən (50.10) münasibətinin köməyiylə $d\Omega$ cisim bucağı altında baş verən spontan şüalanmanın ehtimalını da tapmaq olar. (50.10)-a əsasən

$$dW_{nm}^{(sp)} = A_{nm} d\Omega = \frac{\hbar \omega_{mn}^3}{8\pi^2 c^3} B_{nm} d\Omega \quad (50.48)$$

$\vec{a}^o = \vec{a}_1^o$ olanda (50.44)-ə görə

$$dW_{mn}^{(1)sp} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3} |d_{nm}|^2 \sin^2 \theta d\Omega \quad (50.49)$$

və $\vec{a}^o = \vec{a}_2^o$ olanda isə

$$dW^{(2)sp} = 0 \quad (50.50)$$

olar.

E_m səviyyəsindən E_n səviyyəsinə keçid zamanı spontan şüalanmanın tam ehtimalı

$$W_{mn}^{sp} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3} |d_{nm}|^2 \int_0^\pi \sin^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

və $\cos \theta = x$ qəbul etsək,

$$W_{mn}^{sp} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3} |d_{nm}|^2 2\pi \int_{-1}^1 (1-x^2) dx = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3} |d_{nm}|^2 \quad (50.51)$$

olar. Atomar sistemdə ω_{mn} tezliyinin tam şüalanma ehtimalı isə

$$W_{mn}^{sp} = A_{nn} = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3} |d_{nm}|^2 \quad (50.52)$$

kimi ifadə olunur.

c) İkinci kvantlanma metodu

Biz indiyə qədər atom və atom sistemlərinə enerji, impuls və hərəkət miqdarı momenti diskret dəyişən kvant mexaniki sistem, elektromaqnit sahəsinə isə klassik mənbəyin yaratdığı klassik sahə kimi baxmışıq. Atom sistemləri bir kvant halından digərinə keçdikdə şüalandırdığı və ya udduğu elektromaqnit sahəsi ilə cərəyan ətrafında yaranan elektromaqnit sahəsinin tezlik spektrləri, yəqin ki, eyni xarakterli olmur. Birinci halda elektromaqnit sahəsinin spektri diskret quruluşa (mənbəyin kvant keçidlərinə uyğun), ikinci halda isə kəsilməz quruluşa malik olur. Başqa sözlə, birinci spektr kvant, ikinci spektr isə klassik xarakter daşıyır. Kvant mənbələrin buraxdığı (udduğu) elektromaqnit sahəsinə klassik sahə kimi baxdıqda onların iştirakı ilə baş verən fiziki hadisələri təsvir etmək üçün indiyə kimi istifadə etdiyimiz tədqiq metodu yaramır. Belə məsələlərin həllində, yəqin ki, kvant

sistemi halının dəyişməsinin sahə mənbəyinə təsirini nəzərə almaq və elektromaqnit sahəsinə kvant sistemi kimi baxmaq lazım gəlir.

Mikrosistemlərin müşahidə olunan xassələrini tam izah etmək üçün Nyutonun korpuskulyar təsvirindən De-Broyl–Şredingerin dalğa təsvirinə keçməli olduq və göstərdik ki, mikrosistemlər korpuskul dalğa dualizminə malikdir. Elementar zərrəciklərin və atomar sistemlərin dalğa xassələrinə malik olması baxımından aparılan tədqiqatlar (Şredinger nəzəriyyəsi) göstərdi ki, atomar sistemlərin və məhdud fəzada sərbəst hərəkət edən zərrəciklərin enerjisi, impulsu və digər dinamik kəmiyyətləri diskret qiymətlər alır, yəni onların hərəkəti kvantlanır. Bu kvantlanmaya *birinci kvantlanma* deyilir.

Bildiyimiz kimi dalğa-zərrəcik dualizmi hər zərrəciyə uyğun sahə, hər sahəyə uyğun zərrəcik qarşı qoyur. Lakin zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsirə onlara uyğun de-Broyl dalğaları sahəsi ilə təsiri daşıyan sahə arasındakı qarşılıqlı təsir kimi baxdıqda, təbiətdə təsadüf olunan fiziki hadisələrin tam nəzəriyyəsini qurmaq (spontan şüalanmanın nəzəriyyəsi kimi) ya mümkün olmur, ya da məsələnin həlli bir sıra riyazi çətinliklərə və fiziki anlaşılmazlıqlara gətirir.

Buna görə də sahələr arasındakı qarşılıqlı təsiri onlara uyğun zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsirlə əvəz etmək zəruriyyəti ortaya çıxır. Zərrəciklərin qarşılıqlı təsirini iki kürenin toqquşması baxımından təhlil etdikdə, fiziki hadisələrin hesablanması və analizi xeyli asanlaşır və onların tam dəqiq nəzəriyyəsini qurmağa imkan verir.

Sahənin ona uyğun eyni zərrəciklər sistemi ilə əvəz olunması metodu *ikinci kvantlanma* adlanır. Bu metod vasitəsi ilə, təbiətdən asılı olmayaraq, istənilən sahəni uyğun eyni zərrəciklər sistemi, o cümlədən de-Broyl dalğaları sahəsini (belə sahələr spinor sahələr də adlanır) fermionlar, elektromaqnit sahəsini isə fotonlar sistemi ilə əvəz etmək mümkün olur.

Burada spinor sahələrin kvantlanmasında alınan antikommutativ münasibətləri çıxarmaqla kifayətlənib, elektromaqnit sahəsinin kvantlanması üzərində müfəssəl dayanacağıq.

İkinci kvantlanma metodunda sərbəst sahəyə uyğun dalğa tənliyinin həlli olan dalğa funksiyaları, yəni sahə vektoru (spinor sahələrdə $\Psi(\vec{r}, t)$) funksiya, elektromaqnit sahəsində isə $\vec{A}(\vec{r}, t)$ – vektor potensialı) sistemin hal vektoruna təsir edən və onun halının dəyişməsinə səbəb olan operator qəbul olunur. Sahə vektoru operatorunun mahiyyətini aydınlaşdırmaq və onun hal vektoruna təsir qanununu tapmaq işini, ümumiliyi pozmadan, elektromaqnit sahəsi üçün görmək, alınan nəticələri digər sahələr üçün ümumiləşdirmək olar. Bu məqsədlə əvvəlcə (50.20)-də $\vec{a}(\vec{k})$ (eləcə də $\vec{a}^*(\vec{k})$) amplitudunu

$$\bar{a}(\vec{k}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} \sum_{\lambda} \bar{a}^{\sigma\lambda}(\vec{k}) C(\vec{k}, \lambda) \quad (50.53)$$

ifadəsi ilə əvəz edək, burada $\bar{a}^{\sigma\lambda}(\vec{k})$ –şüalanmanın polyarlaşma istiqamətini təyin edən vahid vektor ($\lambda=1,2$), $C(\vec{k}, \lambda) - \bar{A}(\vec{r}, t)$ -vektor potensialın operator xassələrini özündə əks etdirən vuruqdur. Bu halda (50.20) ifadəsi

$$\bar{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}} \left\{ \bar{a}^{\sigma\lambda} C(\vec{k}, \lambda) e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} + a^{\sigma\lambda} C^*(\vec{k}, \lambda) e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}} \right\}. \quad (50.54)$$

$\bar{A}(\vec{r}, t)$ operatoru kvant mexanikasının operator hərəkət tənliyini ödəməlidir. O, aşkar şəkildə zamandan asılı olduğu üçün operator hərəkət tənliyi Heyzenberq təsvirində yazılar (bax § 25):

$$\frac{\partial \bar{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\bar{H}\bar{A}] = \frac{i}{\hbar} (\bar{H}\bar{A} - \bar{A}\bar{H}). \quad (50.55)$$

Burada

$$\bar{H} = \frac{1}{8\pi} \int (\bar{\mathcal{E}}^2 + H^2) (d\vec{r}) = \frac{1}{8\pi} \int \left\{ \left(-\frac{1}{c} \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} \right)^2 + \left(\nabla \bar{A} \right)^2 \right\} (d\vec{r}) \quad (50.56)$$

elektromaqnit sahəsinin Hamilton operatorudur.

Elektrik sahəsinin

$$\bar{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \bar{A}}{\partial t} = -i \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} (a^{\sigma\lambda} C_{k\lambda} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} - \bar{a}^{\sigma\lambda} C_{k\lambda}^* e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}}) \quad (50.57)$$

və maqnit sahəsinin

$$\bar{H} = [\nabla \bar{A}] = i \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} \left\{ [\vec{k} \bar{a}^{\sigma\lambda}] C_{k\lambda} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} - [\vec{k} \bar{a}^{\sigma\lambda}]^* C_{k\lambda}^* e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}} \right\} \quad (50.58)$$

intensiv vektorların ifadələrini (50.56)-da yazıb, sahənin

$$(\vec{k}\vec{a}^{o\lambda}) = (\vec{k}\vec{a}^{o*\lambda}) = 0$$

eninə şərtini nəzərə alsaq (və burada $C(k, \lambda) = C_{k\lambda}$ kimi işarə olunur)

$$\frac{1}{V} \int e^{i(\vec{k} \pm \vec{k}')\vec{r}} (d\vec{r}) = \delta_{\vec{k}, \pm \vec{k}'}, \quad (50.59)$$

və δ -simvolunun xassəsinə əsasən \vec{k}' üzrə cəmi götürsək, \tilde{H} üçün

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \lambda} \hbar \omega (C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ + C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda}) \quad (50.60)$$

ifadəsi alınır. Hesablamaları sadələşdirmək məqsədi ilə elektromaqnit sahəsinə klassik sahə kimi baxmağı davam etdirək. Dalğanın amplitudunu təyin edən $C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ kəmiyyətlərinə adi ədəd kimi baxaq. Onda onlar bir-birilə kommutasiya edər. Digər tərəfdən, ümumiliyi pozmadan, mülahizələri (50.20)-dəki cəmin ixtiyarı bir həddin əsasında qurmaq olar; yəni

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \sum_{k', \lambda'} \hbar \omega' C_{k'\lambda'}^+ C_{k'\lambda'} \\ \tilde{A} &\sim C_{k\lambda} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} \end{aligned}$$

götürmək olar. \tilde{H} və \tilde{A} -nın bu ifadələrini (50.55)-də yazıb, hər tərəfi $e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}}$ ixtisar etsək,

$$-\omega C_{k\lambda} = \sum_{k', \lambda'} \omega' (C_{k'\lambda'}^+ C_{k'\lambda'} C_{k\lambda} - C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ C_{k'\lambda'}). \quad (50.61)$$

Göstərmək olar ki, (50.61) tənliyinin iki həlli var. Onları almaq üçün cəmin altındakı ifadəyə $C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}$ həddini əlavə edib, çıxmaq:

$$\begin{aligned} -\omega C_{k\lambda} &= \sum_{k', \lambda'} \omega' (C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} \mp C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} \pm \\ &\pm C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} - C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ C_{k'\lambda'}). \end{aligned} \quad (50.62)$$

Bu axırıncı ifadəni aşağıdakı kimi iki cür qruplaşdırmaq olar:

$$-\omega C_{k\lambda} = \sum_{k'\lambda'} \omega' \left\{ C_{k'\lambda'}^+ (C_{k'\lambda} C_{k\lambda} + C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}) - (C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} + C_{k'\lambda'} C_{k\lambda}) C_{k'\lambda'} \right\} \quad (50.62')$$

(50.62') tənliyi

$$\begin{aligned} C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ - C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} &= \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ C_{k'\lambda'} C_{k\lambda} - C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} &= 0 \end{aligned} \quad (50.63)$$

və ya

$$\begin{aligned} C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ + C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} &= \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} + C_{k'\lambda'} C_{k\lambda} &= 0 \end{aligned} \quad (50.64)$$

şərtləri daxilində eynilik kimi ödənilir.

(50.20)-də \vec{A} -ni $C_{k\lambda}^+ e^{i\alpha\lambda - i\bar{k}r}$ ilə mütənəsib götürmüş olsaydıq

$$\begin{aligned} C_{k'\lambda'} C_{k\lambda}^+ - C_{k\lambda}^+ C_{k'\lambda'} &= \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} - C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ &= 0 \end{aligned} \quad (50.63')$$

və ya

$$\begin{aligned} C_{k'\lambda'} C_{k\lambda}^+ + C_{k\lambda}^+ C_{k'\lambda'} &= \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} + C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ &= 0 \end{aligned} \quad (50.64)$$

alardıq. Beləliklə, $C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ kəmiyyətləri aşağıdakı kommutativ

$$\begin{aligned} C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ - C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} &= \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} - C_{k'\lambda'} C_{k\lambda} &= 0 \\ C_{k\lambda}^+ C_{k'\lambda'} - C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda}^+ &= 0 \end{aligned} \quad (50.65)$$

və antikommutativ

$$\begin{aligned} C_{k\lambda} C_{k'\lambda'}^+ + C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda} &= \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ C_{k\lambda} C_{k'\lambda'} + C_{k'\lambda'} C_{k\lambda} &= 0 \\ C_{k\lambda}^+ C_{k'\lambda'} + C_{k'\lambda'}^+ C_{k\lambda}^+ &= 0 \end{aligned} \quad (50.66)$$

münasibətləri ödəyir.

(50.65) və (50.66) münasibətləri $C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ kəmiyyətlərinin adi ədəd yox, operatorlar olduğunu göstərir. İndiyə qədər tanış olduğumuz enerji, impuls, hərəkət miqdarı momenti və başqa fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorların təsir qanunları bizə məlumdur. Onların sistemin hal vektoruna (dalğa funksiyasına) təsiri uyğun kəmiyyətlərin dəyişməsi nəticəsində sistemin halının dəyişməsinə gətirir. Halın belə dəyişmələri zamanı sistemdə zərrəciklərin sayı sabit qalır. Lakin yəqin ki, sistemdə zərrəciklərin sayının dəyişməsi də onun halını dəyişdirə bilər. Atom sistemləri tərəfindən fotonların buraxılıb, udulması, zərrəciklərin bir-birinə çevrilməsi (məsələn, elektron-pozitron cütü enerjisinin qiymətindən asılı olaraq fotonlara, başqa növ fermionlara, barionlara, adronlara və i.a. çevrilə bilər) proseslərində qarşılıqlı təsir nəticəsində zərrəciklərin sayı dəyişir, bir növ zərrəciklər yox olur, digər növ zərrəciklər yaranır.

Biz indiyə qədər bu cür prosesləri öyrənməmişik və öyrənə də bilməzdik, çünki bizim əlimizdə zərrəciklərin sayının dəyişməsinə təsvir edən nəzəriyyə yox idi.

Belə hadisələri təsvir etmək üçün zərrəciklərin sayının dəyişməsinə gətirən prosesləri təsvir edən nəzəriyyə qurmaq, kvant mexanikasına bu dəyişməni icra edən operator daxil etmək lazımdır.

Asanlıqla göstərmək olar ki, (50.65) və (50.66) yerdəyişmə münasibətlərini ödəyən $C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ operatorları bu növ operatorlardır.

Kvant-mexaniki sistemin halının dəyişməsinə təsvir edən hal vektoru, koordinat və zamandan başqa zərrəciklərin sayından da asılı ola bilər:

$$\Psi = \Psi(x, y, z, t, N), \quad (50.67)$$

burada N –sistemdəki zərrəciklərin sayıdır. Zərrəciklərin sayının bu və ya başqa səbəbdən dəyişməsi fəzanın ixtiyari nöqtəsində istənilən zaman baş verə bilər, yəni N zaman və koordinatların funksiyası ola bilməz, ona görə də Ψ hal vektorunu həmişə $\Psi(x, y, z, t)$ və $\Phi(N)$ funksiyalarının hasili kimi götürmək olar:

$$\Psi = \Psi(x, y, z, t) \Phi(N). \quad (50.68)$$

Digər tərəfdən, $C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ operatorlarının $\Phi(N)$ -ə təsiri yalnız (\vec{k}, λ) indeksləri ilə təyin olunan haldakı zərrəciklərin sayının dəyişməsinə gətirdiyindən və müxtəlif hallarda sayın dəyişməsi bir-birindən asılı olmadığından

$$\Phi(N) = \Phi(N_{k\lambda}, N_{k'\lambda'}, \dots, N_{k''\lambda''}) = \Phi(N_{k\lambda}) \Phi(N_{k'\lambda'}) \dots \Phi(N_{k''\lambda''}) \quad (50.69)$$

kimi yazıla bilər.

Qeyd edək ki, (50.65) yerdəyişmə münasibətləri spini \hbar -in tam mi-sillərinə (0, 1, 2, ...) bərabər olan zərrəciklərə (bozonlara) uyğun sahənin kvantlanması xarakterizə edir və Boze-Eynşteyn statistikasına gətirir. (50.66) münasibətləri isə spini yarım tam ($1/2 \cdot \hbar$, $3/2 \cdot \hbar$, $5/2 \cdot \hbar$, ...) olan zərrəciklərə uyğun sahənin kvantlanması xarakterizə edir və Fer-mi-Dirak statistikasına gətirir.

(50.65)-dən görünür ki, yalnız eyni bir impulsa (\vec{k}) və polyarlaşmaya (λ) uyğun operatorlar bir-birilə kommutasiya etmir:

$$C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ - C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} = 1, \quad (50.70)$$

yəni biri digərinə nəzərən operator olur. Müxtəlif indekslərə uyğun opera-torlar isə bir-birinə nəzərən özlərini adi ədədlər kimi aparır.

$C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ operatorların fiziki mahiyyətini və təsir qanununu müəyyən etmək üçün $\tilde{N}_{k\lambda} = C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda}$ operatorunun $N_{k\lambda}$ məxsusi qiymətinə uyğun normalanmış məxsusi funksiyasını $\Phi(N_{k\lambda})$ ilə işarə edək:

$$\tilde{N}_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}) = C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}) = N_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}). \quad (50.71)$$

Bu bərabərliyi soldan $\Phi^+(N_{k\lambda})$ funksiyasına vurandan sonra, zərrəciklər sayı fəzası üzrə inteqrallayıb, $\Phi(N_{k\lambda})$ üçün

$$(\Phi(N_{k\lambda}), \Phi(N_{k\lambda})) = 1 \quad (50.72)$$

normalanma şərtini nəzərə alsaq,

$$N_{k\lambda} = (\Phi(N_{k\lambda}), \tilde{N}_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda})) = (\Phi(N_{k\lambda}), C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda})) \quad (50.73)$$

alınar. Hər istənilən operatora ermit qoşma operator qarşı qoyula bilər - teoreminə əsasən (50.73)-dən

$$N_{k\lambda} = (C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}), C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda})) = (C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda}), C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda})), \quad (50.74)$$

yəni $\tilde{N}_{k\lambda}$ operatorunun məxsusi qiymətləri həmişə müsbətdir nəticəsinə gəlirik.

Göstərək ki, $\Phi' = C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda})$ və $\Phi'' = C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda})$ funksiyaları da $\tilde{N}_{k\lambda}$ operatorunun məxsusi funksiyalarıdır. Doğrudan da, (50.69)-dan

$$\begin{aligned}
\tilde{N}_{k\lambda} \Phi' &= C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}) = C_{k\lambda} (C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} - 1) \Phi(N_{k\lambda}) = \\
&= (N_{k\lambda} - 1) C_{k\lambda} \Phi = (N_{k\lambda} - 1) \Phi', \\
\tilde{N}_{k\lambda} \Phi'' &= C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}) = C_{k\lambda}^+ (1 + C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda}) \Phi(N_{k\lambda}) = \\
&= (1 + N_{k\lambda}) C_{k\lambda}^+ \Phi = (1 + N_{k\lambda}) \Phi''.
\end{aligned}$$

Beləliklə, Φ' və Φ'' funksiyaları $\tilde{N}_{k\lambda}$ operatorunun, uyğun olaraq, $N_{k\lambda}-1$ və $N_{k\lambda}+1$ məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyaları olur. Başqa sözlə, $C_{k\lambda}$ -nin $\Phi(N_{k\lambda})$ -ya təsiri $N_{k\lambda}-1$ məxsusi qiymətinə uyğun $\Phi(N_{k\lambda}-1)$ məxsusi funksiyasına, $C_{k\lambda}^+$ -nin $\Phi(N_{k\lambda})$ -ya təsiri isə $N_{k\lambda}+1$ məxsusi qiymətinə uyğun $\Phi(N_{k\lambda}+1)$ məxsusi funksiyasına gətirir

$$\begin{aligned}
C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}) &= a_1 \Phi(N_{k\lambda}-1), \\
C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda}) &= a_2 \Phi(N_{k\lambda}+1).
\end{aligned} \tag{50.75}$$

Buradan çıxır ki, $C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ operatorların yalnız

$$\begin{aligned}
(\Phi(N_{k\lambda}-1), C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda})) &= \langle N_{k\lambda} - 1 | C_{k\lambda} | N_{k\lambda} \rangle = a_1, \\
(\Phi(N_{k\lambda}+1), C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda})) &= \langle N_{k\lambda} + 1 | C_{k\lambda}^+ | N_{k\lambda} \rangle = a_2
\end{aligned} \tag{50.76}$$

matrisa elementləri sıfırdan fərqli olur. $C_{k\lambda}$ operatorunun $\Phi(N_{k\lambda})$ -ya təsiri $\Phi(N_{k\lambda})$ halını $\Phi(N_{k\lambda}-1)$ halına, $C_{k\lambda}^+$ -nin təsiri isə $\Phi(N_{k\lambda})$ halını $\Phi(N_{k\lambda}+1)$ halına çevirir: $C_{k\lambda}$ operatoru baxılan halda fotonların sayının bir vahid azalmasına, $C_{k\lambda}^+$ operatoru isə bir vahid artmasına gətirir, yəni $C_{k\lambda}$ fotonun udulma, $C_{k\lambda}^+$ isə fotonun doğulma (yaratma) operatoru olur.

a_1 və a_2 sabitlərini tapmaq üçün (50.73)-ü

$$N_{k\lambda} = \langle N_{k\lambda} | C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} | N_{k\lambda} \rangle = \sum_{N_{k'\lambda'}} \langle N_{k\lambda} | C_{k\lambda}^+ | N_{k'\lambda'} \rangle \langle N_{k'\lambda'} | C_{k\lambda} | N_{k\lambda} \rangle$$

şəklində yazmaq. $N_{k'\lambda'}$ üzrə cəm aparanda yalnız (50.76) ilə verilmiş matrisa elementlərinin sıfırdan fərqli qaldığını və ermit qoşma operatorun yazılma qaydasını nəzərə alsaq,

$$N_{k\lambda} = \langle N_{k\lambda} - 1 | C_{k\lambda} | N_{k\lambda} \rangle \langle N_{k\lambda} - 1 | C_{k\lambda} | N_{k\lambda} \rangle = |\langle N_{k\lambda} - 1 | C_{k\lambda} | N_{k\lambda} \rangle|^2, \quad (50.77)$$

$$N_{k\lambda} + 1 = \langle N_{k\lambda} + 1 | C_{k\lambda}^+ | N_{k\lambda} \rangle \langle N_{k\lambda} + 1 | C_{k\lambda}^+ | N_{k\lambda} \rangle = |\langle N_{k\lambda} + 1 | C_{k\lambda}^+ | N_{k\lambda} \rangle|^2$$

alınar. Buradan isə $C_{k\lambda}$ və $C_{k\lambda}^+$ -nın təsir qanunları üçün (50.77)-in birincisindən

$$C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda}} \Phi(N_{k\lambda} - 1), \quad (50.78.1)$$

ikincisindən isə

$$C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda} + 1} \Phi(N_{k\lambda} + 1) \quad (50.78.2)$$

alınır.

(50.78.1) bərabərliyinə $C_{k\lambda}^+$ və (50.78.2)-yə isə $C_{k\lambda}$ operatorları ilə sol-dan təsir etsək,

$$C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda}} C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda} - 1) = N_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda}), \quad (50.79)$$

$$C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ \Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda} + 1} C_{k\lambda} \Phi(N_{k\lambda} + 1) = (N_{k\lambda} + 1) \Phi(N_{k\lambda})$$

alınır. Bu axırıncılar isə (50.70) münasibətinə gətirir. Doğrudan da (50.79)-da aşağıdakı bərabərlikdən yuxarıdakını tərəf-tərəfə çıxsaq,

$$(C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ - C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda}) \Phi(N_{k\lambda}) = (N_{k\lambda} + 1 - N_{k\lambda}) \Phi(N_{k\lambda}) = 1 \cdot \Phi(N_{k\lambda})$$

və ya operator tənliyi şəklində

$$C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ - C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} = 1$$

alınar.

İndi də şüalanma sahəsinin (50.60) ilə verilmiş \check{H} Hamilton operatorunun $\Phi(N_{k\lambda})$ -ə təsirini hesablayaq. (50.79) münasibətlərindən görünür ki, $\Phi(N_{k\lambda})$ funksiyası \check{H} -in da məxsusi funksiyasıdır. Onun məxsusi qiyməti sahənin E enerjisi olduğundan,

$$\check{H} \Phi(N) = E \Phi(N) = \frac{1}{2} \sum_{k\lambda} \hbar \omega (C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ + C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda}) \Phi(N_{k\lambda}, N_{k'\lambda'}, \dots)$$

(50.79)-a əsasən

$$E = \sum_{k\lambda} \hbar\omega(N_{k\lambda} + \frac{1}{2}) \quad (50.80)$$

alınır. Bu ifadə xətti ossilyatorun enerjisini xatırladır, burada cəm fotonlar sisteminin (sahənin) müxtəlif (\vec{k}, λ) halları üzrə gedir, $N_{k\lambda}$ isə (\vec{k}, λ) halındakı fotonların sayını göstərir.

Sahənin hallarının hamısında fotonların sayının sıfıra bərabər olduğunu ($N_{k\lambda} = 0$, k, λ -nın bütün mümkün olan qiymətlərində) fərz etsək, şüalanma sahəsinin enerjisi

$$E_0 = \sum_{k\lambda} \frac{\hbar\omega}{2} \rightarrow \infty$$

olur. Sahənin bu halına elektromaqnit sahəsinin **vakuumu** deyilir. Klassik nəzəriyyəyə görə sahənin belə halı xarici elektromaqnit sahəsinin baxılan fəzada mövcud olmamasına uyğundur, yəni bu halda $\vec{E} = 0, \vec{H} = 0$ olur. Onda (50.56)-ya əsasən onun enerjisi də sıfır olmalı idi. Lakin kvant mexanikasında vakuumin enerjisi sıfırdan fərqli, özü də kifayət qədər böyük sabit qiymətə bərabərdir.

Bildiyimiz kimi hər hansı kəmiyyətin qiyməti hesablananda uyğun additiv sabit başlanğıc (sıfır) kimi götürülə bilər. Bu səbəbdən sahə nəzəriyyə-sində vakuun halının enerjisi E_0 sıfıra bərabər götürülür ($E_0 = 0$). Lakin bu heç də sahənin bu halının atom sistemlərinə təsirinin sıfıra bərabər olması demək deyildir. Bu təsir bir çox fiziki hadisələrdə özünü büruzə verir. Doğrudan da, bizim bu paragrafda öyrənəcəyimiz atomun spontan şüalanması şüalanma sahəsinin vakuun halının atomdakı elektrona təsiri nəticəsidir. Bu təsir elektronun yuxarı haldan aşağı hala keçidini təmin edir. Bundan başqa, bu təsir atomun $2s_{1/2}$ halının $2p_{1/2}$ halına nisbətən yuxarı sürüşməsinə (Lemb sürüşməsi, bax §80) səbəb olur və i.a.

d) Şüalanmanın kvant nəzəriyyəsi

(50.78) münasibətlərinə əsasən deyə bilərik ki, şüalanma sahəsinin (50.54) ilə verilmiş vektor potensialı zərrəciklər sayından asılı olan hal vektoruna təsir edən operatorudur. Onun $C_{k\lambda}$ ilə mütənəşib olan birinci həddin təsiri baxılan halda bir fotonun udulmasına, $C_{k\lambda}^+$ ilə mütənəşib olan ikinci həddinin təsiri isə bir fotonun həmin halda yaranmasına gətirir.

Atomar sistemlərin şüalanma (şüaudma) prosesinin ehtimalını tapmaq

üçün qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən $\vec{V}(t)$ funksiyasını, uyğunluq prinsipi-nə əsasən, operator hesab edilir. Onun ifadəsindəki \vec{A} -vektor potensialına (yəni fotonun dalğa funksiyasına) uyğun (50.54) ilə verilmiş $\vec{\tilde{A}}$ operatoru-nu atomar sistemin şüalanmasına gətirən ikinci (birinci) həddi ilə əvəz etmək lazımdır. Onda (50.25) ifadəsi

$$V(t) = -\frac{e}{mc}(\vec{A}\vec{p}) = -\frac{e}{mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}}\sum_{\vec{k}\lambda}\frac{1}{\sqrt{\omega}}e^{i\vec{a}\cdot\vec{k}-i\vec{k}\vec{r}}(\vec{a}^{*\circ\lambda}\vec{p})C_{\vec{k}\lambda}^+ \quad (50.25)$$

Şüalanma (şüaudma) prosesi ehtimalının (50.27) ifadəsi öz şəklini sax-layır. Lakin (50.28)-dəki V_{nm}^o əvəzinə

$$\tilde{V}_{nm}^{o'} = -\frac{e}{mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}}\sum_{\vec{k}\lambda}\frac{1}{\sqrt{\omega}}\int\Psi_n^{o+}(\vec{r})e^{-i\vec{k}\vec{r}}(\vec{a}^{*\circ\lambda}\vec{p})\Psi_m^o(\vec{r})(d\vec{r})C_{\vec{k}\lambda}^+$$

yaxud

$$\tilde{V}_{nm}^o = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3}}\sum_{\vec{k}\lambda}\frac{1}{\sqrt{\omega}}(\vec{a}^{*\circ\lambda}\vec{J}_{nm})C_{\vec{k}\lambda}^+ \quad (50.81)$$

yazmaq lazımdır. Burada \vec{J}_{nm} ifadəsi (50.29) ilə verilmişdir. Buna ermit qoşma operator

$$\tilde{V}_{nm}^{*o+} = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3}}\sum_{\vec{k}'\lambda'}\frac{1}{\sqrt{\omega'}}(\vec{a}^{o\lambda'}\vec{J}_{mn}^*)C_{\vec{k}'\lambda'} \quad (50.82)$$

yazılır. (50.81) və (50.82)-dən

$$|\tilde{V}_{nm}^{o+}|^2 = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2 L^3}\sum_{\vec{k}\vec{k}'\lambda\lambda'}\frac{1}{\sqrt{\omega\omega'}}(\vec{a}^{o\lambda'}\vec{J}_{mn}^*)(\vec{a}^{*\circ\lambda}\vec{J}_{nm})C_{\vec{k}'\lambda'}C_{\vec{k}\lambda}^+ \quad (50.83)$$

(50.65) yerdəyişmə münasibətlərindən və (50.79)-un ikinci bərabər-liyindən

$$C_{\vec{k}'\lambda'}C_{\vec{k}\lambda}^+\Phi(N_{\vec{k}\lambda}) = \sqrt{N_{\vec{k}'\lambda'}+1}\sqrt{N_{\vec{k}\lambda}+1}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}\Phi(N_{\vec{k}\lambda})$$

olur, burada $N_{\vec{k}\lambda} = N(\vec{k}, \lambda)$ -atom-şüalanma sisteminin $|m\rangle$ başlanğıc halın-da impulsu $\hbar\vec{k}$ və polyarlaşma işarəsi λ ($\lambda = \pm 1$) olan fotonların sayıdır.

Bunu (50.83)-də yazıb, δ -simvolları vasitəsilə \bar{k}' və λ' üzrə olan cəmləri götürsək,

$$|V_{nm}^{o1}|^2 = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2 L^3} \sum_{\bar{k}\lambda} \frac{1}{\omega} (N_{k\lambda} + 1) (\bar{a}^{o\lambda} \bar{J}_{mn}^+) (\bar{a}^{o*\lambda} \bar{J}_{nm}) \quad (50.84)$$

alınar.

Sistemin hərəkəti sonlu $V=L^3$ həcmi ilə məhdudlaşırsa, onun enerjisi, impulsu və başqa dinamik kəmiyyətləri diskret spektrə malik olur. L^3 həcmində olan şüalanma sahəsinin dalğa ədədinin (impulsun) k_x, k_y, k_z komponentləri (50.19)-a görə $k_i = \frac{2\pi}{L} n_i (i=1,2,3)$ kimi diskret qiymətlər alır. Onların ən kiçik dəyişmələri $\Delta k_i = \frac{2\pi}{L} \Delta n_i$ və impuls fəzasının elementar həcmi

$$\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \frac{(2\pi)^3}{L^3} \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3$$

olar. k_i -nin ən kiçik dəyişməsi n_i tam ədədinin ardıcıl iki qiymətinin fərqi ilə təyin olunduğundan $\Delta n_i = 1 (i=1,2,3)$ və

$$1 = \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \quad (50.85)$$

olar.

(50.84)-də cəmin altında vahidi onun (50.85)-də verilmiş ifadəsi ilə əvəz edib, L -i sonsuzluğa yaxınlaşdırmaq şərtilə limitə keçək. Bu zaman Δk_i -lər sonsuz kiçik qiymətə yaxınlaşdığından

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^3} \sum_{\bar{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int (d\bar{k}) \quad (50.86)$$

və

$$|V_{nm}^{o1}|^2 = \frac{\hbar e^2}{4\pi^2 m^2} \sum_{\lambda} \frac{(d\bar{k})}{\omega} (N_{k\lambda} + 1) (\bar{a}^{o\lambda} \bar{J}_{mn}^+) (\bar{a}^{o*\lambda} \bar{J}_{nm}) \quad (50.87)$$

olur.

Bunu (50.27)-də yerinə yazsaq, şüalanmanın ehtimalı üçün

$$W_{mn} = \frac{e^2}{2\pi\hbar m^2} \sum_{\lambda} \int \frac{d\vec{k}}{\omega} (N_{k\lambda} + 1) (\vec{a}^{o\lambda} \vec{J}_{mn}^+) (\vec{a}^{o+\lambda} \vec{J}_{nm}) \delta(\omega_{mn} - \omega) \quad (50.88)$$

alınır.

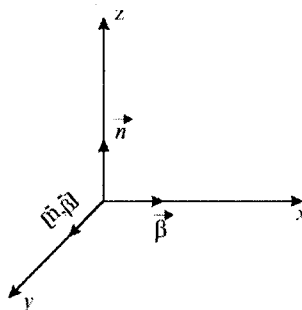
Sferik koordinat sistemində

$$d\vec{k} = k^2 dk d\Omega = \frac{\omega^2 d\omega}{c^3} d\Omega \quad (50.89)$$

olduğunu nəzərə alıb (burada $\omega = ck$, $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ –elementar cisim bucağıdır), xarici şüalanma sahəsinin izotrop, yəni fotonların $N(\vec{k}, \lambda)$ sayının θ və φ bucaqlarından asılı olmadığını fərz etsək, (50.88)-dəki ω üzrə inteqralı δ -funksiya vasitəsilə götürmək olar:

$$W_{mn} = \frac{e^2 \omega_{mn}}{2\pi\hbar m^2 c^3} \sum_{\lambda} (N(\omega, \lambda) + 1) \int d\Omega (\vec{a}^{o\lambda} \vec{J}_{mn}^+) (\vec{a}^{+o\lambda} \vec{J}_{nm}) \quad (50.90)$$

İndi də (50.90)-da λ üzrə, yəni şüalanma sahəsinin polyarlaşma istiqamətləri üzrə cəm götürək. Bildiyimiz kimi, şüalanma sahəsi eninə sahədir. $\vec{a}^{o\lambda}$ polyarlaşma vektoru həmişə şüanın (fotonun) yayılma istiqaməti \vec{k} -ya perpendikulyardır. Dekart koordinat sistemində z oxunu \vec{k} vektoru istiqamətində $\left(\vec{n} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \right)$ yönəltsək, $\vec{a}^{o\lambda}$ -vektoru ya x və ya da y oxu üzrə yönəlmiş olar. Bu baxımdan



Şəkil 27 a.

polyarlaşma istiqamətləri üzrə cəm* ixtiyarı \vec{b} və \vec{c} vektorları üçün

* (50.91) bərabərliyini isbat etmək üçün şüalanmanın dairəvi polyarlaşmış olduğunu qəbul edək. Onda $\vec{a}^{o\lambda}$ vektoru

$$\vec{a}^{o\lambda} = \frac{1}{2} (\vec{\beta} + i\lambda [\vec{n}\vec{\beta}]) \quad (50.92)$$

kimi götürülə bilər, burada $\vec{\beta} - x$ (və ya y) oxu, $[\vec{n}\vec{\beta}] - y$ (və ya x) oxu üzrə xətti polyarlaşmanı xarakterizə edən vahid vektor (şəkil 27 a), $\lambda \pm 1$ – sağ və sol dairəvi polyarlaşmanı təyin edən vuruq, $i = \sqrt{-1}$ -dir. Bu halda adi vektor hesabı ilə (50.91) bərabərliyini çıxarmaq olar.

$$\sum_{\lambda} (\vec{a}^{\omega\lambda} \vec{b})(\vec{a}^{+\omega\lambda} \vec{c}) = (\vec{b}\vec{c}) - (\vec{n}\vec{b})(\vec{n}\vec{c}) \quad (50.91)$$

nəticəsinə gətirir, burada $\vec{b} = \vec{J}_{nm}^+$ və $\vec{c} = \vec{J}_{nm}$ götürsək,

$$W_{nm} = \frac{e^2 \omega_{nm}}{2\pi\hbar m^2 c^3} (N(\omega) + 1) \int d\Omega \left\{ (\vec{J}_{nm}^+ \vec{J}_{nm}) - (\vec{n}\vec{J}_{nm}^+)(\vec{n}\vec{J}_{nm}) \right\} \quad (50.93)$$

olur, burada $N(\omega)$ -enerjisi $\hbar \omega$ və iki polyarlaşma istiqaməti üzrə orta qiymət götürülmüş fotonların sayıdır.

(50.93) ifadəsinin (50.42) ilə müqayisəsindən görünür ki, fotonun şüalanma ehtimalı başlanğıc halda şüalanma sahəsi (fotonlar) olmadıqda ($N(\omega) \sim \rho(\omega) = 0$) belə sıfırdan fərqlidir. Belə şüalanma *spontan şüalanma* adlanır, şüalanma ehtimalının $N(\omega)$ ilə mütənasib olan hissəsi isə *məcburi şüalanma* adlanır. Spontan şüalanmanın ehtimalı (50.93)-dən

$$W_{nm}^{cn} = A_{nm} = \frac{e^2 \omega_{nm}}{2\pi\hbar m^2 c^3} \int d\Omega \left\{ (\vec{J}_{nm}^+ \vec{J}_{nm}) - (\vec{n}\vec{J}_{nm}^+)(\vec{n}\vec{J}_{nm}) \right\}, \quad (50.94)$$

məcburi şüalanmanın ehtimalı isə

$$W_{nm}^{mac} = \frac{e^2 \omega_{nm}}{2\pi\hbar m^2 c^3} N(\omega) \int d\Omega \left\{ (\vec{J}_{nm}^+ \vec{J}_{nm}^+) - (\vec{n}\vec{J}_{nm}^+)(\vec{n}\vec{J}_{nm}^+) \right\}. \quad (50.95)$$

W_{nm}^{mac} -ni şüalanmanın spektral sıxlığı $\rho(\omega)$ ilə ifadə etmək üçün $\rho(\omega)$ ilə $N(\omega)$ arasındakı əlaqəni müəyyən edək.

Xarici şüalanma sahəsinin izotrop olduğunu fərz edib, onun iki polyarlaşma istiqamətinə malik olduğunu nəzərə alsaq, şüalanma sahəsinin enerji sıxlığı

$$u = 8\pi \int \rho(\omega) d\omega \quad (50.96)$$

kimi yazıla bilər. Digər tərəfdən şüalanmanın u enerji sıxlığını fotonların $N(\omega)$ sayı ilə də ifadə etmək olar. (50.86) və (50.89)-a əsasən

$$u = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar \omega 2N(\omega)}{L^3} = \frac{2\hbar}{8\pi^3} \int d\vec{k} \omega N(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int \omega^3 N(\omega) d\omega \quad (50.97)$$

olar. (50.96) və (50.97)-nin müqayisəsindən

$$\frac{N(\omega)}{\rho(\omega)} = \frac{8\pi^3 c^3}{\hbar \omega^3} \quad (50.98)$$

alınar. $N(\omega)$ -ni buradan (50.95)-də əvəz etsək,

$$W_{nm}^{mac} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2 m^2 \omega_{mn}^2} \rho(\omega) \int d\Omega \left\{ (\vec{J}_{mn}^+ \vec{J}_{nm}) - (\vec{n} \vec{J}_{mn}^+) (\vec{n} \vec{J}_{nm}) \right\} = \rho(\omega_{mn}) B_{nm} \quad (50.99)$$

Qeyd edək ki, atom sistemlərinin şüalandırma prosesi, yəni aşağı n səviyyəsindən yuxarı m səviyyəsinə keçidlərin ehtimalı üçün də eynilə belə ifadə alınır, yalnız fərq ondadır ki, alınmış ifadədə n -in yerində m , və m -in yerində n indeksi durur:

$$W_{nm}^{mac} = \rho(\omega_{nm}) B_{mn}. \quad (50.99')$$

Buradan məcburi keçidlərin Eynşteyn əmsalı üçün aşağıdakı ümumi ifadə alınır:

$$B_{nm} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2 m^2 \omega_{mn}^2} \int d\Omega \left\{ (\vec{J}_{mn}^+ \vec{J}_{nm}) - (\vec{n} \vec{J}_{mn}^+) (\vec{n} \vec{J}_{nm}) \right\}. \quad (50.100)$$

(50.93), (50.94) və (50.99) ifadələrindən yuxarı m səviyyəsindən aşağı n səviyyəsinə keçidin tam ehtimalı

$$W_{nm} = A_{nm} + \rho(\omega_{nm}) B_{mn}. \quad (50.100.a)$$

Asanlıqla göstərmək olar ki, şüalanmanın yarım klassik nəzəriyyəsi bölməsində baxılan xüsusi halda B_{nm} -in (50.100) ilə verilmiş ifadəsi dipol şüalanması üçün alınmış (50.44) ifadəsi üzərinə düşür. Qeyd etmək lazımdır ki, B_{nm} -i bilavasitə hesablamağa ehtiyac yoxdur, beləki spontan şüalanmanın A_{nm} ehtimalı hesablandıqdan sonra, onlar arasındakı (50.10) münasibətdən istifadə edərək B_{nm} -i tapmaq olar.

Xarici şüalanma sahəsinin təsiri altında yuxarı E_m səviyyəsindən aşağı E_n səviyyəsinə keçən N_m atomların vahid zamanda şüalandırdığı enerji

$$I_{nm} = \hbar \omega_{nm} N_m W_{nm}^{mac} = \hbar \omega_{nm} N_m \rho(\omega_{nm}) B_{mn}, \quad (50.100. b)$$

aşağı E_n səviyyəsindən yuxarı E_m səviyyəsinə keçən N_n atomların udduğu

enerji isə

$$I_{mn} = \hbar \omega_{mn} N_n W_{mn}^{m\alpha c} = -\hbar \omega_{mn} N_n \rho(\omega_{mn}) B_{mn} \quad (50.100.v)$$

bərabər olar; burada N_m və N_n –atomlar sisteminin (maddənin) uyğun səviyyələrinin *tutulma dərəcəsi* adlanır.

B_{mn} və B_{nm} əmsallarının bir-birinə bərabər olduğunu nəzərə alsaq, maddənin vahid zamanda udub buraxdığı enerjinin ümumi miqdarı

$$I = I_{nm} + I_{mn} = \hbar \omega_{mn} \rho(\omega_{mn}) B_{nm} (N_m - N_n). \quad (50.100.q)$$

Atomlar sistemi ilə şüalanma termodinamik tarazlıqda olduqda, sistemin T temperaturu səviyyələrin tutulma dərəcəsini, yəni maddədə atomların enerjiyə görə paylanması tam təyin edir:

$$N_m = ae^{-\frac{E_m}{kT}}, \quad N_n = ae^{-\frac{E_n}{kT}},$$

burada k –Bolsman sabitidir. $E_m > E_n$ olduğundan, termodinamik tarazlıq halında həmişə $N_n > N_m$ və buna görə də $I < 0$ olur, yəni şüalanma ilə termodinamik tarazlıqda olan atomlar sisteminin xarici sahənin təsiri altında udduğu enerji şüalandırdığı enerjiden çox olur. Buna görə də maddədən keçən şüalanmanın intensivliyi həmişə azalır.

Lakin bu və ya başqa yolla yuxarı səviyyələrin tutulma dərəcəsini aşağı səviyyələrin tutulma dərəcəsinə nisbətən böyütmək olarsa, yəni $N_m > N_n$ şərti ödənilsə, termodinamik tarazlıq pozular və maddədən keçmiş şüalanmanın intensivliyi güclənmiş olar ($I > 0$). Kvant generatorlarının (lazer, mazer) iş prinsipi buna əsaslanır.

e) Dipol, maqnit-dipol və kvadrupol spontan şüalanması

Spontan şüalanma ehtimalının (50.94) ifadəsinə daxil olan $\vec{J}_{nm} = \int \Psi_n^{+o}(\vec{r}) e^{-ik\vec{r}} \vec{p} \Psi_m^o(\vec{r}) (d\vec{r})$ integralı üçün $kr \sim 10^{-3}$ yaxınlaşmasında

$$e\vec{J}_{nm} = im\omega_{nm} e\vec{r}_{nm} + \frac{ie}{2} (\vec{k} [\vec{r}\vec{p}])_{nm} - \frac{m\omega_{nm}}{2} e(\vec{r}(\vec{k}\vec{r}))_{nm} \quad (50.39)$$

ifadəsi alınmışdı. Ehtimalı sistemin $\vec{d} = -e\vec{r}$ elektrik dipol momentinin \vec{d}_{nm} matrisası ilə təyin olunan şüalanma dipol və ya $E1$ şüalanması, orbital mo-

mentin $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$ və ya $\vec{M} = -\frac{e}{2mc}\vec{L}$ maqnit momentinin \vec{M}_{nm} matrisası ilə təyin olunan şüalanma maqnit-dipol və ya $M1$ -şüalanması, nəhayət $(\vec{r}(\vec{k}\vec{r})) \approx k_i r_i r_j \approx k_i Q_{ij}$ kvadrupol momentinin $(Q_{ij})_{nm}$ matrisa elementi ilə təyin olunan şüalanma isə kvadrupol və ya $E2$ şüalanması adlanır.

Dipol keçidlərin ehtimalını tapmaq üçün (50.94)-də \vec{J}_{nm} inteqralı (50.39)-dan birinci həddə bərabər götürülür:

$$W_{nm}^{sp} = A_{nm}^{dip} = \frac{e^2 \omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3} \left\{ (\vec{r}_{mn}^+ \vec{r}_{nm}) - (\vec{n}\vec{r}_{mn})^+ (\vec{n}\vec{r}_{nm}) \right\} d\Omega \quad (50.101)$$

$\vec{d} = -e\vec{r}$ dipol momenti ilə şüalanmanın yayılma $\vec{n} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$ istiqaməti arasındakı bucaqları θ, φ ilə işarə edib (şəkil 27), bucaqlar üzrə inteqral aparsaq,

$$A_{nm}^{dip} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{mn}^3 e^2}{\hbar c^3} |\vec{r}_{nm}|^2 = \frac{4}{3} \frac{\omega_{mn}^3}{\hbar c^3} |\vec{d}_{nm}|^2 \quad (50.102)$$

olar. Bu isə şüalanmanın yarım klassik nəzəriyyəsində alınmış (50.52) ifadəsi üzərinə düşür.

\vec{d}_{nm} matrisa elementi sıfır bərabər olarsa, elektrik dipol keçidləri qadağan olunmuş olur. Bu zaman ola bilsin ki, atom sistemləri maqnit-dipol və kvadrupol keçidləri hesabına şüa buraxıb, udsun. Bu keçidlərin ehtimalını hesablamaq üçün J_{nm} -in (50.39) ifadəsində ikinci və üçüncü hədləri götürmək lazımdır.

Maqnit-dipol keçidlərin ehtimalını hesablayaq. Bunun üçün əvvəlcə (50.39)-un üçüncü həddində $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$ orbital hərəkət miqdarı momenti operatorunu

$$\vec{M} = -\frac{e}{2mc}\vec{L}$$

münasibətindən uyğun \vec{M} -maqnit momenti operatoru ilə əvəz edək:

$$eJ_{nm}^{maq} = i \frac{e}{2} \left(\vec{k}\vec{L} \right)_{nm} = \frac{ie\omega_{mn}}{2c} \left[\vec{n}\vec{L} \right]_{nm} = i\omega_{mn} m \left(\vec{n}\vec{M} \right)_{nm}.$$

Digər tərəfdən $(\vec{n}, \vec{J}^{maq}) = 0$ və vektor hesabının $[\vec{a}\vec{b}][\vec{c}\vec{d}] = (\vec{a}\vec{c})(\vec{b}\vec{d}) - (\vec{a}\vec{d})(\vec{b}\vec{c})$ bərabərliyini nəzərə alsaq,

$$A_{nm}^{maq} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3} \int d\Omega \left\{ \vec{M}_{nm}^+ \vec{M}_{nm} - (\vec{n} \vec{M}_{nm}^+) (\vec{n} \vec{M}_{nm}) \right\},$$

buradan (50.102)-nin alınmasına oxşar olaraq

$$A_{nm}^{maq} = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3} |\vec{M}_{nm}|^2 \quad (50.103)$$

olar. Beləliklə, maqnit-dipol şüalanması elektrik-dipol şüalanmasından dipol momentinin maqnit momenti ilə əvəz edilməsi ilə fərqlənir.

İndi də kvadrupol keçidlərin ehtimalını hesablayaq. Bunun üçün (50.94)-də $e\vec{J}_{nm}$ inteqralı əvəzində (50.39)-dan kvadrupol şüalanmaya gətirən ikinci həddi yazaq:

$$A_{nm}^{kv} = \frac{e^2 \omega_{mn}^5}{8\pi\hbar c^5} \int d\Omega \left\{ (\vec{r}(\vec{n}\vec{r}))_{nm}^+ (\vec{r}(\vec{n}\vec{r}))_{nm} - ((\vec{n}\vec{r})(\vec{n}\vec{r}))_{nm}^+ ((\vec{r}\vec{n})(\vec{r}\vec{n}))_{nm} \right\} \quad (50.104)$$

Bucaqlar üzrə inteqrallandıqdan sonra*

$$A_{nm}^{kv} = \frac{e^2 \omega_{mn}^5}{30\hbar c^3} \left\{ 3(x_i x_j)_{nm}^+ (x_i x_j)_{nm} - (r^2)_{nm}^+ (r^2)_{nm} \right\}. \quad (50.105)$$

Bunu atom sisteminin kvadrupol momenti (tenzoru)

$$Q_{ij} = e(3x_i x_j - r^2 \delta_{ij})$$

ilə ifadə etsək,

$$A_{nm}^{kv} = \frac{\omega_{mn}^5}{90\hbar c^5} (Q_{ij})_{nm}^+ (Q_{ij})_{nm} \quad (50.106)$$

alınar.

Nümunə üçün hidrogen atomunda $2p$ halından $1s$ halına dipol spontan

* Bax: [3], səh 164

keçidin ehtimalını hesablayaq. Bildiyimiz kimi hidrogen atomunun $1s$ əsas halı cırlaşmamış, $2p$ halı isə $n=2, l=1, m=-1,0,1$ kimi üç qat cırlaşmışdır. $1s$ halı Ψ_{100} , $2p$ halı isə $\Psi_{210}, \Psi_{211}, \Psi_{21-1}$, funksiyaları ilə təsvir olunur. (51.8) seçmə qaydalarına görə bu üç halın hər birindən Ψ_{100} halına keçid ola bilər. Lakin məsələni sadələşdirmək məqsədilə \vec{d} -vektorunun z oxu üzrə yönəlmiş halda $\Psi_{210} \rightarrow \Psi_{100}$ keçidin ehtimalını hesablayaq:

$$|d_z|_{21,10} = \int \Psi_{210}^+ d_z \Psi_{100} (d\vec{r}) = -e \int \Psi_{210}^+ z \Psi_{100} (d\vec{r}) = -e \int \Psi_{210}^+ r \cos \theta \Psi_{100} (d\vec{r}).$$

ifadəsində Ψ_{210} , və Ψ_{100} funksiyalarını (40.40)-dan ifadələri ilə əvəz etsək,

$$(d_z)_{21,10} = e \int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr \int Y_{10} \cos \theta Y_{00} d\Omega$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \text{ olduğundan, bucaqlara görə inteqral}$$

$$\int Y_{10} \cos \theta Y_{00} d\Omega = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

və

$$(d_z)_{21,10} = \frac{e}{\sqrt{3}} \int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr$$

alınar. Bunu (50.102)-də yazsaq,

$$A_{21,10}^{di} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{21}^3}{\hbar c^3} \frac{e^2}{3} \left| \int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr \right|^2$$

Radial $R_{10} = 2e^{-\frac{r}{a}}$ və $R_{21} = \frac{1}{\sqrt{6a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \frac{r}{2a}$ funksiyaların ifadələrini yuxarıdakı inteqralda yazıb, hissə-hissə inteqral aparsaq,

$$\int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr = \sqrt{\frac{2^{15}}{3^9}} a,$$

(burada $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ -dir) və

$$A_{21,10}^{di} = \frac{2^{17}}{3^{11}} \frac{\omega_{21}^3 \hbar^3}{m^2 c^3 e^2}$$

olar. Burada keçid tezliyini

$$\omega_{21} = \frac{E_{2p} - E_{1s}}{\hbar} = \frac{3}{8} \cdot \frac{me^4}{\hbar^3} \quad (50.107)$$

qiyməti ilə əvəz etsək, nəhayət

$$A_{21,10}^{di} = \left(\frac{2}{8}\right)^8 \alpha^3 \frac{mc^4}{\hbar^3} \quad (50.107')$$

alırıq. Beləliklə, Layman seriyasının birinci xəttinin intensivliyi (50.107) və (50.107')-dən

$$I_{21} = \hbar \omega_{21} A_{21,10}^{di} = \frac{2^5}{3^7} \hbar \alpha^3 \left(\frac{mc^4}{\hbar^3}\right)^2 \quad (50.107'')$$

olur.

§ 51. Dipol, maqnit-dipol və kvadrupol şüalanması üçün seçmə qaydaları

Mərkəzi sahədə hərəkət edən zərrəciyin dipol şüalanması üzərində dayanıq. Belə şüalanmaya misal olaraq hidrogen və hidrogenəbənzər atomların və ya bir optik elektronlu atomların dipol şüalanmasını göstərmək olar. Belə sistemlərin halı (bax:(40.40))

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) = R_{nl}(r)P_l^m(\cos \theta)e^{im\varphi} \quad (51.1)$$

funksiyası ilə təyin olunur. Atom sisteminin hər hansı həyəcanlanmış $m(n', l', m')$ halından $n(n, l, m)$ halına keçidin ehtimalını təyin edən dipol momentinin matrisa elementinin kvadratını

$$|\bar{d}_{mn}|^2 = |\bar{d}_{n'l'm';nlm}|^2 = e^2 (|x_{mn}|^2 + |y_{mn}|^2 + |z_{mn}|^2) \quad (51.2)$$

kimi yazsaq, (50.102) və (50.105)-dən görünür ki, dipol keçidlərinin ehtimalı o vaxt sıfırdan fərqli qalar ki, x, y, z operatorlarına uyğun matrisa elementlərindən ən azı biri sıfıra bərabər olmasın. Hansı keçidlər üçün bu şərtin ödənildiyini yoxlayaq.

Elektronun atomdakı hərəkətinə və fotonun polyarlaşma xassəsinə uyğun olaraq x, y, z -ə uyğun matrisaları əvəzində $\xi = x + iy, \eta = x - iy$ və $\zeta = z - \bar{z}$ uyğun matrisaları hesablamaq daha əlverişlidir.

(50.39) və (50.101) ifadələrindən görünür ki, dipol, maqnitdipol və kvadrupol şüalanmalarının ehtimalı r radius-vektorun (yəni x, y, z və ya ξ, η, ζ koordinatlarının) matrisa elementlərinin müxtəlif dərəcələri ilə mütənəsbidir. § 42-də göstərdik ki, hidrogen, hidrogenə-bənzər və bir optik elektronlu atomlar halında n baş kvant ədədinin istənilən dəyişmələrində l -orbital və m -maqnit kvant ədədləri

$$\Delta l = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1 \quad (51.3)$$

kimi dəyişirsə (bax (42.12)), koordinat operatorlarının keçid matrisa elementləri sıfırdan fərqli qalır. Başqa sözlə, baxılan atom üçün (51.3) seçmə qaydaları ödənilirsə, o, bir stasionar haldan digərinə keçə bilər.

(50.38), (50.90) və (51.2) ifadələrindən bir nəticə olaraq çıxır ki, atomların baxılan keçidi onun şüalanması ilə nəticələnirsə, (51.3) seçmə qaydaları yalnız dipol şüalanması üçün doğrudur. Maqnit-dipol və kvadrupol şüalanmaları üçün başqa seçmə qaydaları alınır (bax: § 42).

(50.90) və (51.2) bərabərliklərindən alınır ki, $\Delta m = 0$ seçmə qaydası fotonun z oxu üzrə polyarlaşmasına, $\Delta m = \pm 1$ seçmə qaydası isə fotonun z oxuna perpendikulyar istiqamətdə polyarlaşmaya (x, y müstəvisində), yaxud da sağ və sol dairəvi polyarlaşmaya uygundur.

(51.3) seçmə qaydaları əslində atom-foton sisteminin hərəkət miqdarı momentinin saxlanma qanununu ifadə edir. l -in bir vahid dəyişməsi göstərir ki, dipol keçidləri zamanı buraxılan foton özü ilə vahidə bərabər hərəkət miqdarı momenti aparır. Atom sisteminə təsir edən şüalanma sahəsi (yəni fotonun $\vec{A}(\vec{r}, t)$ dalğa funksiyası) izotrop olduğundan, fotonun özü ilə apardığı momenti onun vahidə bərabər spin momenti ilə eyniləşdirilə bilər. Yuxarıda biz verilmiş impuls və polyarlaşmaya malik fotonların şüalanmasına baxdıq. İmpuls və hərəkət miqdarı momenti operatorları kommutasiya etmədiyindən belə fotonlar verilmiş impuls və polyarlaşma ilə eyni zamanda müəyyən hərəkət miqdarı momentinə malik ola bilməz. Lakin dalğa uzunluğu atom sisteminin ölçüsündən xeyli böyük olan fotonların şüa-

landığı hallarda $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ -in sırasında birinci hədlə kifayətlənilirsə, bununla biz verilmiş hərəkət miqdarı momentinə malik olan fotonları seçmiş oluruz.

(51.3) seçmə qaydaları cütlüyün saxlanma qanununun da ödənilməsini təmin edir. Doğrudan da, §15 göstərmişdik ki, sferik simmetrik sahədə hərəkət edən zərrəciyin mümkün olan hallarının cütlüyü $(-1)^l$ ilə təyin olunur.

$\vec{d} = -e\vec{r}$ operatoruna uyğun matrisanın $d_{n'l'm',nlm} = -e \int \Psi_{n'l'm'}^+ \vec{r} \Psi_{nlm} (d\vec{r})$ elementləri $l' = l \pm 1$ və ya $\Delta l = \pm 1$ -də sıfırdan fərqli olduğundan $\Psi_{n'l'm'}$ və Ψ_{nlm} funksiyaları müxtəlif cütlüyə malik olmalıdır. Bu zaman $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ güzgü əksi çevrilməsində inteqralaltı funksiya qiymət və işarəsini dəyişmir, bu çevrilməyə görə o invariant qalır, yəni sistemin cütlüyü saxlanır.

(51.3) seçmə qaydaları zərrəciyin spin halları nəzərə alınmadığı, yəni orbital hərəkətlə spin momenti arasında rabitə olmadığı hallarda doğrudur. Başqa sözlə, baxılan proseslərdə orbital və spin momentləri ayrılıqda saxlanılır. Spinlə orbital hərəkət arasında rabitə olduqda isə (spin-orbital qarşılıqlı təsir sıfır deyil) seçmə qaydaları orbital və spin momentlərinin vektor cəmi olan $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ tam momenti üçün yazılır, belə ki, bu, halda yalnız tam moment saxlanır.

Dipol şüalanmasında tam moment üçün seçmə qaydaları

$$\Delta j = 0, \pm 1, \Delta m_j = 0, \pm 1 \quad (51.4)$$

olur. Burada $j = l \pm \frac{1}{2}$ -köməkçi kvant ədədi ($J^2 = \hbar^2 j(j+1)$), $m_j = m \pm \frac{1}{2}$ – köməkçi maqnit kvant ədədidir. (51.4) -dən göründüyü kimi, burada $\Delta j = 0$, yəni tam momentin qiyməti eyni olan hallar arasında elektrik-dipol keçidləri qadağan olunmur, beləki sistemin hallarının cütlüyü tam momentlə yox, yalnız orbital momentlə əlaqədardır. Lakin atomun $j_1=0$ və $j_2=0$ olan iki halı arasındakı keçid isə qadağandır, belə keçiddə tam moment üçün saxlanma qanunu ödənilmir, çünki atom \rightarrow atom + foton sistemində tam moment vahid olur (fotonun spinini vahiddir).

M1 maqnit-dipol keçidlərin ehtimalı $\vec{M}_{nm} = \frac{e}{2mc} [\vec{r}\vec{p}]_{nm} = \frac{e}{2mc} \vec{L}_{nm}$ matrisa elementi ilə təyin olunur. Bu keçidlərdə də foton özü ilə vahidə bərabər moment aparır. Güzgü əksi çevrilməsində $[\vec{r}\vec{p}]$ vuruğu işarəsini dəyişmədiyindən inteqrala daxil olan $\Psi_{n'l'm'}$ və Ψ_{nlm} funksiyalarının hər ikisinin cütlüyü eyni olmalıdır. Bu səbəbdən maqnit-dipol keçidində buraxılan foton elektrik-dipol keçidində buraxılan fotona nəzərən əks cütlüyə malik olmalıdır (yəni, biri $\vec{A} = \vec{a} \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ funksiyası ilə təsvir olunursa, digəri

$\vec{A} = \vec{a} \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ funksiyası ilə təsvir olunmalıdır.

Bildiyimiz kimi, sferik simmetrik (mərkəzi) sahədə başlanğıc və son halın Ψ_m və Ψ_n -dalğa funksiyaları \tilde{L}_z operatorunun məxsusi funksiyalarıdır. Buna görə $\langle m | L_z | n \rangle = \langle n', l', m' | L_z | n l m \rangle$ matrisa elementi $m \neq n$ olanda sıfır olur, \tilde{L}_x və \tilde{L}_y operatorları isə yalnız maqnit kvant ədədini ± 1 qədər dəyişir (n, l kvant ədədlərini dəyişmir) (bax §35). Mərkəzi sahədə maqnit kvant ədədi m -in müxtəlif qiymətlərinə enerjinin eyni bir qiyməti uyğun gəldiyindən, m ilə fərqlənən hallar arasındakı keçidlər zamanı enerji nə buraxılır və nə də udulur.

Atom xarici maqnit sahəsinə salındıqda isə səviyyələrin enerjisi m maqnit kvant ədədindən asılı olur (bax: Zeyeman effekti). Belə səviyyələr arasındakı keçidlər zamanı isə enerji udulub buraxılır.

Beləliklə, $M1$ dipol şüalanması üçün seçmə qaydaları

$$\Delta l = 0, \Delta m = \pm 1 \quad (51.5)$$

olur.

Kvadrupol keçidləri üçün seçmə qaydaları (51.3) seçmə qaydaları əsasında tapıla bilər. Kvadrupol momenti matrisasının elementlərindən birini, məsələn $(xy)_{mn}$ -i götürək. $m(n', l', m')$ halından $n(n, l, m)$ halına keçidin matrisa elementi

$$\begin{aligned} \langle n | xy | m \rangle &= \langle n, l, m | xy | n', l', m' \rangle = \\ &= \langle n, l, m | x | n'' l'' m'' \rangle \langle n'' l'' m'' | y | n' l' m' \rangle \end{aligned} \quad (51.6)$$

olar. (51.3) görə

$$l'' = l' \pm 1, l'' = l \pm 1, m'' = m', m'' = m, m'' = m \pm 1, m'' = m' \pm 1 \quad (51.7)$$

bərabərlikləri ödənildikdə (51.6) sıfırdan fərqli qalır. Buradan

$$\Delta l = 0, \pm 2, \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (51.8)$$

seçmə qaydaları alınır, yəni $E2$ keçidi zamanı şüalanan foton iki vahid hərəkət miqdarı aparır.

51a. Messbauer effekti

1958-ci ildə gənc alman fiziki Rudolf Messbauer kristal qəfəsdə olan

nüvələrin buraxdığı γ şüalanmanın spektrində Γ təbii enə malik, yerini dəyişməmiş, yəni təpməyə məruz qalmamış spektr xətti müşahidə etmişdi. Qəfəsin temperaturu aşağı düşdükcə bu xəttin nisbi intensivliyi kəskin artırdı. Bir az sonra belə növ nüvələrin udulma spektrində də yuxarıdakına uyğun spektr xətti müşahidə olundu.

Bu faktlar əsasında nüvələrin γ şüalanmasının udulmasını tədqiq edən təcrübələrdə elə şərait yaratmaq mümkün olardı ki, γ şüaların maddələr tərəfindən udulması əsasən rezonans xarakter daşsın. Onda nüvələrin yaşama müddəti kifayət qədər böyük olan aşağıda yerləşmiş həyəcanlanmış səviyyələrə uyğun şüalanmada eni 2Γ -yə yaxın kəskin rezonans xətti müşahidə olunar.

Bu istiqamətdə aparılan tədqiqatlarda eni çox dar olan spektr xəttini almaq və ayırd etmə qabiliyyəti qeyri-adi şəkildə böyük olan detektor yaratmaq imkanı əldə edilmiş oldu.

Messbauerin məqalələri jurnallarda çıxan kimi dünyanın bir çox tədqiqat laboratoriyalarında «Messbauer effekti» adı altında γ -şüaların təpməsiz şüalanması və rezonans udulması hadisələrinin intensiv tədqiqi başlandı. Bir çox elementlərin izotoplarında bu effektin müşahidəsindən sonra nüvə fizikasında, kimyevi fizikada, nisbilik nəzəriyyəsində və fizikanın digər bölmələrində təsadüf olunan bir çox problemlərin həlli üçün onun tətbiqi başlandı.

Messbauer effektinin mahiyyəti aşağıdakıdan ibarətdir. Tutaq ki, kütləsi M olan nüvə E enerjili γ -kvant şüalandırır. Bu zaman nüvə $\vec{p} = -\frac{E}{c} \vec{n}$ -nə

bərabər təpmə impulsu alır (\vec{n} - γ -kvantın şüalanma istiqamətindəki vahid

vektordur). Bu zaman nüvə $E_T = \frac{p^2}{2M}$ və ya $E_T = \frac{E^2}{2Mc^2}$ qədər təpmə enerjisi alır.

Başlangıçda sükunətdə olan nüvənin buraxdığı γ -kvantın enerjisi $E_\gamma = E - E_T$ -yə bərabər olar. Belə nüvənin E enerjili γ -kvantı rezonans udması üçün axırıncının enerjisi həyəcanlanmış səviyyənin $E + E_T$ enerjisindən səviyyənin Γ təbii enindən çox fərqlənməməlidir. Beləliklə, başlangıçda sükunətdə olan sərbəst nüvələrin şüalanma və udulma spektr xəttləri arasındakı enerji fərqi $2E_T$ -yə bərabər olur. Bu fərq E -dən çox kiçik olsa da, o, həyəcanlanmış səviyyənin Γ təbii enindən xeyli böyükdür və γ -kvantın rezonans udulması mümkün deyildir. Məsələn, təcrübədə istifadə olunan Sn^{119} izotopun birinci həyəcanlanma səviyyəsinin enerjisi $23,8 \text{ keV}$, ona uyğun təpmə enerjisi $E_T \approx 0,0025 \text{ keV}$, səviyyənin təbii eni isə $\Gamma \approx 3 \cdot 10^{-8} \text{ eV}$ -dur. Buradan görünür ki, E_T enerjisi Γ -dən təxminən 10^5 dəfə böyükdür.

Messbauerə qədər nüvənin γ -kvantı şüalandırmasına uyğun xətt ilə γ -kvantı udmasına uyğun xətt arasındakı $2E_T$ enerji fərqi aradan götürmək üçün Dopler effekti yaradan qurğulardan istifadə edilirdi.

$2E_T$ -yə bərabər Dopler yerdəyişməsinə yaratmaq üçün γ -kvantı şüalandıran və onu udan nüvələrin nisbi xətti sürəti, təpmə impulsunun yuxarıdakı ifadəsindən, $v \approx \frac{E}{Mc}$ -yə bərabər olmalıdır. Məsələn, yuxarıda adını

çəkdiyimiz Sn^{119} izotopu üçün bu sürət təxminən $6 \cdot 10^3$ sm/san olmalıdır. Nisbi sürətin qiyməti böyük olduğundan qoyulan məqsəd üçün istifadə olunan belə metodlar o qədər də yararlı deyildi.

Messbauer Ir^{119} nüvəsinin enerjisi 129 keV olan həyəcanlanmış səviyyənin enini ölçmək üçün əvvəlkilərdən tam fərqli olan yeni metod təklif etdi. Bu metodda γ -kvantları şüalandıran və onları udan mənbələrin nüvələrinin təpməyə uğraması ortadan götürülür.

Messbauer göstərdi ki, γ -kvantları şüalandıran və udan nüvələr alçaq temperaturu kristalə yerləşdirildikdə γ -kvantlar buraxılıb udulduqda təpmə impulsu, əksər hallarda, bütöv kristalə verilir. Verilən enerji kristalın daxili enerjisinə nəzərən cüzi olduğundan, kristalda istilik rəqsləri həyəcanlanmır. Başqa sözlə, kristalın aldığı kinetik enerji buraxılan nüvənin həyəcanlanmış səviyyənin Γ enindən olduqca kiçik olur. Bu hadisə mütləq bərk cisimdən olan kiçik kürenin, kütləsi kifayət qədər böyük olan mütləq bərk divarla toqquşmasına oxşayır. Kürə hansı sürətlə divara dəyirsə, həmin sürətlə də geri sıçrayır, yəni toqquşmada enerji itkisi baş vermir.

Bunun nəticəsində γ -kvantları şüalandıran və udan nüvələrin spektrlərində uyğun spektr xəttlərinin, təpmə impulsu hesabına ortaya çıxma biləcək nisbi $2E_T$ sürüşməsi sifra bərabər olur və sükunətdəki kristalda olan nüvələrin buraxdığı γ -şüalar rezonans səpilir və ya digər sükunətdəki kristalda olan nüvələr tərəfindən rezonans udulur. Sonrakı tədqiqatlar göstərdi ki, otaq temperaturunda və hətta nisbətən daha yüksək temperaturalarda da Messbauer effekti müşahidə olunur.

Təpməsiz şüalanan və udulan γ -kvantlar kristalın şüalanma və udulma spektrlərində eni Γ -yə bərabər xəttlər verir. Hər iki halda xəttlər həyəcanlanmış səviyyənin $E = E_0$ -a uyğun nöqtəsində yerləşir (şəkil 28a, b-də şaquli qara xəttlər).

Messbauer effektinin kəşfindən sonra fizikanın bir çox sahələrində çox incə və böyük dəqiqlik tələb edən fiziki hadisələrin öyrənilməsinə imkan yarandı. Məsələn, Messbauer effekti, ilk dəfə, nüvələrin enerji səviyyələrinin ifrat incə quruluşunu böyük dəqiqliklə ölçməyə imkan verdi.

Məsələn 10^5 hers-li maqnit sahəsində nüvənin ifrat incə quruluş səviyyələri arasındakı fərq $\Delta E = 10^{-6} eB$ -dur. γ -kvantların enerjisi bir neçə on keV olduqda belə ifrat incə quruluşu ölçən cihazın ayırıcı qabiliyyəti 10^{-10} -dan böyük olmalıdır. Nüvə spektroskopiyasında bu dəqiqlik yalnız Messbauer effekti kəşf olunan sonra mümkün olmuşdu.

Nüvənin enerji səviyyələrinin ifrat incə quruluşu nüvənin maqnit və kvadrupol momentləri ilə atomun daxilindəki bağlı və kristaldakı sərbəst

elektronlar və kristalın daxili sahələri arasında meydana çıxan qarşılıqlı təsir nəticəsi olduğundan, təpməsiz rezonans udulma hadisəsi istifadə edilən təcrübi metodlar nüvənin həyəcanlanmış səviyyəsinə uyğun maqnit və kvadrupol momentlərinin qiymətini, nüvənin daxilindəki maqnit sahəsinin qiymət və istiqamətini təyin etməyə imkan verir.

Messbauer effektindən bərk cisimlər fizikasında, fiziki kimyada istifadəsi daha effektiv olmuşdur. Onun vasitəsilə kristalın istilik rəqslərinin spektri təyin edilmiş, ikinci növ faza keçidləri tədqiq edilmiş, metallar ifrat keçiricilik halına keçdikdə onun fonon və elektron spektrlərinin xassələrində baş vermiş dəyişikliklər öyrənilmiş, kimyəvi reaksiyaların kinetika tədqiq edilmişdir və i. a.

Messbauer effekti nisbətlik nəzəriyyəsində də öz tətbiqini tapmışdır. O, γ kvant qravitasiya potensialları müxtəlif olan iki nöqtə arasından keçdikdə, yer şəraitində, onun tezliyinin dəyişməsinə ölçməyə imkan vermişdir.

Bu effektin tətbiqləri olduqca genişdir. Qısa da olsa onların üzərində dayanmağa belə imkanımız yoxdur.

Biz burada effektin fiziki mahiyyətini və onun bəzi tətbiq sahələrini göstərməklə kifayətlənirik. Effektin nəzəriyyəsi və daha geniş şəkildə tətbiqi ilə maraqlanan şəxslər xüsusi ədəbiyyata müraciət edə bilərlər.

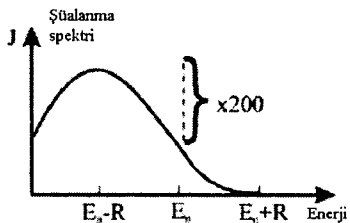
VII FƏSİL

SƏPİLMƏNİN KVANT NƏZƏRİYYƏSİ

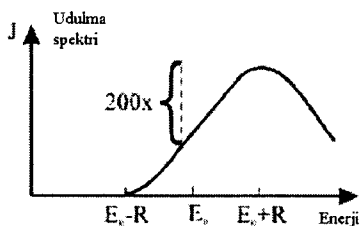
§52. Səpilmənin effektiv kəsiyi

Zərrəciyin hər hansı bir zərrəciklə qarşılıqlı təsir nəticəsində öz əvvəlki hərəkət istiqamətini dəyişməsi hadisəsinə səpilmə deyilir. Səpilmə nəzəriyyəsi bəzən toqquşma nəzəriyyəsi də adlanır, belə ki, klassik mexanikada zərrəciklərin öz əvvəlki hərəkət istiqamətini dəyişməsi, onların bir-birilə bilavasitə toqquşması nəticəsi kimi başa düşülür.

Səpilmə prosesinin zamana görə gedişi aşağıdakı kimi təsvir olunur:



a)



b)

Şəkil 28. a) Şüalanma spektri

b) Udulma spektri.

sonsuz uzaqlaşdırılmış (yəni $t \rightarrow -\infty$ -da) iki zərrəcik bir-birinə qarşı hərəkət edərək müəyyən $t=t_0$ anında qarşılıqlı təsirdə olur (yəni toqquşur) və müxtəlif istiqamətlərdə sonsuzluğa ($t \rightarrow +\infty$) gedir. §57–59-da baxacağımız fotonların atomlarla toqquşmasına həsr olunmuş hadisələr (dispersiya, fotoeffekt, Kompton effekt) bu baxımdan təhlil edilmişdir. Lakin bəzi hallarda səpilmə prosesinin zamanın gedişinə görə, yəni kvant keçidləri nəzəriyyəsi əsasında təhlilini stasionar təhlillə əvəz etmək əlverişli olur.

Səpilmə prosesinin zamana görə təsvirindən stasionar təsvirə keçmək üçün fərz olunur ki, sonsuzluqdan gələn zərrəciklər seli, səpilmə mərkəzi ilə qarşılıqlı təsirdə olaraq (toqquşaraq) səpilən selə çevrilir. Burada səpici mərkəzə düşən seldə zərrəciklərin sıxlığının kifayət qədər kiçik, səpilmə mərkəzləri arasındakı məsafənin kifayət qədər böyük olduğu qəbul olunur. Bu onun üçün lazımdır ki, düşən seldəki zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir nəzərə alınmasın (zərrəciklər biri digərindən asılı olmayaraq səpilsin) və hər biri yalnız bir səpici mərkəzdən səpilsin. Stasionar təsvirdə səpilmə məsələsində məqsəd, səpici sahə məlum olduqda, səpici mərkəzdən kifayət qədər uzaq məsafədə səpilən zərrəciklər selinin düşən zərrəciklər selinin funksiyası kimi tapmaqdan ibarətdir.

Səpilmə məsələsi aşağıdakı kimi qoyulur. Qarşı-qarşıya gələn iki zərrəciklər seli arasında qarşılıqlı təsir olmadıqda onlar hərəkət istiqamətini dəyişmədən öz hərəkətini davam etdirir. Qarşılıqlı təsir ortaya çıxdanda isə onlar qarşılıqlı səpilir. Səpilmə prosesində zərrəciklər enerjisini dəyişməyib, yalnız hərəkət istiqamətini dəyişdikdə belə səpilmə *elastik səpilmə*, hərəkət istiqamətindən başqa onların daxili halı (enerji və başqa fiziki xarakteristikaları) dəyişdikdə (zərrəciklər həyəcanlandıqda), yeni zərrəciklər yarandıqda və ya əvvəlkilər udulduqda belə səpilmə *qeyri-elastik səpilmə* adlanır.

§ 57 və 58-də göstərmişik ki, fiziki hadisə effektiv kəsiklə səciyyələnir. Səpilmə prosesi üçün onu belə də ifadə etmək olar: səpilmə prosesinin effektiv kəsiyi vahid zamanda θ, φ bucaqları istiqamətində götürülmüş $d\Omega$ cisim bucağı daxilində səpilən $dN(\theta, \varphi)$ zərrəciklər sayının səpici mərkəzə düşən zərrəciklərin seli sıxlığına nisbətində bərabərdir:

$$d\sigma = \frac{dN(\theta, \varphi)}{j_{dii}} . \quad (52.1)$$

$d\sigma$ –*diferensial effektiv kəsik* adlanır.

Səpici mərkəzdən xeyli uzaq ($r \rightarrow \infty$) məsafədə səpilən zərrəciklər seli sıxlığını j_{sap} ilə işarə etsək, $dN(\theta, \varphi)$ -ni j_{sap} ilə ifadə etmək olar:

$$dN(\theta, \varphi) = j_{sap} dS = j_{sap} r^2 d\Omega . \quad (52.2)$$

Burada $dS=r^2d\Omega$ – səpici mərkəzi r məsafədə qapayan S səthinin $d\Omega$ cisim bucağı altında görünən hissəsidir. (52.2)-ni (52.1)-də yazsaq,

$$d\sigma = \frac{j_{səp}}{j_{düş}} r^2 d\Omega . \quad (52.3)$$

Buradan görünür ki, effektiv kəsiyin ölçüsü (dimenzionu) səthin ölçüsü ilə eynidir və θ, φ bucaqlarından asılıdır.

Düşən zərrəciklərin sel sıxlığı təcrübədə əvvəlcədən məlum olduğundan ($j_{düş}=\text{const}$) hadisənin tam effektiv kəsiyi göstərilən kürənin səthi üzrə götürülmüş inteqrala bərabər olar:

$$\sigma = \frac{1}{j_{düş}} \oint \vec{j}_{səp}(r, \theta, \varphi) d\vec{S} . \quad (52.4)$$

İnteqral götürülən səthin səpici mərkəzdən kifayət qədər uzaqda yerləşdiyi (atom ölçüləri baxımından) qəbul olunduğundan, bu səthin hər bir nöqtəsindən keçən zərrəciyin radial istiqamətdə hərəkət etdiyi fərz olunur. Onda (52.4) bərabərliyi

$$\sigma = \frac{1}{j_{düş}} \oint j_{r,səp} dS_r \quad (52.5)$$

kimi yazılar.

§53. Səpilmə amplitudu

İki zərrəcikdən ibarət sistemin hərəkətini təsvir edərkən (§ 40) gördük ki, bu hərəkəti sistemin ətalət mərkəzinin sərbəst hərəkətinə ((40.8) tənliyi) və zərrəciklərdən birinin digərinə nəzərən nisbi hərəkətinə gətirmək olur. Nisbi hərəkəti təsvir edən Şredinger tənliyi (40.9)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi + V(r) \Psi = E \Psi \quad (53.1)$$

şəklindədir. Burada $V(r)$ – qarşılıqlı təsirin potensial enerjisi, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ –

sistemin gətirilmiş kütləsidir, \vec{r} – zərrəciklər arasındakı məsafədir.

Sonsuzluqdan gəlib $V(r)$ sahəsində səpilərək sonsuzluğa gedən zərrəciyin enerjisi, yəqin ki, sıfırdan böyük olmalıdır. Bu baxımdan (53.1) tənliyinə μ –kütləli zərrəciyin sükunətdə olan ikinci zərrəciyin yaratdığı $V(r)$ sahəsində hərəkətini təsvir edən tənlik kimi də baxmaq olar. Belə zərrəciyin $r \rightarrow \infty$ -da müşahidə olunma ehtimalının sıfırdan fərqli qalması üçün (53.1)-ə daxil olan $E > 0$ olmalıdır. Beləliklə, səpilmə nəzəriyyəsində enerjinin aldığı qiymətlər ardıcılığı kəsilməz spektr təşkil edir.

Zərrəciyin belə hərəkətində $V(r)$ funksiyası, yəqin ki, müəyyən məhdud oblastda sıfırdan fərqli olur:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > a \\ \neq 0, & r \leq a \end{cases} \quad (53.2)$$

Bu oblast qüvvələrin təsir oblastı adlanır. Belə oblastda hərəkət edən zərrəciyin (53.1) Şredinger tənliyini

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = W(r)\Psi \quad (53.3)$$

şəklində yazaq. Burada

$$W(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r), \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}. \quad (53.4)$$

Qüvvələrin təsir oblastından kənarında zərrəcik sərbəst hərəkət etdiyindən onun hərəkəti

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = 0 \quad (53.5)$$

tənliyinin həlli olan müstəvi dalğa ilə təsvir olunur. Koordinat sisteminin z -oxunu düşən zərrəciyin hərəkəti istiqamətində yönəltək, V həcminə normalanmış (V həcmində bir zərrəciyin olmasına uyğun) düşən zərrəciyin dalğa funksiyası

$$\Psi^o = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikz} \quad (53.6)$$

olar. Düşən zərrəciklərin ehtimal seli sıxlığı isə

$$j_{düz} = j_z = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\Psi^o \frac{\partial \Psi^{o*}}{\partial z} - \Psi^{o*} \frac{\partial \Psi^o}{\partial z} \right) = \frac{\hbar k}{\mu V} = \frac{p}{\mu V} = \frac{v}{V}, \quad (53.7)$$

burada $\frac{p}{\mu} = v$ – düşən zərrəciyin sürətidir.

$W(r)$ sahəsində səpilən zərrəciklərin dalğa funksiyası (53.3) tənliyinin həlli olar. Xüsusi törəməli (53.3) tənliyinin həllini tapmaq üçün Ψ -ni həyəcanlanmamış sistemin Ψ^o dalğa funksiyalarının superpozisiyası şəklində axtarmaq əvəzinə, onu inteqral tənlik şəklində salaq.

Fərz edək ki, fəzada

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho_o(\vec{r}) e^{i\omega t} \quad (53.8)$$

sıxlığı ilə paylanmış elektrik yüklərinin yaratdığı sahənin skalyar potensialı

$$\varphi(\vec{r}, t) = \varphi_o(\vec{r}) e^{i\omega t} \quad (53.9)$$

Klassik elektrodinamikadan məlumdur ki, $\varphi(\vec{r}, t)$ potensialı

$$\nabla^2 \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi \rho \quad (53.10)$$

Dalamber tənliyini ödəyir. Bu tənliyin həlli məlumdur. \vec{r}' nöqtəsinin yaxın ətrafında yerləşmiş $\rho(\vec{r}', t) dV'$ yüklərinin fəzanın hər hansı \vec{r} nöqtəsində t anında yaratdığı sahənin skalyar potensialı

$$\varphi(\vec{r}, t) = \int \frac{\rho(\vec{r}', t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{c})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} (d\vec{r}'), \quad (53.11)$$

burada $(d\vec{r}') = dV = dx' dy' dz'$; $|\vec{r} - \vec{r}'| - \vec{r}'$ nöqtəsindən \vec{r} müşahidə nöqtəsinə qədər olan məsafədir. (53.11)-də (53.10) tənliyinin yalnız gecikən həlləri götürülmüşdür, çünki məhz onlar səpilmə mərkəzindən ətraf fəzaya yayılan – səpilən dalğaları xarakterizə edir.

(53.8)-dən $\rho(\vec{r}, t)$ -nin, (53.9)-dan $\varphi(\vec{r}, t)$ -nin ifadələrini (53.11)-də yazıb $e^{i\omega t}$ vuruğuna ixtisar etdikdə, (53.11) tənliyi

$$\varphi_o(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}') e^{i\frac{\omega}{c}|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} (d\vec{r}') \quad (53.12)$$

şəklinə düşər. Eyni şəkildə ρ və φ -nin (53.8) və (53.9)-dan ifadələrini (53.10)-da yazdıqda

$$\nabla^2 \varphi_o + \frac{\omega^2}{c^2} \varphi_o = -4\pi\rho_o. \quad (53.13)$$

(53.13) tənliyinin (53.3) tənliyi ilə müqayisəsindən görünür ki, $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ və $\rho_o(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} W(\vec{r})\Psi$ olduqda bu iki tənlik bir-birinin üzərinə düşür. Ona görə (53.3)-ün həlli

$$\Psi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} W(\vec{r}')\Psi(\vec{r}') (d\vec{r}') \quad (53.14)$$

(53.14)-ün alınması gedişindən görünür ki, (53.14) inteqral tənliyi səpilən zərrəciklərin dalğa funksiyasını təyin edir. z -oxunun müsbət istiqamətində səpilən zərrəciklərdən başqa, qüvvələrin təsir etdiyi oblastdan kənarında, həmin istiqamətdə hərəkət edən zərrəciklər də mövcud olduğundan, (53.3) tənliyinin ümumi həlli bu iki zərrəciklər növünə uyğun xüsusi həllərin superpozisiyası olar:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} W(\vec{r}')\Psi(\vec{r}') (d\vec{r}') \quad (53.15)$$

Bu, (53.3) diferensial tənliyə ekvivalent inteqral tənlikdir.

Qeyd edək ki, yalnız elastiki səpilmə üçün (53.6) və (53.14) düsturlarındakı k -lar mütləq qiymətə bir-birinə bərabərdir.

İndi də göstərək ki, (53.3) tənliyinin (53.14) ilə verilmiş xüsusi həlli səpici mərkəzdən uzaqlarda, yəni $r \gg a$ yaxud $r \rightarrow \infty$ -da dağılan (səpilən) dalğanı xarakterizə edir.

Doğrudan da, səpici mərkəzdən uzaq məsafədə ($r \rightarrow \infty$)

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = r \left(1 - \frac{2\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right)^{\frac{1}{2}} \approx r \left(1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right)$$

olduğundan, (53.14) və (53.15) ifadələri uyğun olaraq

$$\Psi_c = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int W(\vec{r}') e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \Psi(\vec{r}') (d\vec{r}') = A(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (53.16)$$

və

$$\Psi_\infty = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} + A(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (53.17)$$

Burada $\vec{k} = \left| \vec{k} \right| \frac{\vec{r}}{r}$ və

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int W(\vec{r}') e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \Psi(\vec{r}') (d\vec{r}') \quad (53.18)$$

səpilmə amplitudu adlanır.

Beləliklə, $r \rightarrow \infty$ -da səpilən zərrəcikləri təsvir edən (53.17) dalğa funksiyası düşən müstəvi dalğa ilə səpilən sferik dalğanın superpozisiyasına bərabərdir. Bu, (53.10) tənliyinin həllində yalnız gecikən həllərin seçilməsi və $r \rightarrow \infty$ -da yalnız səpici mərkəzdən uzaqlaşan zərrəciklərin olması ilə əlaqədardır. Bu tələb bütün səpilmə məsələləri üçün ümumi bir tələbdir.

Səpilmənin $d\sigma$ effektiv kəsiyini $A(\theta, \varphi)$ səpilmə amplitudu ilə ifadə etmək üçün səpilən zərrəciklərin selinin sıxlığını hesablayaq. Biz yuxarıda qeyd etdik ki, səpici mərkəzdən uzaqlarda zərrəciklər \vec{r} radius vektoru boyunca hərəkət edir. Onda effektiv kəsiyin (52.3) ifadəsinə j_c vektorunun yalnız j_{rc} radial komponenti daxil olur.

Zərrəciklər seli sıxlığının (53.7) ifadəsinə uyğun olaraq

$$j_{rc} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi_c \nabla_r \Psi_c^+ - \Psi_c^+ \nabla_r \Psi_c)$$

olur, burada $\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}$ olduğundan $\Psi_c(r)$ -in (53.16) ifadəsindən

$$j_{rc} = \frac{\hbar k}{\mu r^2} |A(\theta, \varphi)|^2 \quad (53.19)$$

alınır. $j_{düs}$ -nin və j_{rc} -nin (53.19) ifadələrini (52.3)-də yerinə yazsaq,

$$d\sigma(\theta, \varphi) = |A(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (53.20)$$

Beləliklə, səpilmənin diferensial effektiv kəsiyini təyin etmək üçün səpilmə amplitudunu tapmaq lazımdır.

§54. Elastik səpilmə

(53.16) və ya (53.17) tənliklərində axtarılan $\Psi(\vec{r})$ funksiyası, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, inteqral altında olduğuna görə, o, inteqral tənlikdir. Onu adətən ardıcıl yaxınlaşma metodu ilə həll edirlər.

Birinci yaxınlaşmada (53.17) tənliyinin sağ tərəfinə onun $W=0$ -a uyğun (53.6) həllini yazmaq olar:

$$\Psi^{(1)} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} - \frac{1}{4\pi\sqrt{V}} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}'-\vec{r}|} W(\vec{r}') e^{ikz'} (d\vec{r}'). \quad (54.1)$$

$\Psi^{(1)}$ -in bu ifadəsini (53.17) inteqral tənliyin sağ tərəfində $\Psi(\vec{r}')$ -in yerinə yazmış olsaq, onun ikinci yaxınlaşmada daha dəqiq həllini almış olarıq. Lakin, biz birinci yaxınlaşma ilə kifayətlənəcəyik. Bu yaxınlaşma *Born yaxınlaşması* adlanır.

Təcrübədə həmişə səpilmə zərrəciklər səpici mərkəzdən xeyli uzaq məsafələrdə (atom ölçülərinə nəzərən) müşahidə olunur. Ona görə də (54.1) funksiyasının asimptotik ($r \gg a$ və ya $r \rightarrow \infty$) ifadəsini tapmaq lazım olur, inteqral isə qüvvələrin təsir oblastunda ($r' \leq a$) götürüldüyündən $\vec{r} \gg \vec{r}'$ olur. (54.1)-ə daxil olan inteqralın asimptotik ifadəsi (53.16) ilə verilmişdir. (54.1)-də $kz' = \vec{k}_0 \vec{r}'$ əvəzini qəbul etsək, $\Psi^{(1)}(\vec{r})$ funksiyasının asimptotik ifadəsi

$$\Psi_{ac}^{(1)} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi r\sqrt{V}} \int W(\vec{r}') e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k})\vec{r}'} (d\vec{r}') \quad (54.2)$$

olar. Qeyd edək ki, elastik səpilmədə $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$ -dır.

$W(\vec{r}')$ -in (53.4) ilə verilmiş ifadəsini (54.2)-də yazsaq,

$$\Psi_{ac}^{(1)} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2\sqrt{V}} \frac{e^{ikr}}{r} \int V(\vec{r}') e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k})\vec{r}'} (d\vec{r}') \quad (54.3)$$

Bu ifadənin (53.17) ilə müqayisəsindən alınır ki, Born yaxınlaşmasında səpilmə amplitudu

$$A(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2 \sqrt{V}} \int V(\vec{r}') e^{i\vec{q}\vec{r}'} (d\vec{r}') \quad (54.4)$$

ifadəsi ilə təyin olunur. Burada toqquşma vektoru adlanan

$$\vec{q} = \vec{k}_o - \vec{k}, \quad q = 2k \sin \frac{\theta}{2}. \quad (54.5)$$

Bu axırıncı ifadələrdə \vec{k}_o – düşən zərrəciklərin hərəkəti istiqamətində, \vec{k} – isə səpici mərkəzdən səpilən zərrəciklər müşahidə edilən nöqtəyə çəkilən radius-vektor istiqamətində yönəlmişdir. Onda θ – səpilmə bucağı olur.

$V(\vec{r})$ potensial funksiya ilə səciyyələnən sahə sferik (mərkəzi) simmetriyaya malikdirsə, $V(\vec{r})$ yalnız \vec{r} -in mütləq qiymətindən asılı olur. Onda belə sahədə səpilmə amplitudu yalnız θ səpilmə bucağının funksiyasıdır. Baxılan sahədəki hərəkət üçün (54.4)-də bucaqlara görə inteqrallar asanlıqla götürülür. Doğrudan da, \vec{q} ilə \vec{r}' (burada ştrixi atmaq olar) vektorları arasındakı bucaqları θ' və φ' ilə işarə etsək (θ ilə qarışdırmamaq üçün)

$$A(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty V(r) r^2 dr \int_0^\pi e^{iqr \cos \theta'} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi' = -\frac{\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) \frac{\sin qr}{qr} r^2 dr \quad (54.6)$$

$A(\theta)$ -nın bu ifadəsini (53.20)-də yazanda elastik səpilməni səciyyələndirən diferensial effektiv kəşik üçün Born yaxınlaşmasında

$$d\sigma = \frac{4\mu^2}{\hbar^4} \left| \int_0^\infty V(r) \frac{\sin qr}{qr} r^2 dr \right|^2 d\Omega \quad (54.7)$$

kimi ümumi ifadə alınır.

İndi də (54.7) düsturu vasitəsilə $Z_1 e$ yükünə malik ixtiyari bir zərrəciyin $Z_2 e$ nöqtəvi yükün yaratdığı Kulon sahəsində səpilmənin diferensial effektiv kəsiyini hesablayaq. Məsələn, $Z_2 e$ yüklü nüvənin Kulon (mərkəzi) sahəsində səpilən zərrəcik elektron ($Z_1=1$), α -zərrəcik ($Z_1=2$), istənilən atomun

ionu və i.a. ola bilər.

$Z_1 e$ yüklü zərrəciyin belə sahə ilə qarşılıqlı təsir enerjisi

$$V(r) = \pm \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (54.8)$$

olar. Bu (54.7) -də yazılsa,

$$d\sigma = \frac{4\mu^2}{\hbar^4} \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{q^2} \left| \int_0^\infty \sin qr \, dr \right|^2 d\Omega \quad (54.9)$$

alınar. Burada təsadüf olunan $\int_0^\infty \sin qr \, dr$ inteqralı adətən $\int_0^\infty e^{-\lambda r} \sin qr \, dr$ inteqralının $\lambda \rightarrow 0$ şərtilə götürülmüş limiti kimi açılır:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\lambda r} \sin qr \, dr = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{2i} \int_0^\infty \left[e^{(iq-\lambda)r} - e^{-(iq-\lambda)r} \right] dr = \frac{1}{q} \quad (54.10)$$

(54.10)-u (54.9)-da yazdıqda yüklü zərrəciklərin Kulon sahəsində səpilməsini səciyyələndirən və ilk dəfə Rezerfordun klassik nəzəriyyədə σ üçün aldığı ifadəyə gəlirik:

$$\sigma = \frac{(\mu Z_1 Z_2 e^2)^2}{4p^4 \sin^4 \theta/2}. \quad (54.11)$$

Burada $p = \hbar k$ – səpilən zərrəciyin impulsudur.

b) Asanlıqla göstərmək olar ki, kvant keçidləri nəzəriyyəsinin (bax §47) birinci yaxınlaşması da yuxarıda baxılan proses üçün (54.11) ifadəsinə gətirir. Başqa sözlə, Born yaxınlaşması qeyri-stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasına ekvivalentdir.

Doğrudan da, fərz edək ki, $t \rightarrow -\infty$ -da sərbəst hərəkət edən sistem (yəni zərrəcik) $\Psi_n(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t - \vec{p}_n \vec{r})}$ dalğa funksiyası ilə səciyyələnən $|n\rangle$ başlanğıc haldan, $V(r)$ sferik simmetrik sahənin təsiri altında səpiləndən sonra $t \rightarrow \infty$ -da $\Psi_k = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k t - \vec{p}_k \vec{r})}$ dalğa funksiyası ilə xarakterizə olunan

sərbəst hərəkətin hər hansı $\langle k \rangle$ halına keçmişdir (burada n və k - indeksləri kəsilmədən dəyişir). Qeyri-stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsinin (47.12) və (47.17) düsturlarına görə belə keçidin ehtimalı

$$W_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{1}{V} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}} V(r) e^{i\vec{k}_o r} (d\vec{r}) \right|^2 \delta(E_k - E_n) \quad (54.12)$$

olar. Adətən sistemin son mümkün hallardan hansına keçdiyi məlum olmadığından səpilmə proseslərində sistemin son mümkün hallardan hər hansı birinə (fərqi yoxdur hansına) keçid ehtimalı hesablanır. Ehtimalların toplanması teoreminə görə belə hadisənin ehtimalı son mümkün halların ehtimalları cəmi kimi hesablanır. Beləliklə, baxılan hadisənin tam ehtimalı (54.12)-dən \vec{k} dalğa vektoru üzrə götürülmüş cəmə (inteqrala) bərabərdir:

$$W = \sum_{\vec{k}} W_{kn} = \frac{2\pi}{\hbar V} \sum_{\vec{k}} \left| \int e^{i\vec{q}r} V(\vec{r}) (d\vec{r}) \right|^2 \delta(E_k - E_n). \quad (54.13)$$

Burada

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int k^2 dk d\Omega$$

keçidindən istifadə edib, hər iki halda zərrəciyin sərbəst hərəkət etdiyini,

$$\text{yəni } E_n = \frac{p_n^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k_o^2}{2\mu} \text{ və } E_k = \frac{p_k^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \text{ olduğunu nəzərə alsaq,}$$

$$W = \frac{1}{\hbar(2\pi)^2 V} \left| \int e^{i\vec{q}r} V(r) (d\vec{r}) \right|^2 k^2 dk d\Omega \delta \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} (k^2 - k_o^2) \right] \quad (54.14)$$

olar. Burada $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_o$ toqquşma vektorudur. (54.14)-ə daxil olan k üzrə inteqralı δ -funksiya vasitəsilə götürüb, elastik səpilmə üçün $|\vec{k}| = |\vec{k}_o|$ olduğunu nəzərə alanda keçid ehtimalı üçün

$$W = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\mu k}{\hbar^3 V} \left| \int e^{i\vec{q}\vec{r}} V(r) (d\vec{r}) \right|^2 d\Omega = \int W(\theta) d\Omega \quad (54.15)$$

alınar. Burada

$$W(\theta) = \frac{\mu k}{(2\pi)^2 \hbar^3 V} \left| \int e^{i\vec{q}\vec{r}} V(r) (d\vec{r}) \right|^2. \quad (54.16)$$

Səpilmə amplitudu $A(\theta, \varphi)$ -nin (54.4) ilə verilmiş ifadəsinə əsasən

$$W(\theta) = \frac{\hbar k}{\mu V} |A(\theta, \varphi)|^2 \quad (54.17)$$

olar.

Səpilən zərrəciklərin bucaqlara görə paylanmasını xarakterizə edən $W(\theta)$ ehtimalını hadisənin effektiv kəsiyi ilə əlaqələndirmək üçün onu düşən zərrəciklərin seli sıxlığına bölmək lazımdır. (53.7) və (54.17)-dən

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{W(\theta)}{v/V} = \frac{\mu}{\hbar k} V W(\theta) = |A(\theta, \varphi)|^2 \quad (54.18)$$

alınır. Bu isə (53.20) düsturunun üzərinə düşür.

§55. Parsial dalğalar metodu. Parsial effektiv kəsik

Əvvəlki paraqrafda zərrəciklərin ixtiyari $V(\vec{r})$ sahəsində səpilmə prosesinin təxmini nəzəriyyəsi ilə tanış olduq və xüsusi bir hal kimi, yüklü zərrəciyin Kulon sahəsində səpilməsini xarakterizə edən effektiv kəsiyin analitik ifadəsi tapıldı. İndi də (53.1) və ya (53.3)

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = W(r)\Psi \quad (53.3)$$

tənliyinin dəqiq həllini tapmağa çalışsaq. Səpici sahə sferik simmetrik, yəni $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ olduqda (53.3) tənliyinin dəqiq həlli üçün parsial dalğalar metodu təklif olunmuşdu.

Zərrəciyin sferik simmetrik sahədə səpilmə nəzəriyyəsi onun belə sahədəki hərəkəti ilə əlaqədardır. Belə hərəkət həm finit (məhdud fəzada) $E < 0$ və həm də infinit (sonsuz fəzada) $E > 0$ halları üçün §40-da təhlil edilmişdir. Orada göstərilmişdir ki, enerjinin $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} > 0$, hərəkət miqdarı

momentinin kvadratının $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ və hərəkət miqdarı momentinin $L_z = m\hbar$ proyeksiyasının məxsusi qiymətlərinə uyğun xüsusi həll

$$\Psi_{klm} = C_{klm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (55.1)$$

(bax (40.69)), enerjinin müəyyən $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ qiymətinə uyğun ümumi həlli isə

$$\Psi_k = \sum_{l,m} C_{klm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (55.2)$$

şəklində yazılır.

Yəqin ki, səpilmə prosesi üçün (55.2) ümumi həldən elə xüsusi həll tapılmalıdır ki, onun asimptotik ($r \rightarrow \infty$ -dəki) ifadəsi (53.17) ilə verilmiş

$$\Psi_{r \rightarrow \infty} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} + A(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (55.3)$$

funksiyası üzərinə düşsün. (54.6) ilə verilmiş $A(\theta, \varphi)$ səpilmə amplitudu sferik simmetrik sahədəki hərəkət üçün φ bucağından asılı olmadığından, (55.3) asimptotik həll də φ -dən asılı olmur. (55.2)-dən φ -dən asılı olmayan həll o vaxt alınar ki, cəmdə m -dən asılı olan bütün hədlər atılmış olsun, yəni $Y_{l0}(\theta)$ ilə mütənəsis hədlər saxlansın. Y_{l0} Lejandr polinomu $P_l(\cos\theta)$ -dən sabitlə fərqləndiyindən, axtarılan həll

$$\Psi(r, \theta) = \sum_l C_l R_l(r) P_l(\cos\theta) \quad (55.4)$$

olar. $\Psi(r, \theta)$ funksiyasının dəqiq ifadəsini tapmaq üçün C_l -əmsalları tapılmalıdır. Bunun üçün $R_l(r)$ -in (39.18') ilə verilmiş

$$R_l(r) = a \frac{e^{ikr}}{r} + b \frac{e^{-ikr}}{r} \quad (55.5)$$

asimptotik ifadəsinə müraciət edək. Enerji $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ müsbət olduqda

$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ həqiqi ədəd olduğundan, (55.5) funksiyası mərkəzə düşən və ondan çıxan (səpilən) sferik dalğaların superpozisiyası olur. $E > 0$ -da $R_l(r)$ -in də həqiqi funksiya olması üçün onu

$$R_l(r) = a_l \frac{\sin(kr + \beta_l)}{r} \quad (55.6)$$

şəklində yazmaq olar (funksiyanın birqiymətlik şərtindən). Onda

$$\Psi_{r \rightarrow \infty} \approx \sum_{l=0}^{\infty} C_l a_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr + \beta_l)}{r}. \quad (55.7)$$

Sonrakı hesablamaların əlverişli aparılması üçün $\beta_l = \delta_l - l \frac{\pi}{2}$ və

$C_l a_l = \frac{b_l}{k}$ əvəzlərini götürək

$$\Psi_{r \rightarrow \infty} = \sum_{l=0}^{\infty} b_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr + \delta_l - l\pi/2)}{r}. \quad (55.8)$$

Zərrəciklərin sferik simmetrik sahədəki hərəkətinə aid istənilən məsələnin asimptotik həllini (55.8) şəklində göstərmək olar. $A(\theta)$ səpilmə amplitudunun b_l əmsallarından və δ_l fazalarından asılı ifadəsini tapmaq üçün (55.3) funksiyasını da (55.8) şəklində göstərək. Bunun üçün əvvəlcə e^{ikz} funksiyasını $P_l(\cos \theta)$ Lejandr polinomları üzrə sıraya ayıraq (P_l - funksiyaları tam sistem təşkil edir):

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (55.9)$$

Burada $f_l(r)$ əmsalları yəqin ki, r -in funksiyası olar.

Fiziki olaraq e^{ikz} -in belə sıraya ayrılması müstəvi dalğanı durğun sferik dalğaların superpozisiyası şəklində göstərmək, yəni hərəkət miqdarı momentinin müxtəlif qiymətlərinə uyğun hallar üzrə koordinat başlanğıcına ($r=0$) nəzərən sıraya ayırmaq deməkdir. Bu sıranın hər bir həddi $W(r)=0$ -da (53.3) tənliyinin həllidir.

$f_l(r)$ əmsallarını tapmaq üçün (55.9)-u soldan $P_l(\cos \theta)$ -ya vurub, θ -nın

bütün dəyişmə $(0, \pi)$ intervalı üzrə inteqrallayaq. Əlverişlilik üçün $\cos \theta = x$ əvəzini götürüb $(0, \pi)$ intervalını $(-1, 1)$ ilə əvəz edək:

$$\int_{-1}^1 e^{ikrx} P_l(x) dx = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(r) \int_{-1}^1 P_l(x) P_l(x) dx$$

(14.27)-dən

$$\int_{-1}^1 P_l(x) P_l(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (55.10)$$

olduğunu nəzərə alıb, l üzrə cəmi $\delta_{ll'}$ simvolu vasitəsilə götürsək,

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 e^{ikrx} P_l(x) dx \quad (55.11)$$

alınar.

$f_l(r)$ -in r -in kifayət qədər böyük qiymətlərində ifadəsini tapmaq üçün (55.11)-də sağ tərəfdə dayanan inteqralı hissə-hissə açaq:

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{1} \left\{ \frac{e^{ikrx}}{ikr} P_l(x) \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{e^{ikrx}}{ikr} \frac{dP_l(x)}{dx} dx \right\}$$

$P_l(x)$ in (14.25) ilə verilmiş

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

ifadəsindən $P_l(x=1)=1$, $P_l(x=-1)=(-1)^l$ olduğundan

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2} \left\{ \frac{e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}}{ikr} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 e^{ikrx} \frac{dP_l(x)}{dx} dx \right\} \quad (55.12)$$

olar. $P_l(x)$ -in yuxarıdakı ifadəsindən görüldüyü kimi o, l -in üstlü polinomu olduğu halda $\frac{dP_l(x)}{dx}$ törəməsi $(l-1)$ üstlü polinomu olur. Ona görə də

(55.12)-dəki inteqralı bir dəfə də hissə-hissə açaq, alınan nəticə $\frac{1}{(ikr)^2}$ ilə mütənasib olur. Beləliklə, (55.11)-dəki inteqralı l dəfə hissə-hissə açanda alınan hər bir həddə r -in üstü ondan əvvəl gələn hədddən bir vahid böyük olacaq. $f_l(r)$ -in asimptotik ifadəsi axtarıldığından $\frac{1}{r^2}$ -dan başlayaraq bütün sonrakı hədləri birinci həddə nəzərən atmaq olar:

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2} \cdot \frac{e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}}{ikr} \quad (55.13)$$

Bu ifadəni sadələşdirmək üçün $(-1)^l$ -i

$$(-1)^l = (e^{i\pi})^l = e^{il\pi/2} e^{il\pi/2}$$

ifadəsi ilə əvəz edək. Onda

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2} e^{il\pi/2} \frac{e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}}{ikr},$$

burada

$$e^{il\pi/2} = (\cos \pi/2 + i \sin \pi/2)^l = i^l$$

olduğunu nəzərə aldıqda

$$f_l(r) = i^l (2l+1) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (55.14)$$

alınar. $f_l(r)$ -in bu ifadəsini (55.9)-da yerinə yazanda (55.3) funksiyasının birinci e^{ikz} həddi üçün

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} \quad (55.15)$$

asimptotik ifadəsi alınır.

İndi də (55.3) funksiyasının ikinci həddində $A(\theta)$ səpilmə amplitudunu Lejandr polinomları üzrə sıraya ayıraq:

$$A(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} g_l P_l(\cos \theta) \quad (55.16)$$

burada g_l əmsalları ədəddir.

(55.15) və (55.16) ifadələrini (55.3)-də yerinə yazsaq,

$$\Psi_{r \rightarrow \infty} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr + \delta_l - l\pi/2)}{kr} + \sum_{l=0}^{\infty} g_l P_l(\cos \theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (55.17)$$

Digər tərəfdən biz yuxarıda gördük ki, həmin bu funksiya (55.8) ilə verilmiş asimptotik ifadəyə də malikdir. θ -nın istənilən qiymətində bu funksiyaların bir-birinə bərabər olması üçün $P_l(\cos \theta)$ -nın uyğun əmsalları bir-birinə bərabər olmalıdır. (55.8) və (55.16)-da $i^l e^{il\pi/2}$ və sinusları eksponensial funksiyalarla əvəz edib, iki funksiyanın bərabərliyini tələb etsək, əmsallar arasında

$$\frac{1}{2ik} b_l e^{i(\delta_l - l\pi/2)} = \frac{2l+1}{2ik} + g_l \quad (55.18)$$

$$\frac{1}{2ik} b_l e^{-i(\delta_l - l\pi/2)} = \frac{2l+1}{2ik} e^{il\pi}$$

münasibətlər alınar. İkinci münasibətdən

$$b_l = (2l+1) e^{i(\delta_l + l\pi/2)} \quad (55.19)$$

və b_l -in bu qiymətini (55.18)-in birinci münasibətində yerinə yazsaq, g_l üçün

$$g_l = \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \quad (55.20)$$

alınar. Nəhayət g_l -in bu ifadəsini (55.16)-da yazsaq,

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (55.21)$$

Buradan (53.17)-yə uyğun səpilmənin diferensial effektiv kəsiyi üçün

$$d\sigma = |A(\theta)|^2 d\Omega = \frac{1}{4k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta) \right|^2 d\Omega \quad (55.22)$$

alınar. (55.22)-dən görünür ki, səpilmənin effektiv kəsiyi δ_l fazaları çoxluğuna ilə təyin olunur.

Səpilmənin σ tam effektiv kəsiyini tapmaq üçün kompleks kəmiyyətin modulunun kvadratını açıb, θ -bucağı üzrə inteqral götürək. (55.22)-də θ dəyişənindən $x = \cos\theta$ dəyişəninə keçib $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi = -2\pi dx$ (çünki $d\cos\theta = -\sin\theta d\theta$)-dən istifadə etsək,

$$\sigma = \frac{\pi}{2k^2} \sum_{l,l'=0}^{\infty} [(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)][(2l'+1)(e^{-2i\delta_{l'}} - 1)] \int_{-1}^1 P_l(x)P_{l'}(x)dx,$$

(55.10)-a görə

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)(e^{-2i\delta_l} - 1) = \\ &= \frac{(2i)^2}{k^2} \pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)e^{i\delta_l} \frac{e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l}}{2i} \cdot \frac{e^{-i\delta_l} - e^{i\delta_l}}{2i} e^{-i\delta_l} \end{aligned}$$

yaxud

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (55.23)$$

(55.23)-dən görünür ki, səpilmənin σ tam effektiv kəsiyi parsial effektiv kəsiklər adlanan σ_l -in cəmi kimi göstərilə bilər:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad (55.24)$$

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l.$$

Parsial effektiv kəsiklərin hər biri zərrəciyin l kvant ədədi ilə təyin olunan hərəkət miqdarı momentinin müəyyən qiymətinə uyğundur. Məsələn, $l=0$ -da səpilmə s -səpilmə (σ_s), $l=1$ -də p -səpilmə (σ_p) və i.a. adlanır.

(55.22) və (55.23)-dən görünür ki, zərrəciyin verilmiş qüvvə sahəsində səpilmənin həm diferensial və həm də tam effektiv kəsikləri δ_l -fazalar çoxluğu ilə təyin olunur. Başqa sözlə, səpilmənin effektiv kəsiklərinin

tapılması δ_l fazalarının hesablanmasına gətirilir. δ_l - fazaları hesablamaq isə o qədər də asan məsələ deyildir. Fazaları hesablamaq üçün əvvəlcə zərəcəyin verilmiş sahədəki hərəkətini təsvir edən (R_{nl} üçün) tənliyi həll edib, həllin böyük məsafələrdə ($r \rightarrow \infty$ -da) asimptotik şəklini tapılmalıdır. Sonra alınan nəticəni $R_l(r)$ -in (55.6) ifadəsi ilə müqayisə edərək δ_l fazaları tapılır. Beləliklə, uyğun Şredinger tənliyinin dəqiq həlli, bütün δ_l fazalarını tapmağa və bununla da səpilmənin effektiv kəsiklərini təyin etməyə imkan verir.

Qeyd edək ki, b_r -in (55.19) ilə verilmiş ifadəsini (55.8)-də yazdıqda dalğa funksiyası üçün daha bir asimptotik ifadə alınır:

$$\Psi_{r \rightarrow \infty} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i(\delta_l + l\pi/2)} P_l(\cos\theta) \frac{\sin(kr + \delta_l - l\pi/2)}{kr}. \quad (55.25)$$

Burada, sinusu yuxarıdakı kimi $\frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$ - ifadəsi ilə əvəz etdikdə Ψ üçün

$$\Psi_{r \rightarrow \infty} = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) \left[\frac{(-1)^l e^{-ikr}}{r} - S_l \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (55.26)$$

ifadəsi alınır, burada

$$S_l = e^{2i\delta_l}. \quad (55.27)$$

(55.26)-da kvadrat mötərizədəki birinci hədd amplitudu $(-1)^l$ olan mərkəzə düşən sferik dalğanı, ikinci hədd isə amplitudu S_l olan mərkəzdən kənara yayılan sferik dalğanı təsvir edir. Hər iki amplitudun modulunun kvadratı vahidə bərabərdir. Bu o deməkdir ki, elastik səpilməni təsvir edən dalğa funksiyası mərkəzə düşən və ondan çıxan (səpilən) sferik dalğaların toplanmasından yaranan durğun dalğa şəklinə malikdir.

Düşən sferik dalğanın ehtimal seli sıxlığı

$$\vec{j}_g = \frac{\hbar}{2\mu c} |(-1)^l|^2 \left\{ \frac{e^{ikr}}{r} \nabla_r \left(\frac{e^{-ikr}}{r} \right) - \frac{e^{-ikr}}{r} \nabla_r \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \right\} = \frac{\hbar k}{\mu r^2} \vec{e}_r, \quad (55.28)$$

burada $\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$. Səpilən sferik dalğanın ehtimal seli sıxlığı isə

$$\vec{j}_c = |S_l|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2} \vec{e}_r. \quad (55.29)$$

Səpələn dalğanın amplitudu $[S_l]^2 = 1$ olduğundan (55.28) və (55.29) vektorları yalnız istiqamətə fərqlənir. Buradan çıxar ki, istənilən səthdən və ya istənilən radiuslu kürədən keçən ehtimal seli sifra bərabərdir. Bu, ona uyğundur ki, elastik səpilmədə mərkəzə düşən zərrəciklərin sayı, mərkəzdən səpələn zərrəciklərin sayına bərabərdir, yəni elastik səpilmədə zərrəciklərin sayının saxlanma qanunu ödənilir.

§56. Qeyri-elastik səpilmə

Toqquşmada iştirak edən zərrəciklərin daxili halı dəyişən səpilməyə qeyri-elastik səpilmə deyilir. Belə səpilmə proseslərinə atomların və nüvələrin həyəcanlanması, atomların ionlaşması, nüvələrin parçalanması, zərrəciklərin başqa növ zərrəciklərə çevrilməsi, yeni zərrəciklərin yaranması və ya toqquşan zərrəciklərin udulması və i.a. kimi proseslər aiddir.

Sadalanan proseslər toqquşan zərrəciklərin daxili halı dəyişməyən proses də ola bilər. Onda belə prosesdə iştirak edən zərrəcik elastik səpilmə hesab olunur.

Zərrəciklərin qeyri-elastik toqquşması zamanı zərrəciklərdən hər biri baxılan anda yalnız bir növ prosesdə iştirak edə bilər. Bu proses müəyyən yox, sadalanan proseslərdən hər hansı biri ola bilər. Biri baş verirsə, digəri qadağan olunan və bir-birini inkar edən proseslərdən hər hansı birinin (fərqi yoxdur hansının) müşahidə olunma ehtimalı hər növ prosesin ayrılıqda müşahidə olunma ehtimalları cəminə bərabər olar.

Bu baxımdan toqquşan zərrəciklərin asimptotik dalğa funksiyası bu proseslərin hər birinə aid olan hədlərin cəmi şəklində yazılar. Biz elastik səpilməyə aid olan həddin təhlili ilə başlayaq.

Bundan əvvəlki paragrafda göstərdik ki, elastik səpilməni təsvir edən dalğa funksiyası səpici mərkəzə düşən və mərkəzdən çıxan (səpələn) sferik dalğaların cəmidir (bax (55.26)):

$$\Psi = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[(-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r} - S_l \frac{e^{ikr}}{r} \right]. \quad (56.1)$$

Baxılan elastik prosesdən başqa, digər proseslər də baş verdiyindən S_l artıq (55.27) ilə təyin olunmur. Burada o, modulu vahiddən kiçik hər hansı kompleks kəmiyyət olur və elastik səpələn zərrəciklər seli (sayı), düşən zərrəciklər selinə bərabər yox (bax (55.28) və (55.29)), ondan kiçik olur.

$A(\theta)$ səpilmə amplitudunun (55.21) ifadəsini aldığımız yolu burada da təkrar etsək, onun üçün

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(S_l - 1)P_l(\cos \theta) \quad (56.2)$$

ifadəsi alınar. Bu ifadə (55.21)-dən onunla fərqlənir ki, burada $e^{2i\delta_l}$ vuruğu əvəzində modulu vahiddən kiçik olan S_l durur.

$A(\theta)$ -nın bu ifadəsini $d\sigma$ -nın (53.20) ifadəsində yerinə yazanda

$$d\sigma = \frac{1}{4k^2} \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1)(S_l - 1)(S_{l'} - 1)P_l P_{l'} d\Omega$$

alınır. Bu ifadəni (55.10) əsasən bucaqlara görə inteqrallasaq,

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)|S_l - 1|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)|1 - S_l|^2. \quad (56.3)$$

Buradan elastik səpilmənin parsial effektiv kəsiyi

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} (2l+1)|1 - S_l|^2. \quad (56.4)$$

Qeyri-elastik səpilmənin effektiv kəsiyini tapmaq üçün səpici mərkəzi qapayan və R radiusu xeyli böyük olan sferadan keçən zərrəciklər selini hesablayaq. Bu sel, yəqin ki, (56.1) funksiyası ilə təyin olunar:

$$dN = j dS = j R^2 d\Omega = \frac{\hbar}{2\mu c} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^+}{\partial r} - \Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) R^2 d\Omega. \quad (56.5)$$

Əvvəllərdə olduğu kimi $\frac{1}{r}$ -dən kiçik və $\frac{1}{r^n}$ ($n > 1$) ilə mütənəsis hədləri nəzərə almasaq, (56.1)-dən $\frac{\partial \Psi}{\partial r}$ üçün aşağıdakı ifadə alınar:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} = -\frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[(-1)^l e^{-ikr} + S_l e^{ikr} \right] P_l(\cos \theta). \quad (56.6)$$

(56.1), (56.6) və (55.10)-a əsasən

$$N = -\frac{\hbar}{4\mu k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1-|S_l|^2) \frac{4\pi}{2l+1} = -\frac{\pi\hbar}{\mu k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1-|S_l|^2). \quad (56.7)$$

Burada $|S_l|^2 < 1$ olduğundan sel mənfəi olur, yəni bəzi zərrəciklər qeyri-elastic səpilməyə məruz qaldığından elastic səpilən zərrəciklər seli səpici mərkəzə düşən zərrəciklər selindən kiçikdir.

(56.7) ifadəsi kürədən keçən elastic səpilən və düşən zərrəciklərin sel-lər fərqi göstərdiyindən, qeyri-elastic səpilmiş zərrəciklər seli, yəqin ki, (56.7) ilə verilmiş selin müsbət işarə ilə götürülmüş qiymətinə bərabər olar:

$$N_{q.el} = \frac{\pi\hbar}{\mu k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1-|S_l|^2). \quad (56.8)$$

Bu seli düşən zərrəciklərin ehtimal seli sıxlığına, yəni $\nu = \frac{p}{\mu} = \frac{\hbar k}{\mu}$ -yə bölsək, qeyri-elastic səpilmənin tam effektiv kəsiyini alarıq:

$$\sigma_{q.el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1-|S_l|^2). \quad (56.9)$$

Parsial effektiv kəşik isə

$$\sigma_{q.el} = \frac{\pi}{k^2} (2l+1)(1-|S_l|^2). \quad (56.10)$$

$|S_l|^2 = 1$ olanda qeyri-elastic səpilmənin parsial effektiv kəsiyi sıfıra bərabər olur ($\sigma_{q.el} = 0$), deməli $S_l = 1$ halında olan zərrəciklər qeyri-elastic səpilməyə məruz qalmır. $S_l = 0$ halı zərrəciklərin tam udulmasına uyğun gəlir (səpilən zərrəcik yoxdur). Bu halda (56.4) və (56.10)-dan

$$\sigma_{l,q.el} = \sigma_{l,el} = \frac{\pi}{k^2} (2l+1). \quad (56.11)$$

(56.4) və (56.10)-dan görünür ki, onlardan biri sıfırdan fərqlidirsə, digəri də sıfırdan fərqlidir. Bu o deməkdir ki, qeyri-elastic səpilmə baş verdik-

də, elastik səpilmə də baş verir.

§ 57. Fotoeffekt

Bağlı zərrəciyin, onun rabitə enerjisindən böyük enerjiyə malik olan fononu udma prosesinə fotoeffekt deyilir. Məsələn, atomun stasionar səviyyələrin birində olan elektron fononu udaraq, kəsilməz enerji spektri oblastına (sərbəst hala) keçə bilər. Belə elektron fotoelektron adlanır. Bu proses atomun foton vasitəsilə ionlaşması da adlana bilər. Fotoeffekt $\hbar \omega$ enerjisi atomun ionizasiya enerjisindən böyük və bərabər olan fotonlar yaradır. Beləliklə:

$$\hbar \omega \geq I \quad (57.1)$$

şərti fotoeffektin yaranma bilməsi şərtidir.

Atomda elektronun rabitə enerjisi böyük olduqca, fotonun udulması zamanı impulsun qalıq hissəsinin (elektronun aldığı impulsdan əlavə) nüvəyə verilməsi prosesi daha asan baş verir. Ona görə də fotoeffektin yaranması ehtimalı K -təbəqəsində olan elektronlar üçün maksimum qiymətə malik olur. Bu paraqrafda bu halın təhlili ilə kifayətlənəcəyik.

Kvant keçidləri nəzəriyyəsində keçidin vahid zamanda baş vermə ehtimalı üçün (47.16) ifadəsini almışdıq:

$$W_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{nm}^o|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}). \quad (47.16)$$

Burada

$$V_{nm}^o = -\frac{e}{mc} \int \Psi_n^{o+}(\vec{r})(A(\vec{r})\vec{p})\Psi_m^o(\vec{r})(d\vec{r}) \quad (57.2)$$

keçid matrisası, Ψ_n^o – atom-sisteminin son, Ψ_m^o isə başlanğıc halının dalğa funksiyaları, $\vec{A}(\vec{r})$ – fotonun (50.54) ilə verilmiş dalğa funksiyası operatorudur. Burada, məsələn, $\hbar \vec{k}$ impulsuna və \vec{a}^o polyarlaşma istiqamətinə malik fotonun udulduğunu qəbul etsək, (50.54)-dən

$$\vec{A}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}} \vec{a}^o e^{i\vec{k}\vec{r}} C_{k\lambda}. \quad (57.3)$$

$\Psi_m^o - K$ təbəqəsində olan elektronun $\Psi_{1s}(r, \theta, \varphi), \Psi_n$ isə sərbəst halda olan elektronun $\Psi_2(r)$ hal funksiyalarıdır.

Atomun Kulon sahəsinin təsiri nəzərə alınmazsa, fotoelektronun dalğa funksiyasını müstəvi dalğa şəklində, K -təbəqəsindəki elektronun dalğa funksiyası kimi isə, digər elektronların K -elektronuna ekranlayıcı təsiri kiçik olduğundan, nüvənin Z -effektiv yükü daxil olan hidrogenəbənzər atomun dalğa funksiyası götürülə bilər:

$$\Psi_m^o = \Psi_{1s} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}} e^{-\frac{Zr}{a}}, \quad \Psi_n^o = \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}, \quad (57.4)$$

burada $\Psi_2 - \delta$ -funksiyaya normalaşdırılmışdır.

$1s$ halından sərbəst hala keçən elektronun impulsunun \vec{p} ilə $\vec{p} + d\vec{p}$ intervalında qiymət alma ehtimalını tapmaq üçün (47.16) ifadəsini bu intervaldakı kvant hallarının sayına vurmaq lazımdır. Ψ_2 -funksiyası δ -funksiyaya normalandığından \vec{p} ilə $\vec{p} + d\vec{p}$ intervalındakı kvant hallarının sayı ($d\vec{p}$) = $p^2 dp d\Omega$ olar*. Onda

$$dW_{2,1s} = \frac{2\pi}{h} |V_{2,1s}^o|^2 \delta(E_2 - E_{1s} - \hbar\omega) p^2 dp d\Omega, \quad (57.5)$$

burada $d\Omega$ - daxilində fotoelektronun impulsunun istiqaməti yerləşmiş elementar cisim bucağı, $\hbar\omega$ - düşən fotonun enerjisi, $E_2 = \frac{p^2}{2m}$ - fotoelektronun enerjisi, E_{1s} - atomun $1s$ stasionar səviyyəsinin enerjisi, $\omega_{mn} = \omega_{2,1s} = \frac{E_2 - E_{1s}}{\hbar}$ - keçid tezliyidir.

δ -funksiyanın xassəsindən fotoeffektdə enerjinin saxlanma qanunu

* Ψ_2 -funksiyası $\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$ kimi həcmə normalanmış olsaydı, \vec{p} ilə $\vec{p} + d\vec{p}$ intervaldakı kvant hallarının sayını tapmaq və ya sərbəst elektronun impulsu üzrə integral almaq üçün

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int (d\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int p^2 dp d\Omega$$

keçidindən istifadə etmək lazımdır.

$$E_2 = \frac{p^2}{2m} = E_{1s} + \hbar\omega \quad (57.6)$$

alınır. K -təbəqəsindən ionlaşma enerjisi

$$E_{1s} = -I = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \quad (57.6')$$

olduğundan, enerjinin saxlanma qanunu

$$\frac{p^2}{2m} = -I + \hbar\omega \text{ və ya } \frac{p^2}{2m} = \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} + \hbar\omega \quad (57.6'')$$

kimi yazıla bilər.

Fotoelektronun $E_2 = \frac{p^2}{2m}$ enerjisi üzrə δ -funksiya vasitəsilə inteqral alaı. (57.6)-dan

$$dE_2 = \frac{1}{m} p dp \text{ və ya } m dE_2 = p dp$$

olduğundan, (57.5)-də E_2 üzrə inteqral olsaı:

$$dW_{2,1s} = \frac{2\pi}{\hbar} m |V_{2,1s}^o|^2 p d\Omega. \quad (57.5')$$

İndi də $V_{2,1s}$ matrisa elementinin hesablanmasına keçək. Alınan nəticələr, yəqin ki, ağır atomların K -təbəqəsindən baş verən fotoeffekt üçün doğru olar. Buna görə də hesablamaları Z -effektiv yükün ixtiyarı qiyməti üçün aparaq. Ağır atomlarda fotoeffekt yaradan fotonlar üçün (rentgen şüaları) $kr \ll 1$ şərti ödənilmədiyindən e^{ikr} vuruğunu sıraya ayırmaq doğru olmaz.

(57.4)-dən Ψ_2 və Ψ_{1s} funksiyalarını öz ifadələri ilə (57.5') -də əvəz etsək,

$$V_{2,1s}^o = -\frac{e}{2\pi\hbar m} \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 \omega L^3}} (\vec{a} \cdot \vec{J}) C_{k\lambda} \quad (57.7)$$

alınar. Burada

$$\vec{J} = \int e^{-i\vec{q}\vec{r}} \vec{p} e^{-\frac{Zr}{a}} (d\vec{r}) \quad (57.8)$$

və

$$\vec{q} = \frac{\vec{p}}{\hbar} - \vec{k}$$

nüvəyə verilən impulsun dalğa ədədidir. \vec{J} -də hissə-hissə inteqral alağ.

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

$$v = e^{-i\vec{q}\vec{r}}, \quad du = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(e^{-\frac{Zr}{a}} \right) (d\vec{r}),$$

$$d\vec{v} = -i\vec{q} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad u = e^{-\frac{Zr}{a}}$$

əvəzlərinə

$$\vec{J} = \vec{q} \int e^{-i\vec{q}\vec{r}} \cdot e^{-\frac{Zr}{a}} (d\vec{r})$$

olar. Bu inteqralı açmaq üçün polyar oxu \vec{q} üzrə yönəldib, sferik koordinat sisteminə keçək. Əvvəlcə bucaqlara görə inteqral alağ:

$$\int e^{-\frac{Zr}{a}} e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta d\varphi r^2 dr = \frac{2\pi}{iq} \int_0^\infty \left\{ e^{(iq - \frac{Z}{a})r} - e^{-(iq + \frac{Z}{a})r} \right\} r dr.$$

Axırıncı inteqralı hissə-hissə açsaq,

$$\int e^{-\frac{Zr}{a}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} (d\vec{r}) = \frac{8\pi a^3}{Z^3 \left(1 + \frac{q^2 a^2}{Z^2} \right)^2}$$

alınar. Onda

$$\bar{J} = \bar{q} \frac{8\pi a^3}{Z^3 \left[1 + \left(\frac{qa}{Z} \right)^2 \right]^2}. \quad (57.9)$$

\bar{J} -nin bu qiymətini (57.7)-də yazıb, şüalanma sahəsinin $\bar{k}\bar{a}^o = 0$ eninəlik şərtini nəzərə alsaq, keçid matrisası

$$V_{2,1s}^o = -\frac{4e}{\hbar m} \left(\frac{a^3}{\pi Z^3 \omega L^3} \right)^{\frac{1}{2}} (\bar{a}^o \bar{p}) \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{aq}{Z} \right)^2 \right]^2} C_{k\lambda} \quad (57.10)$$

$V_{2,1s}^o$ -i (57.5')-də yazsaq, fotoeffektin baş vermə ehtimalı

$$dW_{2,1s}^o = \frac{2^5 \pi a^3 d\Omega}{\hbar^3 Z^3 L^3 m \omega} (\bar{a}^o \bar{p})^+ (\bar{a}^o \bar{p}) \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{aq}{Z} \right)^2 \right]^4} C_{k\lambda}^* C_{k\lambda}. \quad (57.11)$$

(57.6) və (57.11) bərabərliklərindən görünür ki, fotoeffektin klassik nəzəriyyədəki çətinlikləri kvant nəzəriyyəsində tam həll olunur. Doğrudan da, fotoelektronun sürəti fotonun yalnız tezliyindən asılıdır, enerjisi $\hbar \omega < I$ olan fotonlar fotoeffekt yarada bilmir. O, $\hbar \omega = I$ kimi qırmızı sərhəddə malikdir və nəhayət, fotoelektronların sayı düşən şüalanmanın $|\bar{A}|^2$ intensivliyi ilə mütənasibdir. Buradan görünür ki, fotoeffektin ehtimalı hadisə baş verən fəzanın L^3 həcmindən asılıdır. Belə hallarda həmişə hadisənin ehtimalından onun effektiv kəsiyinə keçirlər. Effektiv kəsik (σ ilə işarə olunur) hadisənin ehtimalının düşən zərrəciyin (baxılan halda fotonun) ehtimal salı sıxlığı j -ya olan nisbətinə bərabərdir:

$$d\sigma = \frac{dW}{j}. \quad (57.12)$$

j -nin (17.12) ilə verilmiş ifadəsində Ψ əvəzində $\vec{A} = \vec{a}e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}}$ fotonun dalğa funksiyasını yazsaq,

$$j = \frac{c}{L^3} \quad (57.13)$$

alınar (elektron üçün $j = \frac{v}{L^3}$).

(57.11) və (57.13)-dən

$$d\sigma = \frac{dW}{c} L^3. \quad (57.14)$$

Digər tərəfdən prosesdə yeganə bir foton udulduğundan C_{kl}^* doğulma, $C_{k\lambda}$ udulma operatorlarının (50.70) yerdəyişmə münasibətinə daxil olan $C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+$ və $C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda}$ operatorlarının

$$N_{k\lambda} + 1 = \langle N_{k\lambda} + 1 | C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ | N_{k\lambda} \rangle \quad \text{və} \quad N_{k\lambda} = \langle N_{k\lambda} - 1 | C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} | N_{k\lambda} \rangle$$

matrisa elementlərinin ifadələrindən bizim halda

$$\langle 0 | C_{k\lambda} C_{k\lambda}^+ | 1 \rangle = 0, \quad \langle 0 | C_{k\lambda}^+ C_{k\lambda} | 1 \rangle = 1 \quad (57.15)$$

olur. Beləliklə, proses L^3 həcmində vahid fotona normalanır.

dW -nin yerinə onun (57.11) ilə verilmiş ifadəsini yazıb, (57.15) nəzərə alsaq, diferensial effektiv kəsik üçün

$$d\sigma = \frac{2^5 p d\Omega}{\hbar \omega Z^3} \alpha^4 r_o^2 \frac{c^3}{(mc^2)^2} (\vec{a}^o \vec{p})^* (\vec{a}^o \vec{p}) \cdot \frac{1}{\left[1 + \left(\frac{qa}{Z} \right)^2 \right]^4} \quad (57.16)$$

ifadəsi alınır, burada $r_o = \frac{e^2}{mc^2} \approx 10^{-13}$ sm elektronun klassik radiusudur,

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ incə quruluş sabitidir.

Fotoelektronun impulsunun kifayət qədər böyük, yəni $p^2/2m \approx \hbar\omega$) I şərtini ödəyən qiymətində (57.16) ifadəsini xeyli sadələşdirmək olar.

z -oxunu fotonun $\hbar \vec{k}$ impulsu üzrə yönəldək, onda \vec{a}^o polyarlaşma vek-

toru, yəqin ki, x (və ya y) oxu üzrə yönələr (şəkil 29)

$$\vec{a}^o \vec{p} = p_{ao} = p_x = p \sin \theta \cos \varphi \quad (57.17)$$

$$(\vec{a}^o \vec{p})^2 = p^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi$$

və

$$q^2 = \left(\frac{\vec{p}}{\hbar} - \vec{k} \right)^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} + k^2 - \frac{2pk}{\hbar} \cos \theta$$

q^2 -nin bu ifadəsini $1 + \frac{q^2 a^2}{Z^2}$ da yazıb, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} 1 + \frac{a^2 q^2}{Z^2} &= \frac{a^2}{Z^2} \left(q^2 + \frac{Z^2}{a^2} \right) = \frac{a^2}{Z^2} \left(\frac{m^2 e^4 Z^2}{\hbar^4} + \frac{p^2}{\hbar^2} + k^2 - \frac{2pk}{\hbar} \cos \theta \right) = \\ &= \frac{a^2}{b^2 Z^2} \left(\frac{m^2 Z^2 e^4}{\hbar^2} + p^2 - 2pk \cos \theta + \hbar^2 k^2 \right) \end{aligned} \quad (57.18)$$

(57.6") enerjinin saxlanma qanunundan və 1-nin (57.6') ifadəsindən

$$p^2 + \frac{m^2 Z^2 e^4}{\hbar^2} = 2m\hbar ck$$

olduğundan

$$1 + \frac{q^2 a^2}{Z^2} = \frac{a^2}{\hbar Z^2} k(2mc - 2p \cos \theta + \hbar k) \quad (57.19)$$

olar. Fotonun enerjisinin elektronun məxsusi enerjisindən kifayət qədər kiçik olduğunu qəbul etsək, yəni $mc^2 \gg \hbar ck$ və ya $mc \gg \hbar k$, (57.19)-də, axırıncı həddi nəzərə almamaq olar:

$$1 + \frac{q^2 a^2}{Z^2} = \frac{2m\hbar \omega}{\hbar^2 Z^2} a^2 (1 - \beta \cos \theta) \quad (57.20)$$

burada $\beta = \frac{p}{mc} = \frac{v}{c}$ -dir. İ-rabitə enerjisinin də fotoelektronun enerjisindən

xeqli kiçik olduğu fərziyyəsi əsasında (57.6)-dan $p \approx \sqrt{2m\hbar \omega}$ alınır. (57.17) və (57.20) münasibətlərindən, qeyri-relyavistik halda (57.16) effek-

tiv kəsiyi

$$d\sigma = 4\sqrt{2}Z^5\alpha^4 r_o^2 \left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \frac{\sin^2\theta \cos^2\varphi}{(1-\beta\cos\theta)^4} d\Omega, \quad (57.21)$$

nəhayət $\frac{1}{(1-\beta\cos\theta)^4} = (1-\beta\cos\theta)^{-4} \approx 1+4\beta\cos\theta$ yaxınlaşması üçün

$$d\sigma = 4\sqrt{2}\alpha^4 Z^5 r_o^2 \left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \sin^2\theta \cos^2\varphi (1+4\beta\cos\theta) d\Omega \quad (57.22)$$

(57.21) və ya (57.22) ifadəsi fotoelektronun bucaqlara görə paylanma qanununu verir. Şualanmanın kiçik tezliklərində, yəni $\frac{p}{mc} = \sqrt{\frac{2m\hbar\omega}{m^2c^2}} = \frac{v}{c} \ll 1$ -də effektiv kəsiyin (elektronun çıxış ehtimalının) maksimum qiyməti bucaqların $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\varphi=0$ qiymətinə uyğun gəlir. Bu halda əksər elektronlar fotonun düşmə istiqamətinə perpendikulyar, fotonun polyarlaşma istiqamətinə paralel yayılır. Düşən fotonun tezliyi artdıqca (57.21) və ya (57.22) ifadələrində $(1-\beta\cos\theta)^{-4}$ vuruğunu saxlamaq lazım olduğuna görə effektiv kəsiyin maksimumu θ -nın kiçilmə istiqamətində yerini dəyişir.

Nəhayət, K -təbəqəsindən elektronun çıxma hadisəsinin tam effektiv kəsiyini tapmaq üçün (57.22)-i θ və φ bucaqları üzrə inteqrallamaq və alınan nəticəni ikiyə vurmaq lazımdır (beləki K -təbəqəsində iki elektron olur):

$$\sigma = \frac{2^5\sqrt{2}}{3} r_o^2 \alpha^4 Z^5 \left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \quad (57.23)$$

Buradan görünür ki, Z -böyüdükcə, yəni ağır atomlar oblastına keçdikcə, fotoeffektin tam effektiv kəsiyi böyüyür, düşən fotonun tezliyi artdıqca isə kiçilir.

(57.23) ifadəsi $I \ll \frac{P^2}{2m} \ll \hbar\omega$ yaxınlaşmasında doğrudur. σ üçün

bütün enerji oblastında doğru olan ifadə isə yalnız relyativistik kvant mexanikasında (kvant elektrodinamikasında) alınabilir.

§58. Kompton effekt

50 və 57-ci paragraflarda biz bir fotonun buraxılıb və ya udulması ilə nəticələnən prosesləri tədqiq etdik. Belə proseslərin ehtimalı (effektiv kəsiyi) həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci tərtibi ilə təyin olunur və keçid matrisa elementi elektromaqnit sahəsinin $\vec{A}(\vec{r}, t)$ dalğa funksiyasının birinci dərəcəsi ilə mütənasib idi. Kvant mexanikasında iki fotonun iştirakı ilə kədən prosesləri də tədqiq etmək olar. Belə proseslər iki fotonun udulması, iki fotonun buraxılması və ya birinin udulub, digərinin buraxılması ilə nəticələnə bilər. Nümunə üçün biz axırıncı növ prosesin, yəni fotonun atom sistemindən səpilməsi prosesi üzərində dayanacağıq. Bu proses həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasında (50.25) həyəcanlanma operatorunun yalnız

$$\tilde{V} = \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 \quad (58.1)$$

həddi ilə təsvir olunur. (50.54) ifadəsi əsasında \vec{A} aşağıdakı kimi yazaq:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}_1(\vec{r}, t) + \vec{A}_2^+(\vec{r}, t), \quad (58.2)$$

burada

$$\begin{aligned} \vec{A}_1 &= \sum_{k\lambda} \frac{\vec{a}^\lambda}{\sqrt{2\omega L^3}} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} C_{k\lambda} \\ \vec{A}_2^+ &= \sum_{k'\lambda'} \frac{\vec{a}^{+\lambda'}}{\sqrt{2\omega' L^3}} e^{+i\omega' t - i\vec{k}'\vec{r}} C_{k'\lambda'}^+ \end{aligned} \quad (58.3)$$

$C_{k\lambda}$ fotonun udulma, $C_{k\lambda}^+$ buraxılma operatorudur. (58.2)-ə əsasən \tilde{V} operatorunu

$$\tilde{V} = \frac{e^2}{2mc^2} (\vec{A}_1 \vec{A}_1 + \vec{A}_1 \vec{A}_2^+ + \vec{A}_2^+ \vec{A}_1 + \vec{A}_2 \vec{A}_2) \quad (58.4)$$

kimi yazmaq olar. Burada birinci hədd iki fotonun udulması, dördüncü hədd - iki fotonun buraxılması, ikinci və üçüncü hədlər isə fotonlardan birinin udulub, digərinin buraxılması proseslərini təsvir edir.

Kvant nəzəriyyəsində fotonların atom-sisteminə səpilməsi prosesi iki ardıcıl prosesin nəticəsi kimi baxılır: şüalanmanın təsiri altında olan atom-sistemi əvvəl düşən fotonu udur, sonra səpilən fotonu buraxır, və ya əksinə, əvvəl səpilən fotonu buraxır, sonra isə düşən fotonu udur. Ona görə də səpilmə prosesi üçün

$$\check{V} = \frac{e^2}{2mc^2} (\bar{A}_1 \bar{A}_2^+ + \bar{A}_2^+ A_1) \quad (58.5)$$

şəklində olur.

Qarşılıqlı təsirdən əvvəl (sistemin başlanğıc halında) elektronun enerjisini E_1 , impulsunu \vec{p}_1 , fotonun enerjisini $\hbar\omega_1$, impulsu $\hbar\vec{k}_1$, qarşılıqlı təsirdən sonra isə səpilən (son halda olan) zərrəciklərin – elektronun enerjisini E_2 , impulsunu \vec{p}_2 , fotonun enerjisini $\hbar\omega_2$, impulsunu $\hbar\vec{k}_2$ kimi işarə edək. Başlanğıc halda olan zərrəciklərin enerji və impulsu qabaqcadan verilmiş olur, yəni onların qiyməti fiksə edilir. Qarşılıqlı təsir prosesi idarə oluna bilmədiyindən son halda olan zərrəciklərin enerji və impulsunun qiyməti haqda qabaqcadan müəyyən fikir söyləmək mümkün olmur. Ona görə də səpildəndən sonra zərrəciyin impulsunun (enerji impulsdan asılıdır) $(0, \infty)$ intervalında qiymət alma ehtimalı hesablanır, başqa sözlə səpilən zərrəciklərin bir-birindən asılı olmayan dinamik xarakteristikaları (impulsu, polyarlaşması) üzrə cəm aparılır. Dediklərimizdən çıxır ki, udulan foton üçün

$$\bar{A}_1 = \sum_{\lambda_1} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_1 L^3}} \bar{a}_0^{\lambda_1} e^{-i\omega_1 t + i\vec{k}_1 \vec{r}} C_{k_1 \lambda_1} \quad (58.6)$$

buraxılan foton üçün isə

$$\bar{A}_2^+ = \sum_{\lambda_2 k_2} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_2 L^3}} \bar{a}_0^{\lambda_2} e^{i\omega_2 t - i\vec{k}_2 \vec{r}} C_{k_2 \lambda_2}^+ \quad (58.7)$$

götürülməlidir. Burada $\lambda_1, \lambda_2 (\pm 1)$ fotonların polyarlaşma istiqamətini göstərir.

İşıq adətən maddələrdən səpilir. Lakin şüalanmanın λ dalğa uzunluğu atomun ölçülərindən kifayət qədər böyük olduqda, səpilmə prosesində atom bütövlükdə iştirak edir. λ atomun ölçüləri tərtibində olduqda isə səpilmə prosesində atomun elektronları da iştirak edə bilər. Atomun nüvə ilə zəif bağlanmış elektronları səpilmədə iştirak etdikdə düşən foton enerjisinin bir hissəsini elektrona verib, onu atomdan qopararaq sərbəstləşdirir, özü isə

hərəkət istiqamətini dəyişərək səpilir. Belə səpilməyə fotonun sərbəst elektronundan səpilməsi kimi baxılır və **Kompton effekt** adlanır.

Belə səpilmədə atom bütövlüklə də iştirak edə bilər. Atom fotonun çox ağır olduğu üçün foton atomdan elastiki səpilir, yəni, səpilmə zamanı fotonun enerjisi dəyişmir, yalnız hərəkət istiqamətini dəyişir (impuls qiymətcə sabit qalıb, istiqamətcə dəyişilir). Atomun elektronlarından səpilən fotonlar isə enerjisinin bir hissəsini atomun elektronuna verdiyinə görə, səpilən fotonun enerjisi düşən fotonun enerjisindən kiçik olur ($h\omega_2 < h\omega_1$). Deməli düşən işıq monoxromatik olduqda, səpilən işığın spektrində, düşən işığın tezliyinə uyğun spektral xətdən əlavə uzun dalğalar tərəfə yerini dəyişmiş ikinci spektral xətt müşahidə olunmalı və atomun Z sıra nömrəsi artdıqca yerdəyişmiş xəttin intensivliyi azalmalıdır, çünki, bu halda fotonun atomdan elektron qoparması prosesi çətinləşir və atomların əksəriyyəti səpilmədə bütövlükdə iştirak edir. Qeyd edək ki, dediklərimiz tam mənası ilə təcrübədə təsdiq olunur.

Kompton effektdə, beləliklə, elektronun başlanğıc və son halları onun sərbəst halları olur. Sərbəst halda olan zərrəciyin dalğa funksiyası isə birinci yaxınlaşmada müstəvi dalğa şəklində (atomun Kulon sahəsinin ekranlayıcı təsiri kiçikdir) götürülə bilər. Elektronun başlanğıc stasionar halının dalğa funksiyasını Ψ_1 , son stasionar halınınkı isə Ψ_2 kimi işarə etsək,

$$\begin{aligned}\Psi_1(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\vec{p}_1\vec{r} - i\varepsilon_1 t} \\ \Psi_2(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_{p_2} e^{-i\vec{p}_2\vec{r} + i\varepsilon_2 t}\end{aligned}\quad (58.8)$$

olar, burada dalğa funksiyaları həcmə normalanmış, elektronların enerjisi $\varepsilon_1 = \frac{E_1}{\hbar}$ və $\varepsilon_2 = \frac{E_2}{\hbar}$, impulsları isə $\vec{P}_1 = \frac{\vec{p}_1}{\hbar}$ və $\vec{P}_2 = \frac{\vec{p}_2}{\hbar}$ kimi işarə olunmuşdur. (58.6), (58.5), (58.7) və (58.8)-ə əsasən V_{21}^o - keçid matrisa elementi

$$\begin{aligned}V_{21}^o &= \int \Psi_2^+ \tilde{V} \Psi_1(d\vec{r}) = \frac{e^2}{2mc^2} \int \Psi_2^+ (\vec{A}_1 \vec{A}_2^+ + \vec{A}_2^+ \vec{A}_1) \Psi_1(d\vec{r}) = \\ &= \frac{e^2}{2mc^2} \frac{2 \cdot 2\pi\hbar c}{L^6} \sum_{p_2 k_2 \lambda_2} \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}} (\vec{a}^{o+\lambda_2} \vec{a}^{o\lambda_1}) \int e^{i(\vec{p}_1 + \vec{k}_1 - \vec{p}_2 - \vec{k}_2)\vec{r}}(d\vec{r}) C_{k_1 \lambda_1} C_{k_2 \lambda_2}^+, \end{aligned}$$

hərəkət məhdud fəzada baş verdikdə zərrəciyin impulsu diskret dəyişdiyindən

$$\frac{1}{L^3} \int e^{i(\vec{P}_1 + \vec{k}_1 - \vec{P}_2 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} d\vec{r} = \delta_{\vec{P}_1 + \vec{k}_1, \vec{P}_2 + \vec{k}_2}$$

kimi δ -simvola bərabər olar. P_2 - üzrə cəmi δ -simvol vasitəsilə götürsək,

$$V_{21}^o = \frac{2\pi\hbar e^2}{mc^2 L^3} \sum_{k_2 \lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}} (\vec{a}^{-o\lambda_2} \vec{a}^{o\lambda_1}) C_{k_1 \lambda_1} C_{k_2 \lambda_2}^+ \quad (58.9)$$

və

$$\vec{P}_1 + \vec{k}_1 = \vec{P}_2 + \vec{k}_2 \quad (58.10)$$

impulsun saxlanma qanununu alırıq.

V_{21}^o matrisa elementinin qiymətini (50.27)-də yazandan sonra $\vec{k}_2', \lambda_1', \lambda_2'$ üzrə ortaya çıxan yeni cəmləri $C_{k_1 \lambda_1}$ və $C_{k_2 \lambda_2}^+$ operatorlarının ödədiyi (50.65) bərabərliklərinin köməyiylə götürsək,

$$dW_{2,1} = \frac{\hbar e^4 (2\pi)^3}{m^2 c^3 L^3} \sum_{\vec{k}_2 \lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{k_1 k_2} |\vec{a}^{-o\lambda_2} \vec{a}^{o\lambda_1}|^2 \delta(\varepsilon_1 + \omega_1 - \varepsilon_2 - \omega_2) \quad (58.11)$$

olar. Burada

$$\frac{1}{L^3} \sum_{k_2} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}_2$$

keçidini edəndən sonra $dW_{2,1}$ ehtimalını düşən fotonların ehtimal cərəyanı

sıxlığına (yəni $\frac{c}{L^3}$ -yə) bölməklə effektiv kəsiyə keçək

$$d\sigma = \frac{\hbar e^4}{m^2 c^3} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \int \frac{k_2^2 dk_2 d\Omega}{k_1 k_2} |\vec{a}^{-o\lambda_2} \vec{a}^{o\lambda_1}|^2 \delta(\varepsilon_1 + \omega_1 - \varepsilon_2 - \omega_2). \quad (58.12)$$

Sadəlik xətirinə hesabətı başlanğıc elektronla bağlı ($\vec{P}_1 = 0$) olan koordinat sistemində aparaq.

(58.12)-yə daxil olan δ -funksiya enerjinin

$$\varepsilon_1 + \omega_1 = \varepsilon_2 + \omega_2$$

və ya

$$\frac{\hbar^2 P_1^2}{2m} + \hbar ck_1 = \frac{\hbar^2 P_2^2}{2m} + \hbar ck_2 \quad (\omega = ck). \quad (58.13)$$

saxlanma qanununa gətirir. $\vec{P}_1 = 0$ sistemində impulsun (58.10) və enerjinin (58.13) saxlanma qanunları

$$\begin{aligned} \vec{k}_1 &= \vec{P}_2 + \vec{k}_2 \\ \hbar ck_1 &= \frac{\hbar^2 P_2^2}{2m} + \hbar ck_2. \end{aligned} \quad (58.14)$$

şəklinə düşür.

k_2 üzrə inteqralı δ -funksiya vasitəsilə götürmək olar. δ -funksiya k_2 -nin mürəkkəb funksiyası olduğundan, onun

$$\int f(x)\delta(\varphi(x))dx = \int \sum_s \frac{\delta(x-x_s)}{|\varphi'(x)|_{x=x_s}} f(x)dx$$

xəssəsindən istifadə etmək olar, burada x_s -lər $\varphi(x) = 0$ tənliyinin kökləridir. Bizim halımızda

$$\varphi(k_2) = \hbar ck_1 - \hbar ck_2 - \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)^2,$$

olduğundan

$$\frac{\partial \varphi}{\partial k_2} = \hbar c \left[1 + \frac{\hbar}{mc} (k_2 - k_1 \cos \theta) \right]$$

bərabər olar. Onda

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{k_2}{k_1} [1 + A(k_2 - k_1 \cos \theta)]^{-1} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \int |\vec{a}^{\sigma+\lambda_2} \vec{a}^{\sigma\lambda_1}|^2 d\Omega. \quad (58.15)$$

olar, burada $A = \frac{\hbar}{mc}$ – Kompton dalğa uzunluğu adlanır.

İndi də fotonların polyarlaşmaları üzrə cəm götürək. Düşən zərrəcik (foton) üçün mümkün olan istiqamətlərdən hər hansı biri verilmiş qəbul olunur. Səpilən zərrəciyin polyarlaşma istiqaməti isə adətən məlum olmur. Ona görə də, ehtimal nəzəriyyəsinin tələblərinə əsasən başlanğıc halda olan zərrəciklərin polyarlaşma (və ya spin) halları üzrə orta qiymət, son halda olan zərrəciklərin polyarlaşma istiqamətləri üzrə isə cəm götürülür.

Bu əməliyyatları etmək üçün fotonun z oxu boyunca $(\vec{k} \parallel z)$ hərəkət etdiyini, x və y oxları boyunca isə polyarlaşdığını fərz edək. $\vec{n}, \vec{\beta}$ və $[\vec{n} \vec{\beta}]$ ortvektorlarının uyğun olaraq koordinat oxları üzrə yönəldiyini qəbul edərək (bax şəkil 27) dairəvi polyarlaşmış (spini hərəkəti istiqamətində və ya əksinə yönəlmiş) fotonun \vec{a}^λ polyarlaşma vektorunu

$$\vec{a}^\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{\beta} + i\lambda[\vec{n} \vec{\beta}]) \quad (58.16)$$

şəklində seçmək olar. Vektor hesabından istifadə edərək asanlıqla göstərmək olar ki,

$$\begin{aligned} \vec{a}^{+\lambda} \vec{a}^{-\lambda} &= 1, \quad \sum_{\lambda} \vec{a}^{+\lambda} \vec{a}^{-\lambda} = 2, \\ \sum_{\lambda} (\vec{a}^{\sigma+\lambda} \vec{d})(\vec{a}^{\sigma\lambda} \vec{b}) &= (\vec{a} \vec{b}) - (\vec{n} \vec{d})(\vec{n} \vec{b}), \end{aligned} \quad (58.17)$$

olar, burada \vec{d} və \vec{b} – ixtiyar vektorlardır. Bu ifadələrdən istifadə etsək,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} (\vec{a}_1^{\sigma+\lambda_1} \vec{a}_2^{\sigma\lambda_2})(\vec{a}_1^{\sigma\lambda_1} \vec{a}_2^{\sigma+\lambda_2}) &= \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \{ (\vec{a}_2^{\sigma+\lambda_2} \vec{a}_2^{\sigma\lambda_2}) - (\vec{n} \vec{a}_2^{\sigma+\lambda_2})(\vec{a}_2^{\sigma\lambda_2} \vec{b}) \} = \\ &= \frac{1}{2} \{ 2 - 1 + (\vec{n}_1 \vec{n}_2)(\vec{n}_1 \vec{n}_2) \} = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta), \end{aligned} \quad (58.18)$$

burada $\vec{n}_1 = \frac{\vec{k}_1}{|\vec{k}_1|}$, $\vec{n}_2 = \frac{\vec{k}_2}{|\vec{k}_2|}$, θ – səpilmə bucağıdır. (58.18)-i (58.15)-də

yerinə yazsaq, səpələn fotonların bucaqlara görə paylanması üçün

$$d\sigma = \frac{r_o^2 k_2}{2 k_1} \cdot \frac{(1 + \cos^2 \theta) d\Omega}{1 + \Lambda(k_2 - k_1 \cos \theta)} \quad (58.19)$$

ifadəsi alınır. Qeyri-relyativistik oblastda təxminən $k_1 \approx k_2 \approx k$ hesab edib, Λk -nin kifayət qədər kiçik kəmiyyət olduğunu nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} [1 + \Lambda(k_2 - k_1 \cos \theta)]^{-1} &\approx 1 - \Lambda k(1 - \cos \theta), \\ d\sigma &= \frac{r_o^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) [1 - \Lambda k(1 - \cos \theta)] d\Omega \end{aligned} \quad (58.20)$$

alırıq. Bucaqlar üzrə inteqral alındıqdan sonra

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_o^2 (1 - \Lambda k) = \sigma_T (1 - \Lambda k), \quad (58.21)$$

burada σ_T – Tomson effektiv kəsiyi adlanır və o, klassik nəzəriyyədə fotonların elektronlardan səpilməsi üçün ilk dəfə ingilis alimi Tomson tərəfindən alınmışdı. (58.21)-də ikinci hədd, səpələn elektronun kifayət qədər kiçik sürətində σ -ya olan düzəlişdir. Fotonun enerjisi (hck) artdıqca səpilmənin effektiv kəsiyi düzəliş hesabına kiçilmiş olur.

§59. Dispersiyanın kvant nəzəriyyəsi

Atomar sistemin elektromaqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsiri müxtəlif fiziki hadisələrin baş verməsinə gətirir. Əvvəlki paraqraflarda bu növ proseslərdən şüaburaxma, şüaudma, fotoeffekt və Kompton effekt proseslərini təhlil etmişdik. İndi də elektromaqnit dalğalarının atomar sistemlərdən səpilmə proseslərindən biri olan dispersiya (ışığın mühitdə səpilməsi) nəzəriyyəsi ilə tanış olaq.

Düşən elektromaqnit dalğasının λ dalğa uzunluğu optik qəfəsin a sabitindən xeyli böyük olduqda ($\lambda \gg a$), səpilmə prosesi difraksiya, atomun ölçülərindən böyük olduqda ($\lambda \gg a_{at}$) dispersiya, atomun ölçüləri tərtibində olduqda ($\lambda \sim a_{at}$) – Kompton səpilməsi, ondan da xeyli kiçik ($\lambda \ll a_{at}$) γ -şüaların səpilməsi adlanır.

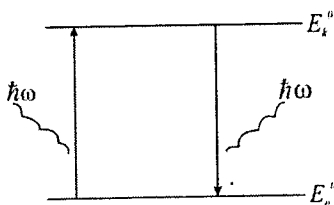
Beləliklə, fərz edək, ki, mühitdə qarşılıqlı təsirdə olan elektromaqnit sahəsinin intensivliyi atomun daxilində olan sahənin intensivliyindən xeyli

kiçik, dalğa uzunluğu isə $\lambda \gg a_{at}$ şərtini ödəyir. Həyəcanlanmamış atomun istənilən iki stasionar halının enerjilərini E_n^o və E_m^o ilə işarə edək. Onda səpilmə prosesi aşağıdakı kimi başa düşülür: Tezliyi $\omega_{mm} = \frac{E_m^o - E_n^o}{\hbar}$ (keçid tezliyi) tərtibində olan elektromaqnit dalğası (ışıq) atomar sistemin üzərinə düşdükdə E_n^o stasionar halında olan sistem (atom) bu şüanı udaraq E_m^o stasionar halına keçir, sonra isə həmin tezlikli şüanı şüalandıraraq, yenidən E_n^o halına qaydır. Bu mexanizmdə gedən səpilmə prosesi – *elastik səpilmə* və ya *dispersiya* adlanır (şəkil 30).

Səpilmə prosesi ilə yanaşı mühit düşən şüaların müəyyən bir qismini uda da bilər. Biz iki prosesi birgə təsvir edən ümumi düsturu yazmaqla kifayətlənib, alınan nəticənin analizini, yalnız səpilmə prosesinin baş verdiyi baxımdan aparacağıq. Mühitin dielektrik olduğunu fərz edək. Onun sındırma əmsalı Maksvel nəzəriyyəsindən

$$n = \sqrt{\varepsilon}, \quad (59.1)$$

kimi təyin olunur (maqnit nüfuzluğu $\mu=1$ hesab olunur), ε – mühitin dielektrik nüfuzluğudur. Dispersiya nəzəriyyəsində öyrənilən proseslərdən biri də n -in və ya ε -nin düşən şüanın tezliyindən asılılığını tapmaqdan ibarətdir. Bunu işığın dielektrik mühitdə səpilməsinin tam kvant nəzəriyyəsini verməklə də etmək olar. Lakin işığın atomar sistemlərdən səpilməsi prosesi, onun udulma və buraxılma proseslərindən fərqli olaraq (birinci tərtib effektlər) ikinci tərtib effektdir. Onun ehtimalını hesablamaq üçün həyəcanlanma nəzəriyyəsini ikinci yekunlaşmasından istifadə etmək lazımdır. Bu, kifayət qədər böyük həcmli hesablamalara gətirir. Araşdırmalar göstərir ki, eyni nəticələrə həyəcanlanma nəzəriyyəsini birinci yaxınlaşması vasitəsilə də gəlmək olar. Biz bu ikinci yolla gedəcəyik.



Şəkil 30. İşığın elastiki səpilməsinə (dispersiya) uyğun keçidlər

Dielektrik mühitin \vec{D} induksiya vektoru elektromaqnit sahəsinin $\vec{\mathcal{E}}$ intensivlik vektoru ilə

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}} + 4\pi \vec{P} \quad (59.2)$$

kimi təyin olunur, burada \vec{P} – mühitin polyarlaşma vektorudur (vahid həcmnin elektrik momenti). Öz növbəsində o, $\vec{\mathcal{E}}$ ilə mütənasibdir:

$$\vec{P} = \alpha \vec{\mathcal{E}} \quad (59.3)$$

α – mühitin polyarlaşma əmsalı adlanır. Mühitin elektrik polyarlaşması ayrı-ayrı atomların polyarlaşması ilə təyin olunduğundan atomun xarici sahənin təsiri nəticəsində yaranan elektrik momenti də $\vec{\mathcal{E}}$ ilə mütənasib olar:

$$\vec{d} = \beta \vec{\mathcal{E}} \quad (59.4)$$

β – atomun polyarlaşma əmsalı adlanır. Vahid həcmdəki atomların elektrik vektorlarının hamısının eyni bir istiqamətdə yönəldiyini qəbul etsək,

$$\alpha = \beta N, \quad (59.5)$$

olar. N – vahid həcmdəki atomların sayıdır. (59.1)-(59.5) münasibətlərindən

$$\varepsilon = n^2 = 1 + 4\pi\alpha = 1 + 4\pi N\beta. \quad (59.6)$$

alınır. Beləliklə, məsələ β -nın xarici sahənin ω -tezliyindən asılılığının hesablanmasına gətirilir.

Klassik nəzəriyyəyə görə atomda optik elektron $\vec{F} = -k\vec{r}$ kvazielastik qüvvənin təsiri altında hərəkət edir. Belə atom zamana görə ω tezliyi ilə periodik dəyişən xarici elektromaqnit sahəsinə düşdükdə, onun optik elektronu həmin ω tezliyi ilə rəqsi hərəkət edər (fırlanma hərəkətinin hər hansı müstəviyə proyeksiyası rəqsi hərəkət olar).

Belə elektronun Nyuton hərəkət tənliyi

$$m\ddot{\vec{r}} = -k\vec{r} - e\vec{\mathcal{E}} \quad (59.7)$$

olar. Burada hərəkət qeyri-relyativistik ($v \ll c$) olduğundan maqnit sahəsinin v^2/c^2 tərtibli təsir qüvvəsi nəzərə alınmamışdır.

Elektromaqnit sahəsinin $\vec{\mathcal{E}}$ intensivlik vektoru zamana görə periodik dəyişdiyindən $\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 e^{-i\omega t}$ elektronun da radius-vektoru zamana görə $\vec{r} = \vec{r}_0 e^{-i\omega t}$ qanunu ilə dəyişər. Onda (59.7) tənliyi

$$(\omega_0^2 - \omega^2)\vec{r} = \frac{e}{m}\vec{\mathcal{E}}_0 \quad (59.8)$$

şəklinə düşər, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ – elektronun məxsusi tezliyi adlanır. Buradan \vec{r} -i tapıb, atomun $\vec{d} = -e\vec{r}$ elektrik dipol momentinin ifadəsində yerinə yazsaq,

$$\vec{d} = \frac{e^2}{m} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \vec{\mathcal{E}}_0 = \beta \vec{\mathcal{E}}_0$$

olar. Beləliklə, atomun polyarlaşma əmsalı üçün

$$\beta = \frac{e^2}{m} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (59.9)$$

ifadəsi alınır.

Atomda məxsusi tezlikləri $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_k, \dots$ olan elektronlar varsa, onun polyarlaşma əmsalı

$$\beta = \frac{e^2}{m} \sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2}, \quad (59.10)$$

olar. Burada f_k – məxsusi tezliyi ω_k olan elektronların sayıdır.

(59.10) düsturu β -nın, yəni (59.6)-ya əsasən mühitin n sındırma əmsalının, elektromaqnit sahəsinin ω tezliyindən asılılıq xarakterini düzgün verirsə də, təcrübədə f_k üçün vahiddən kiçik qiymət alınır. Klassik nəzəriyyənin bu çətinliyi kvant nəzəriyyəsində həll olunmuş və dispersiya hadisəsində təcrübədə müşahidə olunmuş bütün faktlar öz izahını tapmışdı.

İndi də dispersiyanın kvant nəzəriyyəsinin şərhinə keçək. Fərz edək ki, tezliyi ω olan monoxromatik işıq dielektrik mühitin atomlarından səpilir. İşıq dalğasının dəyişən sahəsinin təsiri altında olan hər bir atomda əlavə \vec{d} elektrik momenti yaranır. Dəyişən elektromaqnit sahəsi ilə atom arasındakı qarşılıqlı təsir operatoru (47.16) ilə verilir:

$$\check{V}(t) = -\frac{e}{mc} (\vec{A}\vec{p})$$

burada $\vec{A}(\vec{r}, t)$ – sahənin vektor potensialı, $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ – impuls operatorudur. Proses səpilmə prosesi olduğu üçün atoma həm düşən və həm də səpilən dalğa təsir etdiyindən, hər ikisinin tezliyi və amplitudu bərabər qəbul olunur, yəni

$$A(\vec{r}, t) = \vec{a}e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}}$$

kimi kötürülür. Maksvel nəzəriyyəsinə $\vec{V}(t)$ -in bilavasitə $\vec{\mathcal{E}}$ intensivlik vektoru ilə də ifadə etmək olar:

$$\vec{V}(t) = \frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_0\vec{p})\left(e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} - e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}}\right) \quad (59.11)$$

(İşıq dalğası üçün $\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t}$ olduğundan).

Sistemin

$$\check{H} = \check{H}_0 + \check{V}(t) \quad (59.12)$$

Hamilton operatoru zamandan asılı olduğundan, Şredinger tənliyi

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\check{H}_0 + \check{V}(t))\Psi(\vec{r}, t). \quad (59.13)$$

Burada \check{H}_0 – xarici sahə olmadığında (yəni həyəcanlanmamış) sistemin Hamilton operatorudur. Baxılan anda mühitin bütün həyəcanlanmamış atomlarının hər hansı E_n^o halında olduğunu qəbul etsək, o halın $\Psi_n^o(\vec{r}, t)$ dalğa funksiyası

$$\check{H}_0\Psi_n^o(\vec{r}, t) = E_n^o\Psi_n^o(\vec{r}, t). \quad (59.14)$$

tənliyini ödəyər.

Məqsədimiz xarici həyəcanlanma daxil edildikdə kvant sistemin E_n^o stasionar halının dalğa funksiyasının necə dəyişdiyini təyin etməkdən ibarətdir. Qarşılıqlı təsir operatoru $V(t)$ –nin E_n^o -a verdiyi əlavə kifayət qədər kiçik olduğundan (59.13) tənliyini həyəcanlanma metodu vasitəsilə həll etmək olar. Onun həllini

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \Psi_n^0(\vec{r}, t) + \Psi_n^{(1)}(\vec{r}, t). \quad (59.15)$$

kimi axtarılabilir. Bunu (59.13) yazıb, $\Psi_n^0(\vec{r}, t)$ üçün (59.14) tənliyinin ödədiyini və $\check{V}(t)\Psi_n^{(1)}(\vec{r}, t)$ həddinin ikinci tərtib kiçik kəmiyyət olduğunu nəzərə alsaq,

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \Psi_n^{(1)} = \check{V}(t) \Psi_n^0 \quad (59.16)$$

alırıq. Yuxarıda dediklərimizə əsasən, baxılan halda şüanın λ dalğa uzunluğunun atomar sistemin a ölçülərindən xeyli böyük (yəni $e^{ik\vec{r}} \approx 1$ – dipol yaxınlaşması) olduğunu qəbul edək. Bu yaxınlaşmada (59.11)-dən $V(t)$ -nin ifadəsini (59.16)-da yazsaq,

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \right) \Psi_n^{(1)} = \frac{ie}{m\omega} (\vec{\mathcal{E}}_0 \check{\vec{p}}) (e^{-i(\omega_0 + \omega)t} - e^{-i(\omega_0 - \omega)t}) \Psi_n^0(\vec{r}), \quad (59.17)$$

burada $\Psi_n^o(\vec{r}, t) = \Psi_n^o(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^o t} = \Psi_n^o(\vec{r}) e^{-i\omega_0 t}$ olduğu nəzərə alınmışdır $\left(\omega_0 = \frac{E_n^o}{\hbar} \right)$.

(59.17) tənliyinin sağ və sol tərəflərinin zamana görə dəyişmə xarakterinin eyniliyi tələbindən (59.17)-nin həllini

$$\Psi_n^1 = u_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\omega_0 + \omega)t} + v_n(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}(\omega_0 - \omega)t} \quad (59.18)$$

şəklində axtaraq. (59.18)-t (59.17)-də yazıb, eyni eksponensial vuruqlu hədlərin bərabərliyindən

$$\begin{aligned} [\hbar(\omega_0 + \omega) - \check{H}_0] u_n(\vec{r}) &= \frac{ie}{m\omega} (\vec{\mathcal{E}}_0 \check{\vec{p}}) \Psi_n^0(\vec{r}) \\ [\hbar(\omega_0 - \omega) - \check{H}_0] v_n(\vec{r}) &= -\frac{ie}{m\omega} (\vec{\mathcal{E}}_0 \check{\vec{p}}) \Psi_n^0(\vec{r}). \end{aligned} \quad (59.19)$$

tənlikləri alınır. Sistemin istənilən funksiyası \check{H}_0 operatorunun tam sistem

təşkil edən Ψ_n^0 məxsusi funksiyaları ilə ifadə edilə bilər:

$$\begin{aligned} u_n(\vec{r}) &= \sum_k A_{nk} \Psi_k^0(\vec{r}) \\ v_n(\vec{r}) &= \sum_k B_{nk} \Psi_k^0(\vec{r}). \end{aligned} \quad (59.20)$$

Bunları (59.19)-da yazıb, (59.14)-ü nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} \sum_k [\hbar(\omega_0 + \omega) - \omega_k] A_{nk} \Psi_k^0 &= \frac{ie}{m\omega} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{p}) \Psi_n^0 \\ \sum_k [\hbar(\omega_0 - \omega) - \omega_k] B_{nk} \Psi_k^0 &= -\frac{ie}{m\omega} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{p}) \Psi_n^0. \end{aligned} \quad (59.21)$$

alınır. Bu tənlikləri sol tərəfdən $\Psi_{k'}^{0*}(\vec{r})$ -ə vurub, bütün fəza üzrə inteqrallaşdırırıq. $\int \Psi_{k'}^{0*} \vec{p} \Psi_k^0(d\vec{r}) = \vec{p}_{k'k}$ və $\int \Psi_{k'}^{0*} \Psi_k^0(d\vec{r}) = \delta_{k'k}$ götürüb, $\delta_{k'k}$ - simvolu vasitəsilə cəmi alsaq,

$$\begin{aligned} \hbar(\omega_{nk} + \omega) A_{nk} &= \frac{ie}{m\omega} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{p}_{kn}), \\ \hbar(\omega_{nk} - \omega) B_{nk} &= -\frac{ie}{m\omega} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{p}_{kn}^*). \end{aligned} \quad (59.22)$$

Burada A_{nk} və B_{nk} üçün

$$\begin{aligned} A_{nk} &= \frac{ie(\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{p}_{nk})}{\hbar m \omega (\omega_{nk} + \omega)}, \\ B_{nk} &= -\frac{ie(\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{p}_{nk}^*)}{\hbar m \omega (\omega_{nk} - \omega)}. \end{aligned} \quad (59.23)$$

ifadələri alınır. İmpuls operatorunun

$$\vec{p}_{kn} = im\omega_{kn} \vec{r}_{kn}$$

elektrik dipol momentinin $\vec{d} = -e\vec{r}$ ifadələrindən istifadə edib, $\omega_{kn} = -\omega_{nk}$ götürsək,

$$A_{nk} = \frac{\omega_{nk}}{\hbar\omega(\omega_{nk} + \omega)} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{kn}); \quad B_{nk} = -\frac{\omega_{nk}}{\hbar\omega(\omega_{nk} - \omega)} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{kn}), \quad (59.24)$$

olar. A_{nk} və B_{nk} -nin bu qiymətlərini (59.20)-də yazıb, $u_n(\vec{r})$ və $v_n(\vec{r})$ üçün alınmış ifadələri (59.18)-də nəzərə alsaq, xarici həyəcanlanmanın təsiri altında olan kvant sisteminin $\Psi_n(\vec{r}, t)$ funksiyası üçün (59.15)-dən

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \left\{ \Psi_n^0(\vec{r}) - \sum_k \frac{\omega_{kn}}{\hbar\omega(\omega_{nk} + \omega)} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{kn}) e^{-i\alpha t} - \sum_k \frac{\omega_{kn}}{\hbar\omega(\omega_{nk} - \omega)} (\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{kn}) e^{i\alpha t} \right\} e^{-i\omega_n t}. \quad (59.25)$$

ifadəsi alınır.

Yəqin ki, dəqiq rezonans üçün $\Psi_n(\vec{r}, t)$ -nin (59.25) ifadəsindən istifadə etmək olmaz, çünki $\omega_{nk} = \pm\omega$ halında A_{nk} və B_{nk} əmsallarından biri sonsuz olur və dalğa funksiyasının sonluluq şərti pozulur.

İndi də xarici sahənin təsiri nəticəsində atomun $\Psi_n^0(\vec{r}, t)$ halında yaranan əlavə elektrik dipol momentinin birinci yaxınlaşmada qiymətini hesablayaq. Sahənin təsirindən sonra Ψ_n^0 funksiyası (59.25) ilə verilmiş $\Psi_n(\vec{r}, t)$ -yə çevrilir.

$\Psi_n(\vec{r}, t)$ – halında atomun dipol momenti

$$\vec{d}_{nn} = \int \Psi_n^*(\vec{r}, t) \vec{d} \Psi_n(\vec{r}, t) (d\vec{r})$$

kimi təyin olunur. $\Psi_n^*(\vec{r}, t)$ və $\Psi_n(\vec{r}, t)$ funksiyalarını burada (59.25)-dən öz ifadələri ilə əvəz edəndən sonra sahənin $\vec{\mathcal{E}}_0$ intensivlik vektorunun birinci dərəcəsi ilə mütənəsb hədlərlə kifayətlənək, onda

$$\vec{d}_{nn}(t) = \vec{d}_{nn}^o - \frac{e^{-i\alpha t}}{2\hbar} \sum_k \left\{ \frac{(\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{kn}^*) \vec{d}_{kn}}{\omega_{nk} + \omega} \cdot \frac{\omega_{kn}}{\omega} + \frac{(\vec{\mathcal{E}}_0 \vec{d}_{kn}) \vec{d}_{kn}^*}{\omega_{nk} - \omega} \cdot \frac{\omega_{kn}}{\omega} \right\} + k.c.$$

burada \vec{d}_{nn}^o – xarici sahəsiz atomun malik olduğu sabit elektrik dipol mo-

mentidir. Bu sabiti sıfır qəbul edib, yəni onu \vec{d}_{nn} -nin ölçü başlanğıcı götürüb, düşən və səpələn işıqın mühitə göstərdiyi təsirin eyni intensivliyə malik olduğu qəbul edildikdə, yaranmış $\vec{d}_{nn}(t)$ momentin komponentləri üçün

$$\vec{d}_{nn}^j(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_k \left\{ \frac{\vec{d}_{kn}^{*i} \vec{d}_{kn}^j}{\omega_{nk} + \omega} \cdot \frac{\omega_{kn}}{\omega} + \frac{\vec{d}_{kn}^i \vec{d}_{kn}^{*j}}{\omega_{nk} - \omega} \cdot \frac{\omega_{nk}}{\omega} \right\} \mathcal{E}_0^i e^{-i\omega t} \quad (59.26)$$

ifadəsini alırıq. Burada $i, j = 1, 2, 3$ -dir. Bunu

$$d_{nn}^j(t) = \beta_{ji} \mathcal{E}_i \quad (59.26')$$

kimi yazsaq, (59.4)-ə əsasən,

$$\beta_{ij} = \beta_{ji} = -\frac{1}{\hbar} \sum_k \left\{ \frac{\vec{d}_{kn}^{*i} \vec{d}_{kn}^j}{\omega_{nk} + \omega} \cdot \frac{\omega_{kn}}{\omega} + \frac{\vec{d}_{kn}^i \vec{d}_{kn}^{*j}}{\omega_{nk} - \omega} \cdot \frac{\omega_{nk}}{\omega} \right\} \quad (59.27)$$

baxılan mühitin atomunun polyarlaşma əmsalı olur. (59.5)-in yazıldığı yaxınlaşmada mühitin polyarlaşma əmsalı

$$\alpha_{ij} = N\beta_{ij} \quad (59.28)$$

olar. (59.27) və (59.28)-dən görünür ki, bu iki əmsal

$$\|\beta_{ij}\| = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \end{pmatrix} \quad (59.29)$$

kimi ikinci rəq simmetrik tenzordur.

Dipol momenti komponentlərinin $d_{kn}^i = d_{nk}^{i*}$ xassəsi və bir-birilə kommutasiya etməsi əsasında (59.27) ifadəsini sadələşdirək. Matrisaların hasili qaydasına müraciət etsək,

$$\sum_k d_{kn}^i d_{kn}^{*j} = \sum_k d_{nk}^j d_{kn}^i = (d^i d^j)_{nn}$$

və

$$\sum_k \frac{d_{kn}^i d_{nk}^j}{\hbar \omega} - \sum_k \frac{d_{nk}^j d_{kn}^i}{\hbar \omega} = 0$$

olar. Bu axırıncı həddi (59.27)-yə əlavə edib, (59.27)-nin birinci həddində $\omega_{kn} = -\omega_{nk}$ əvəzini apararaq,

$$\beta_{ij} = \frac{1}{\hbar} \sum_k \left(\frac{\bar{d}_{nk}^i \bar{d}_{kn}^j}{\omega_{nk} + \omega} \cdot \frac{\omega_{nk}}{\omega} - \frac{\bar{d}_{nk}^i \bar{d}_{kn}^j}{\omega} \right) - \frac{1}{\hbar} \sum_k \left(\frac{\bar{d}_{nk}^j \bar{d}_{kn}^i}{\omega_{nk} - \omega} \cdot \frac{\omega_{nk}}{\omega} - \frac{\bar{d}_{nk}^i \bar{d}_{kn}^j}{\omega} \right).$$

Hər iki mötərizəni ümumi məxrəcə gətirdikdə

$$\beta_{ij} = -\frac{1}{\hbar} \sum_k \left(\frac{\bar{d}_{nk}^i \bar{d}_{kn}^j}{\omega_{nk} + \omega} + \frac{\bar{d}_{nk}^i \bar{d}_{kn}^j}{\omega_{nk} - \omega} \right)$$

və ya

$$\beta_{ij} = \sum_k \frac{2\omega_{kn} d_{nk}^i d_{kn}^j}{\hbar(\omega_{nk}^2 - \omega^2)} \quad (59.28)$$

olur. Buradan görünür ki, $d_{nk}^i = d_{kn}^i$ şərti ödənildikdə β_{ij} –tenzoru ermit tenzor olur, yəni onun üçün

$$\beta_{ij} = \beta_{ji}^+ \quad (59.29)$$

bərabərliyi ödənilir.

Atomun (59.28) polyarlaşma əmsalını onun (59.10) klassik ifadəsinə oxşar yazsaq:

$$\beta_{ij} = \frac{e^2}{m} \sum_k \frac{f_{kn}^{ij}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2}, \quad (59.30)$$

burada f_{kn}^{ij} – tenzoru

$$f_{kn}^{ij} = \frac{2\omega_{kn} m d_{nk}^i d_{kn}^j}{\hbar e^2} \quad (59.31)$$

alınır və f_{kn}^{ij} ossilyator qüvvəsi adlanır.

Alınan nəticələri klassik nəzəriyyədəki nəticələrlə müqayisə etmək üçün mühitin izotrop olduğunu fərz edək. Belə mühitdə yaranan momentin istiqaməti işıq sahəsinin \vec{E} intensivlik vektorunun istiqaməti üzərinə düşür, yəni $i \neq j$ olanda $\beta_{ij}=0$, $i=j$ olanda isə $\beta_{ii}=\beta_{xx}=\beta_{yy}=\beta_{zz}=\beta$ olur. Başqa sözlə, β_{ij} – tenzoru skalyara çevrilir.

Beləliklə, izotrop mühit üçün

$$\beta = \frac{e^2}{m} \sum_k \frac{f_{kn}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2} \quad (59.32)$$

və ossilyator qüvvəsi

$$f_{kn} = \frac{2m\omega_{kn} |d_{kn}|^2}{\hbar e^2} \quad (59.33)$$

olur, burada $d_{kn} = -e \int \Psi_k^{\circ*} x \Psi_n^{\circ} (d\vec{r})$.

Kvant nəzəriyyəsində atomun polyarlaşma əmsalı üçün alınmış (59.32) ifadəsinin, formaca onun (59.10) klassik ifadəsi üzərinə düşməsi onların heç də eyni mahiyyətə malik olması demək deyildir. Doğrudan da, (59.32)-də cəm elektronların sayı üzrə yox, atomun həyəcanlanmış halları üzrə aparılır. Elektronların məxsusi tezliyin əvəzində (59.32)-də atomun stasionar halları arasında baş verən kvant keçidlərin ω_{kn} tezlikləri durur. Nəhayət,

f_{kn} ossilyator qüvvəsinə $\omega_{kn} = \frac{E_k^{\circ} - E_n^{\circ}}{\hbar}$ keçid tezliyi daxil olduğundan E_k° -

nın E_n° -dən böyük və ya kiçik olmasından asılı olaraq f_{kn} , klassik nəzəriyyədə həmişə müsbət olan f_k -dan fərqli olaraq, həm müsbət, həm də mənfi qiymət ala bilər.

Atomun əsas halından (E_n°) onun (E_k) həyəcanlanmış hallarına olan keçidlər ($E_k > E_n$) üçün $f_{nk} > 0$, hər hansı həyəcanlanmış E_n halından E_k -ya olan keçidlər ($E_n > E_k$) üçün isə $f_{kn} < 0$ olur. O, təcrübəyə uyğun olaraq, nəinki vahiddən kiçik qalır, hətta bütün k halları üzrə cəmi vahidə bərabər olur. Doğrudan da, (59.33) ifadəsindən f_{kn} -ni

$$f_{kn} = \frac{m\omega_{kn}}{\hbar} (x_{kn}^* x_{kn} + x_{kn}^* x_{kn}) \quad (59.34)$$

kimi yazmaq və burada $p_{kn} = im\omega_{kn} x_{kn}$ münasibətindən (59.34)-ün birinci

həddində x_{kn}^* -i, ikinci həddində isə x_{kn} -i p_{kn} ilə əvəz edib, operatorların ermitliyini nəzərə alanda

$$f_{kn} = -\frac{1}{i\hbar}(x_{nk}p_{kn} - p_{nk}x_{kn})$$

olar. Bu ifadədə k -hallar üzrə cəm götürəndən sonra $\check{p}_x x - x \check{p}_x = -i\hbar$ yer-dəyişmə münasibətindən

$$\sum_k f_{kn} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_k (x_{nk}p_{kn} - p_{nk}x_{kn}) = -\frac{1}{i\hbar} (xp_x - p_x x)_{nn} = 1\delta_{nn} = 1$$

olur.

Yuxarıda dediklərimizdən başqa, f_{kn} ossilyator qüvvəsi spontan keçidlərin A_{kn} ehtimalı ilə mütənasibdir:

$$f_{kn} = \frac{3mc^3}{2e^2 \omega_{kn}^2} A_{kn}$$

və spontan dipol şüalanmasının intensivliyini təyin edir.

Atomun polyarlaşma əmsalı məlum olduqda maddənin polyarlaşma əmsalını hesablamaq olar:

$$\alpha = N\beta = \frac{Ne^2}{m} \sum_k \frac{f_{kn}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2}.$$

Bu ifadə xarici sahə olmadıqda bütün atomların Ψ_n^o stasionar halında olduğu maddə üçün doğrudur. Atom yalnız Ψ_n^o halında yox, istənilən başqa halda da ola bilərsə, onda yuxarıdakı ifadəni atomun həmin halda olma ehtimalı W_n -ə də vurmaq lazımdır. Yəqin ki, W_n ehtimalı $\sum_n W_n = 1$ şərtini

ödəyir, belə ki burada cəm atomun ola biləcək mümkün halları üzrə gedir. Beləliklə, α üçün daha ümumi ifadə alınmış olur:

$$\alpha = \frac{Ne^2}{m} \sum_n \sum_k \frac{f_{kn}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2} W_n. \quad (59.35)$$

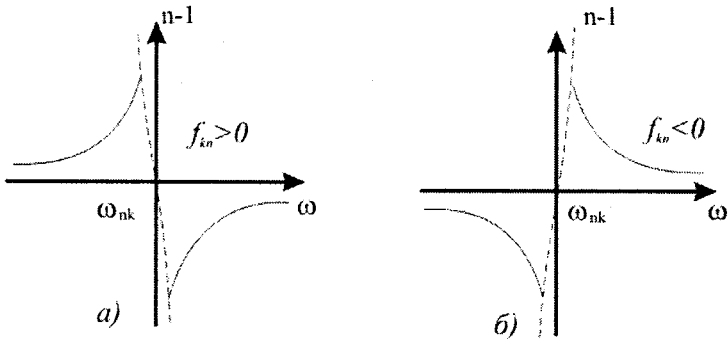
α -nın bu ifadəsini (59.6)-da yerinə yazsaq, mühitin sındırma əmsalı (və ya ε dielektrik nüfuzluğu) üçün

$$\varepsilon = n^2 = 1 + \frac{4\pi N e^2}{m} \sum_n \sum_k W_n \frac{f_{kn}}{\omega_{kn}^2 - \omega^2} \quad (59.36)$$

ifadəsini alırıq. Mühitin sındırma əmsalı adətən vahidə yaxın kəmiyyət olduğundan $n^2 - 1 \approx 2(n-1)$ götürmək olar. Onda

$$n = 1 + 2\pi N \frac{e^2}{m} \sum_k \sum_n W_n \frac{f_{kn}}{\omega_{kn}^2 - \omega^2}. \quad (59.37)$$

Mühitin sındırma əmsalının səpilən işığın ω tezliyindən asılılığı işığın dispersiya qanunu adlanır. f_{kn} - ossilyator qüvvəsi böyük olduqda n -in tezlikdən asılılığını göstərən ikinci hədd əsas rol oynayır. Atomlar əsas halda olduqda $\omega_{kn} > 0$ olduğundan $f_{kn} > 0$ olur və ω -nın $\omega < \omega_{nk}$ və $\omega > \omega_{nk}$ oblastlarda ω tezliyi artdıqda mühitin sındırma əmsalı da artır (şəkil 31,a). Bu *müsbət dispersiya* adlanır və o, klassik nəzəriyyənin nəticəsinə, demək olar ki, təkrar edir.



Şəkil 31. Müsbət (a) və mənfi (b) dispersiya əyriləri.

Atomlar $E_n > E_k$ şərtini ödəyən həyəcanlanmış halda olarsa, $\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar} < 0$ olduğundan ossilyator qüvvəsi mənfi olur: $f_{kn} < 0$, ω -nin $\omega < \omega_{nk}$ və $\omega > \omega_{nk}$ oblastlarında ω artdıqca mühitin n sındırma əmsalı azalır

(şəkil 31,b) və belə dispersiya *mənfi dispersiya* adlanır. Bu təmiz kvant effektidir və onun klassik analoqu yoxdur. Mənfi dispersiya 1930-cu ildə Landenburq tərəfindən təcrübi olaraq müşahidə olunmuşdur. Mənfi dispersiya daha çox həyəcanlanmış səviyyələrdən nisbətən zəif həyəcanlanmış səviyyələrə keçidlər ilə əlaqədar olduğundan, iddia etmək olar ki, bu hal yuxarı səviyyələrin aşağılara nisbətən dolma dərəcəsinin böyük olmasına uyğundur. Deməli, mənfi dispersiyalı sistemlərdən lazerlərin quraşdırılmasında istifadə edilə bilər.

Qeyd edək ki, ω_{nk} və ya ω_{kn} keçid tezlikləri yaxınlığında dispersiya ayrı-lərinin kəsilməsi, düşən işığın amplitudunun sönməsi (ışığın mühit tərəfin-dən udulması) hadisəsinin, yəni radiasiya sürtünmə qüvvəsinin nəzərə alınmaması nəticəsidir. Bu hadisə nəzərə alınmış olarsa, (59.37) düsturu

$$n = 1 + 2\pi N \sum_k \frac{f_{kn}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2 - i\eta\omega} \quad (59.38)$$

şəklinə düşür, burada η -sönməni (udulmanı) xarakterizə edən sabitdir və dispersiya ayriləri qırıq xətlə çəkilmiş hissələri ilə tamamlanır.

III HİSSƏ

RELYATİVİSTİK KVANT MEXANİKASI

VIII FƏSİL

DİRAK NƏZƏRİYYƏSİ

§60. Şredinger nəzəriyyəsinin çətinlikləri

Ⓐ Əvvəlki fəsillərdə təhlil olunan bütün fiziki hadisələrin əsasında Şredinger tənliyi dururdu. §17-də göstərmişdik ki, Şredinger tənliyi enerji ilə impuls arasındakı

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \quad (60.1)$$

qeyri-relyativistik münasibətdən uyğunluq prinsipi vasitəsilə alınır. Doğrudan da, (60.1) münasibətində

$\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2 \psi}{2m} + U\psi$

$$E \rightarrow \check{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow \check{\vec{p}} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (60.2)$$

əvəzlərini aparsaq, (17.5) Şredinger tənliyini alırıq.

Lakin Şredinger tənliyi xüsusi nisbilik nəzəriyyəsinin tələblərini ödəmir, o Lorens çevrilmələrinə görə invariant deyildir, tənliyə zamana görə törəmə birinci tərtibdən, koordinatlara görə törəmələr isə ikinci tərtibdən daxil olur. Deməli, Şredinger nəzəriyyəsi yalnız $v \ll c$ halında fiziki hadisələrin təsviri üçün tətbiq oluna bilər.

Ⓑ Elektronun mərkəzi sahədəki hərəkətinin Şredinger nəzəriyyəsi əsasında §89 aparılan tədqiqat göstərdi ki, biroptik elektronlu atomların enerji səviyyələri mürəkkəb quruluşa malikdir. Cırlaşmış hər bir E_{nl} səviyyəsi $2l+1$ sayda enerji səviyyələri toplusundan ibarətdir. Xarici elektrik və maqnit sahələrində bu cırlaşma ya tam və ya da qismən aradan götürülür (bax §76–78). Xarici sahəsiz, məsələn, $2p \rightarrow 1s$ keçidində bir spektr xətti əvəzin-

də bir-birinə çox yaxın yerləşmiş iki spektr xətti (dublet) müşahidə olunur. Buna spektrin incə quruluşu deyilir və başqa keçidlərə uyğun spektr xətləri də belə incə quruluşa malikdir.

Ⓢ § 41-də orbital hərəkət miqdarı momenti ilə ona uyğun maqnit momentinin z oxu üzrə proyeksiyaları arasında

$$M_z = -\frac{e}{2\mu c} L_z \quad (60.3)$$

münasibəti alınmışdı. Mərkəzi sahədəki hərəkət üçün $L_z = m\hbar$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$M_z = -\frac{e\hbar}{2\mu c} m \quad (60.4)$$

alınar, m - maqnit kvant ədədidir.

Bu münasibəti yoxlamaq üçün Ştern və Gerlax atomları s səviyyəsində olan bir valentli elementlərin (hidrogen, litium, gümüş) atom dəstələrini kəskin qeyri-bircinsli (kəskin dəyişən) maqnit sahəsindən keçirmişdi. s səviyyəsində $l=0$, $m=0$ olduğundan atom bu səviyyədə orbital mexaniki momentə və uyğun maqnit momentinə malik olmur. Ona görə də belə atom dəstəsinə maqnit sahəsi heç bir təsir göstərməməli idi. Lakin təcrübənin müəllifləri dəstənin hərəkət istiqamətinə nəzərən simmetrik iki dəstəyə ayrıldığını müşahidə etdilər. Atomar dəstənin belə iki dəstəyə ayrılması göstərirdi ki, atom s halında maqnit momentinə (uyğun mexaniki momentə) malikdir və onun verilmiş istiqamətdəki proyeksiyası yalnız iki qiymət ala bilər. Eyni zamanda təcrübədə müəyyən olunmuşdu ki, maqnit momentinin

mütləq qiyməti Bor maqnitonuna bərabərdir: $M_B = -\frac{e\hbar}{2\mu c}$.

Ⓢ Nəhayət Şredinger nəzəriyyəsi əsasında alınmış

$$\frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2\mu c} \quad (60.5)$$

nisbətinin doğruluğunu yoxlamaq üçün aparılan Eynşteyn-De-Qaaz təcrübəsi üzərində dayanacaq.

Kvars sapdan asılmış və oxu ətrafında fırlana bilən ferromaqnit silindrik çubuq səthi boyu yönəlmiş maqnit sahəsinə salınmaqla maqnitləşdirilir. Sonra maqnit sahəsinə əks istiqamətdə yönəlməklə maqnitləşmənin istiqaməti dəyişdirilir.

Bu zaman çubuğun maqnit momenti dəyişdiyindən onunla mütənasib olan mexaniki moment də dəyişəcək və çubuq öz oxu ətrafında müəyyən bucaq qədər dönəcəkdir. Dönmə bucağına görə \vec{L} mexaniki moment təyin edilmiş və beləliklə $\frac{M_z}{L_z}$ nisbəti tapılmışdı. Təcrübədə bu nisbət üçün

$$-\frac{e}{2\mu c} \text{ əvəzinə, } -\frac{e}{\mu c} \text{ qiyməti alınmışdı.}$$

Bir optik elektronlu atomların spektrində spektr xətlərinin dublet quruluşu malik olmasını və yuxarıda təsvir olunmuş iki təcrübənin nəticələrini izah etmək üçün *Ulenbek* və *Qaudsmit* fərz etdilər ki, elektron, orbital mexaniki və maqnit momentləri ilə yanaşı məxsusi mexaniki və ona uyğun maqnit momentinə malik olmalıdır. Elektronun bu məxsusi mexaniki momenti *spin* \vec{s} və ona uyğun maqnit momenti \vec{M}_s isə *spin maqnit momenti* adlanır. Yuxarıdakı təcrübələrdən alınır ki, onların nisbəti

$$\frac{M_z^s}{s_z} = -\frac{e}{\mu c} \quad (60.6)$$

olmalıdır.

Ştern-Gerlax təcrübəsində s halında olan elektronun maqnit momentinin Bor maqnitonuna malik olması və Eynşteyn-de-Qaaz təcrübəsində maqnit momentin uyğun mexaniki momentə nisbətinin $-\frac{e}{\mu c}$ -yə bərabərliyi faktından *Ulenbek* və *Qaudsmit* belə bir nəticəyə gəldilər ki, elektronun spini $s = \frac{\hbar}{2}$ -yə və onun z oxu üzrə proyeksiyası $s_z = \pm \frac{\hbar}{2}$ -yə bərabər olmalıdır. Beləliklə, elektronun spininin seçilmiş istiqamətdəki (belə istiqamət xarici maqnit sahəsinin istiqaməti ola bilər) $s_z = m_s \hbar$ proyeksiyasını xarakterizə edən m_s maqnit kvant ədədi tam yox, $m_s = \pm \frac{1}{2}$ kimi yalnız iki yarım tam qiymət alır.

Qeyd edək ki, adətən tam qiymət alan kvant ədədləri sistemin mümkün olan hallarının tək sayda (məsələn, $l=0, m=0$ – bir hal, $l=1, m=-1, 0, 1$ – üç hal və i.a.), yarım tam qiymət alan kvant ədədləri – cüt sayda olduğunu göstərir (məsələn, $s = \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$ – iki hal, $s = \frac{3}{2}, m_s = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ – dörd hal və i.a.).

Elektronun spinə malik olması faktı maddənin maqnit xassələrini və kimyəvi elementlərin spektrindəki incə quruluşu izah etməyə imkan verdi.

§61. Pauli tənliyi

Elektronun spinini və ya məxsusi maqnit momentini ilk dəfə nəzəriyyəyə daxil edən *Pauli* olmuşdu. Bunun üçün Pauli xarici elektromaqnit sahəsindəki hərəkət üçün yazılmış *Şredinger* tənliyinin Hamilton operatoruna spin maqnit momentinin xarici maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsiri xarakterizə edən hədd əlavə etmişdi. Onda yeni Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \tilde{H}_o - (\vec{M}_s \vec{\mathcal{H}}) \quad (61.1)$$

burada

$$\tilde{H}_o = \frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r) - e\varphi. \quad (61.1')$$

\vec{M}_s – spin maqnit momenti, \vec{A} və φ – uyğun olaraq xarici sahənin vektor və skalyar potensiallarıdır.

Bundan əvvəlki, §-da gətirilən təcrübə faktlarından çıxır ki, spin ilə ona uyğun maqnit momenti arasındakı əlaqə (60.6)-ə əsasən

$$\vec{M}_s = -\frac{e}{\mu c} \vec{s} \quad (61.2)$$

şəklində olmalıdır. Onda \vec{M}_s -in maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsir enerjisi

$$U_s = -\vec{M}_s \vec{\mathcal{H}} = \frac{e}{\mu c} \vec{s} \vec{\mathcal{H}} \quad (61.3)$$

olar, μ – zərrəciyin kütləsidir.

Bunu (61.1)-də yazandan sonra alınan kvant mexaniki tənlik *Pauli* tənliyi adlanır. Onun ümumi şəkli

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\tilde{H}_o + \frac{e}{\mu c} \vec{s} \vec{\mathcal{H}} \Psi \right) \quad (61.4)$$

Sistemin stasionar halları üçün $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi$ olduğundan

$$E \Psi = \left(\tilde{H}_0 + \frac{e}{\mu c} \vec{s} \vec{\mathcal{H}} \right) \Psi \quad (61.5)$$

olar.

Yuxarıda gördük ki, elektron enerjisinin və impulsun müəyyən qiymətində spinin proyeksiyasının işarəsi ilə fərqlənən iki müxtəlif halda ola bilər. Deməli, onun halını təyin edən dalğa funksiyası elektronun ağırlıq mərkəzinin x, y, z koordinatlarından başqa spin dəyişəni s_z -dən də asılı olmalıdır: $\Psi(x, y, z, s_z, t)$.

Spin dəyişəni $s_z = +\frac{\hbar}{2}$ və $-\frac{\hbar}{2}$ kimi iki diskret qiymət aldığından Pauli,

elektronun halını $\Psi_1 = \Psi\left(x, y, z, s_z = \frac{\hbar}{2}, t\right)$ və $\Psi_2 = \Psi\left(x, y, z, s_z = -\frac{\hbar}{2}, t\right)$ kimi iki

dalğa funksiyası ilə təsvir etməyi təklif etmişdi. Dalğa funksiyalardan Ψ_1 spinin z oxunun müsbət istiqamətində, Ψ_2 isə onun əksinə yönəlmiş halları təsvir etdiyindən, bu funksiyalar iki tənlikdən ibarət sistemin həlli olmalıdır:

$$\begin{aligned} a_{11}\Psi_1 + a_{12}\Psi_2 &= 0, \\ a_{21}\Psi_1 + a_{22}\Psi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (61.6)$$

Bu sistem matrisa şəklində bir tənlik kimi yazıla bilər:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Buna görə (61.5) Pauli tənliyinə daxil olan Ψ -dalğa funksiyasını

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (61.7)$$

kimi ikinci tərtib bir sütunlu matrisa şəklində seçmişdi. Onda hər hansı matrisaya (operatora) uyğun ermit qoşma matrisanı tapmaq qaydasına əsasən Ψ -yə ermit qoşma dalğa funksiyası bir sətirli matrisa şəklində olar:

$$\Psi^+ = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = (\Psi_1^* \Psi_2^*) \quad (61.8)$$

Bu zaman zərəcəyin spinin proyeksiyası ilə fərqlənən iki haldan hər hansı birində olma ehtimal sıxlığı, matrisaların vurulma qaydasına görə

$$\Psi^+ \Psi = (\Psi_1^* \Psi_2^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2 \quad (61.9)$$

olar, yəni elektronun bu hallardan birində olma ehtimal sıxlığı, ehtimalların toplanması teoreminə uyğun olaraq, onların hər birində ayrılıqda olma ehtimal sıxlıqları cəminə bərabərdir.]

İndi də spinin nəzəri təsvir edilməsi qaydasının izahına keçək. Kvant mexanikasının ümumi prinsiplərinə görə elektronun spin xassələrini təsvir edən operator xətti, özünəəqəşmə (ermit) operator olmalıdır. Onu \vec{s} ilə işarə edək. \vec{s} operatoru məxsusi mexaniki moment (spin) operatoru olduğundan onun $\check{s}_x, \check{s}_y, \check{s}_z$ komponentləri \check{L} orbital mexaniki moment operatorunun $\check{L}_x, \check{L}_y, \check{L}_z$ komponentlərinin ödədiyi (13.14) münasibətləri ilə görünüşcə eyni olan münasibətləri ödəməlidir.

$$\begin{aligned} \check{s}_x \check{s}_y - \check{s}_y \check{s}_x &= i\hbar \check{s}_z, \\ \check{s}_y \check{s}_z - \check{s}_z \check{s}_y &= i\hbar \check{s}_x, \\ \check{s}_z \check{s}_x - \check{s}_x \check{s}_z &= i\hbar \check{s}_y, \end{aligned}$$

və ya

$$\check{s}_i \check{s}_k - \check{s}_k \check{s}_i = \sum_l i\hbar \epsilon_{ikl} \check{s}_l. \quad \text{alaraq.} \quad (61.10)]$$

Spinin ixtiyari istiqamətdəki proyeksiyasının iki müxtəlif qiymətinə uyğun olaraq $\check{s}_i (i=1,2,3)$ spin operatorları iki sətir-sütunlu matrisalarla ifadə olunur, çünki, yalnız iki sətir-sütunlu matrisalar diaqonal şəkllə gətirildikdə iki diaqonal həddə, yəni iki məxsusi qiymətə malik olur. Proyeksiyaların mütləq qiymətinin

$\frac{\hbar}{2}$ -yə bərabər olduğunu nəzərə alsaq, \check{s} və \check{s}_i operatorları*

* Dörd sətir-sütunlu σ_i - Dirak matrisalarından (bax §64) fərqli olaraq Pauli matrisalarını ştrix ilə işarə edirik.

$$\tilde{s} = \frac{\hbar}{2} \tilde{\sigma}'_x, \tilde{s}_x = \frac{\hbar}{2} \sigma'_x, \tilde{s}_y = \frac{\hbar}{2} \sigma'_y, \tilde{s}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma'_z \quad (61.11)$$

kimi seçilir. Burada $\sigma'_x, \sigma'_y, \sigma'_z$ – iki sətir-sütunlu özünə qoşma matrisalar olmalıdır. Bu matrisalar *Pauli* və ya *spin matrisaları* adlanır.

(61.11) ifadələrini (61.10)-də yazsaq, σ'_i matrisaları

$$\sigma'_x \sigma'_y - \sigma'_y \sigma'_x = 2i \sigma'_z, \quad (61.12)$$

$$\sigma'_y \sigma'_z - \sigma'_z \sigma'_y = 2i \sigma'_x,$$

$$\sigma'_z \sigma'_x - \sigma'_x \sigma'_z = 2i \sigma'_y$$

və ya

$$\sigma'_i \sigma'_k - \sigma'_k \sigma'_i = 2i \sum_l \tilde{\epsilon}_{ikl} \sigma'_l$$

münasibətlərini ödəyər. σ'_i matrisaların məxsusi qiymətləri ± 1 olduğundan onların kvadratı olan σ'^2_x, σ'^2_y və σ'^2_z -in məxsusi qiyməti $+1$ olar. Onda σ'_z -in diaqonal matrisa olma təsvirində

$$\sigma'_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma'_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma'_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (61.13)$$

kimi seçilir. σ'_i matrisalarının analitik ifadəsindən görünür ki, σ'_i matrisaları ermit (özünəqoşma) matrisalardır. $\sigma'^{\dagger}_i = \sigma'_i$ Digər tərəfdən onlar üçün

$$\sigma'^2_x = \sigma'^2_y = \sigma'^2_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I' \quad (61.14)$$

və (61.12) münasibətləri ödənilir. Burada $I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ — vahid matrisadır, $\left. \begin{matrix} \text{ } \\ \text{ } \end{matrix} \right\} o$,

matrisa hesabında adi hesabda vahidin oynadığı rolu oynayır. Ona görə də I' matrisa əksər hallarda adi vahid kimi yazılır. Əsaslıqla göstərmək olar ki, σ'_i matrisaları (61.12) və (61.14) münasibətlərlə yanaşı

$$\sigma'_x \sigma'_y = -\sigma'_y \sigma'_x = i \sigma'_z$$

$$\sigma'_y \sigma'_z = -\sigma'_z \sigma'_y = i \sigma'_x \quad (61.15)$$

$$\sigma'_z \sigma'_x = -\sigma'_x \sigma'_z = i \sigma'_y$$

münasibətlərini də ödəyir. (61.14) və (61.15) bərabərliklərinə əsasən göstərmək olar ki, σ'_i matrisaları üçün

$$\sigma'_i \sigma'_k + \sigma'_k \sigma'_i = 2\delta_{ik} \quad (61.16)$$

münasibəti ödənilir və spin operatorunun kvadratı

$$\vec{s}^2 = \vec{s}_x^2 + \vec{s}_y^2 + \vec{s}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x'^2 + \sigma_y'^2 + \sigma_z'^2) = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} I' \quad (61.17)$$

olur.

(61.11)-dən \vec{s} operatorunun ifadəsini (61.4)-də yazsaq, Pauli tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\check{H}_o + \frac{e\hbar}{2\mu c} (\vec{\sigma}' \vec{\mathcal{H}}) \right) \Psi \quad (61.18)$$

şəklinə düşür. Bu tənliyə ermit qoşma tənlik

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = \check{H}_o \Psi^+ + \frac{e\hbar}{2\mu c} \Psi^+ (\vec{\sigma} \vec{\mathcal{H}}) \quad (61.19)$$

olar, burada $\check{H}_o^+ = \check{H}_o$ və $\vec{\sigma}^+ = \vec{\sigma}$ olduğu nəzərə alınmışdır. (61.18) tənliyini soldan Ψ^+ -ya, (61.19) tənliyini isə sağdan Ψ -yə vurub, tənlikləri bir-birindən çıxsaq,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) = \Psi^+ \check{H}_o \Psi - (\check{H}_o \Psi^+) \cdot \Psi$$

və ya

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla} (\Psi^+ \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^+) - \frac{i\hbar e}{\mu c} \vec{\nabla} \vec{A} \cdot \Psi^+ \Psi$$

alarıq. Bu tənlik kəsilməzlik tənliyidir, ehtimal sıxlığı

$$\rho = \Psi^+ \Psi = \Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2,$$

ehtimal cərəyanı sıxlığı isə

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2\mu} \left[(\vec{\nabla} \Psi^+) \Psi - \Psi^+ \vec{\nabla} \Psi \right] - \frac{e}{\mu c} \vec{A} \Psi^+ \Psi \quad (61.20)$$

və ya

$$\begin{aligned} \vec{J} = & \frac{i\hbar}{2\mu} \left[(\vec{\nabla} \Psi_1^*) \Psi_1 - \Psi_1^* \vec{\nabla} \Psi_1 + (\vec{\nabla} \Psi_2^*) \Psi_2 - \Psi_2^* \vec{\nabla} \Psi_2 \right] - \\ & - \frac{e}{\mu c} \vec{A} (\Psi_1^+ \Psi_1 + \Psi_2^+ \Psi_2) \end{aligned} \quad (61.21)$$

olur.

Xarici sahə olmadıqda Ψ_1 və Ψ_2 funksiyaları yalnız o vaxt fərqlənər ki, spin ilə elektronun ağırlıq mərkəzinin hərəkəti arasında müəyyən bir rabitə olsun. Belə rabitə həmişə var və o, spin maqnit momenti ilə elektronun hərəkəti zamanı yaranan cərəyanın maqnit sahəsi arasında meydana çıxır. Bildiyimiz kimi, elektronun atomun daxilindəki hərəkəti qapalı cərəyan yaradır, qapalı cərəyan isə maqnit momentinə ekvivalentdir.

Burada orbital hərəkətə uyğun maqnit momenti spin maqnit momenti ilə qarşılıqlı təsirdə olur. Bu qarşılıqlı təsir *spin-orbital qarşılıqlı təsir* adlanır və o, spektr xətlərinin multiplet (xüsusi halda dublet) quruluşu malik olmasına gətirir. Spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda Ψ_1 və Ψ_2 funksiyaları bir-birinə bərabər olur. Lakin belə halda da elektronun (və ya istənilən spinə malik başqa zərrəciyin) spinə malik olduğunu nəzərə almaq üçün $\Psi(x, y, z, s_z, t)$ funksiyasını yalnız koordinatlardan və yalnız spin dəyişəndindən asılı funksiyaların hasilində göstürürlər:

$$\Psi(x, y, z, s_z, t) = \Psi(x, y, z, t) S_\alpha(s_z). \quad (61.22)$$

Burada $S_\alpha(s_z)$ – spin funksiyası adlanır. α indeksi spinin proyeksiyasının aldığı qiymətlərə uyğun iki qiymət alır: $\alpha = \frac{1}{2}, \alpha = -\frac{1}{2}$. $S_{1/2}(s_z)$ – funksiyası spinin müsbət proyeksiyaya malik halın, $S_{-1/2}$ – funksiyası isə mənfi proyeksiyaya malik halın funksiyalarıdır. Beləliklə, spin funksiyaları

$$S_{1/2}\left(s_z = \frac{\hbar}{2}\right) = 1, \quad S_{1/2}\left(s_z = -\frac{\hbar}{2}\right) = 0 \quad (61.23)$$

$$S_{-1/2}\left(s_z = \frac{\hbar}{2}\right) = 0, \quad S_{-1/2}\left(s_z = -\frac{\hbar}{2}\right) = 1$$

kimi seçilir.

Spin funksiyaları adi funksiyalar kimi ortonormalanma şərtini ödəməlidir.

$$\sum_{s_z} S_{\alpha}^{+}(s_z) S_{\beta}(s_z) = \delta_{\alpha\beta}. \quad (61.24)$$

(61.23) və (61.24) bərabərliklərindən alınır ki, spin funksiyalarını matri-sa şəklində yazmaq olar:

$$S_{1/2}(s_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{-1/2}(s_z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (61.25)$$

$$S_{1/2}^{+}(s_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{-1/2}^{+}(s_z) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

İndi də I' və σ'_i matrisalarının (61.13) və (61.14) ifadələrindən istifadə edərək (61.4) tənliyini matrisa şəklində yazaq:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left\{ \tilde{H}_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{e\hbar}{2\mu c} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \mathcal{H}_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathcal{H}_z \right] \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (61.26)$$

Matrisaların vurulması, toplanması və bir-birinə bərabərliyi qaydalarından istifadə etsək, (61.26) tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = \tilde{H}_0 \Psi_1 + \frac{e\hbar}{2\mu c} \left[(\mathcal{H}_x - i\mathcal{H}_y) \Psi_2 + \mathcal{H}_z \Psi_1 \right], \quad (61.27)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \tilde{H}_0 \Psi_2 + \frac{e\hbar}{2\mu c} \left[(\mathcal{H}_x + i\mathcal{H}_y) \Psi_1 - \mathcal{H}_z \Psi_2 \right]$$

tənliklər sisteminə çevrilir.

Bir xüsusi hala baxaq. Fərz edək ki, elektron z oxu boyunca yönəlmiş bircins maqnit sahəsində hərəkət edir.

Bu halda ümumi Hamilton operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından sistemin halları stasionar hallar olur və tənliklər stasionar halların tənliklərinə çevrilir.

Maqnit sahəsi z oxu boyunca yönəldikdə $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0$, $\mathcal{H}_z = \mathcal{H}$ olar və (61.27) tənliklər sistemi

$$E\Psi_1 = \check{H}_0\Psi_1 + \frac{e\hbar}{2\mu c}\mathcal{H}\Psi_1, \quad (61.28)$$

$$E\Psi_2 = \check{H}_0\Psi_2 - \frac{e\hbar}{2\mu c}\mathcal{H}\Psi_2$$

şəklinə düşür. Bu halda sistemin hallarının qarışması aradan çıxır. Birinci tənlik spini z oxu boyunca, ikinci tənlik isə spini z oxunun əksinə yönəlmiş elektronun hərəkətini təsvir edir. (61.28)-dən görünür ki, sistemi

$$E\Psi = \check{H}_0\Psi + \frac{e\hbar}{2\mu c}\mathcal{H}\sigma'_z\Psi \quad (61.29)$$

və ya (61.1)-ə əsasən

$$E\Psi = \left\{ \frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r) - e\varphi + \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}_z \sigma'_z \right\} \Psi \quad (61.30)$$

kimi bir tənlik şəklində yazmaq olar.

Şredinger nəzəriyyəsində təsadüf olunan çətinliklərin hamısını Pauli tənliyi vasitəsilə həll etmək mümkün olmur. O, qeyri-relyativistik tənlik olaraq qalır. Spinin daxil edilməsi yalnız spektr xətlərinin incə quruluşunu qismən izah edə bilir və spinin təbiəti haqqında heç bir məlumat vermir. Spin tənliyə səbəbi məlum olmayan bir varlıq kimi daxil edilir.

Sonrakı tədqiqatlar göstərdi ki, spektr xətlərinin incə quruluşu qismən zərrəciyin spinə malik olması və qismən də onun kütləsinin sürətdən asılılığı (relyativistik effekt) nəticəsidir.

§62. Kleyn–Qordon–Fok tənliyi

Zərrəciyin kütləsinin sürətdən asılılığını nəzərə alan relyativistik invariant tənliyin üzərində dayanacaq.

Xüsusi nisbilik nəzəriyyəsində kütlənin sürətdən asılılığı üçün

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (62.1)$$

ifadəsi alınır. Bunu kvadrata yüksəldib, hər tərəfi c^2 -na vurandan sonra enerji üçün $E=mc^2$ ifadəsindən istifadə etsək, relyativistik oblastda ($v \sim c$) enerji ilə impuls arasında

$$E^2 = m_0^2 c^4 + c^2 p^2 \quad (62.2)$$

ifadəsi alınır. (62.2)-də (60.2) münasibətlərindən istifadə etsək,

$$(\tilde{E}^2 - m_0^2 c^4 - c^2 \tilde{p}^2) \Psi = 0$$

və ya

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \hbar^2 c^2 \nabla^2 \Psi - m_0^2 c^4 \Psi = 0 \quad (62.3)$$

tənliyini alırıq. Zərrəciyin sərbəst hərəkətini təsvir edən bu tənlik Kleyn-Qordon-Fok tənliyi adlanır (o, Şredinger tərəfindən də yazılmışdı).

Xarici elektromaqnit sahəsi olduğu halda, Şredinger nəzəriyyəsində olduğu kimi, (60.2) münasibətləri əvəzində

$$\tilde{E} \rightarrow \tilde{E} - e\varphi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi, \quad (62.4)$$

$$\tilde{\vec{p}} \rightarrow \vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} = -i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}$$

götürülür, burada $A(\vec{r}, t)$ və $\varphi(\vec{r}, t)$ – elektromaqnit sahəsinin vektor və skalyar potensiallarıdır. Bu halda (62.3) tənliyi

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi)^2 \Psi = c^2 (-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 \Psi + m_0^2 c^4 \Psi \quad (62.5)$$

şəklinə düşür

Müasir fizikamın əsas tələblərindən biri fiziki qanunların bütün inersial, yəni biri digərinə nisbətən sabit sürətlə hərəkət edən koordinat sistemlərində eyni bir şəkllə malik olması tələbidir. Bir inersial sistemdən digərinə keçid Lorens çevrilmələri vasitəsilə icra olunduğundan, buradan çıxır ki, fundamen-

tal (əsas) fiziki qanunlar Lorens-invariant olmalıdır. Lorens çevrilmələri dördölçülü fəzanın eyni bir nöqtəsinin iki inersial sistemdə təyin edilmiş $x^\mu(x_0=ct, x_1=x, x_2=y, x_3=z)$ və $x'^\mu(x'_0, x'_1, x'_2, x'_3)$ koordinatlarını ələqələndirir. Belə fəzanın iki nöqtəsi arasındakı məsafənin (intervalın) kvadratı

$$s^2 = c^2(t - t')^2 - (x_1 - x'_1)^2 - (x_2 - x'_2)^2 - (x_3 - x'_3)^2. \quad (62.6)$$

Lorens çevrilmələri zamanı sabit – invariant qalır ($(x^\mu)^2 = s^2, \mu=0, 1, 2, 3; s^2 = c^2 t^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$ kimi yazılır).

Lorens çevrilmələri zamanı x^μ kimi çevrilən istənilən dörd kəmiyyət çoxluğu dördölçülü vektor adlanır. Məsələn, elektrodinamikada elektro-maqnit sahəsinin \vec{A} -vektor və φ skalyar potensialları $A_\mu(i\varphi, A_j)$ dördölçülü vektor təşkil edir. Doğrudan da, elektrodinamikadan məlumdur ki, A_μ -nün və x^μ -nün Lorens-çevrilmə qanunları eynidir. Eləcə də xüsusi nisbətlik nəzəriyyəsində təcrid edilmiş sistemin E enerjisi və \vec{p} impulsu dördölçülü vektordur: $p^\mu \left(p_0 = \frac{E}{c}, p_1, p_2, p_3 \right)$. Belə sistemə sərbəst hərəkət edən zərrəcik

misal ola bilər. Onun üçün $\frac{E^2}{c^2} - p_i^2$ əsas invariantdır:

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_0^2 c^2, \quad (62.7)$$

burada m_0 – zərrəciyin sükunət kütləsidir.]

Üçölçülü fəzada olduğu kimi, burada da dördölçülü a^μ və b^μ vektorlarının skalyar hasilini daxil edə bilərik. (62.6) ifadəsinə əsasən bu hasil

$$a^\mu b_\mu = a_0 b_0 - \vec{a} \vec{b} \quad (62.8)$$

kimi təyin etmək olar. Bu hasil Lorens çevrilmələrinə görə invariantdır*.

* Dördölçülü fəzada x_μ koordinat vektorunun komponentləri $x_j=x, x_2=y, x_3=z, x_4=ict$ kimi də seçilir. Bu halda interval $s^2 = x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2$ kimi təyin olunur. x_μ və ya x^μ vektorlarının seçilməsi əməliyyatına fəzanın metrikasının seçilməsi deyilir. Metrikasının bunlardan hər hansı biri şəklində seçilməsi fiziki hadisələrin təsvirinə heç bir dəyişiklik gətirmir. Hər iki halda alınan nəticələr eyni olur. $s^2 = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu$ intervalına zamana oxşar, $s^2 = x_\mu x_\mu$ intervalına isə fəzaya oxşar interval deyilir (axırıncı ifadədə $x_\mu(x_\nu, x_4 = ict)$ nəzərdə tutulur).

Lakin (62.8)-ə mənfəi işarəsi daxil olduğundan $a^\mu(a_\nu, a_\nu)$ vektorundan başqa yeni növ $a_\mu(a_\nu, -a_\nu)$ dördölçülü vektorun daxil edilməsi əlverişlidir. Bu halda iki dördölçülü vektorun skalyar hasilı

$$a_\mu b^\mu = a^\mu b_\mu = g_{\mu\nu} a^\mu b^\nu = g^{\mu\nu} a_\mu b_\nu = ab = a_\nu b_\nu - \vec{a}\vec{b} \quad (62.9)$$

yazılır, burada $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu}$ ($g_{00} = 1, g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1, g_{\mu\nu} = 0, \mu \neq \nu$ olduqda) ikinci rəng metrik tenzor adlanır. (62.9)-da təkrar olunan indeks üzrə cəmin aparılması nəzərdə tutulur. a^μ – vektoru *kontravariant*, a_μ – vektoru isə *kovariant vektor* adlanır. $x_\mu = (x_1, x_2, x_3, x_4 = ict)$ metrikasında belə iki müxtəlif vektorların daxil edilməsinə ehtiyac qalmır.

Misal olaraq (62.7) ifadəsinin sol tərəfi və $\frac{E}{c}t - \vec{p}\vec{r}$ ifadələri iki dördölçülü vektorun skalyar hasilı şəklində yazıla bilər:

$$p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2, \quad (62.9')$$

$$p_\mu x^\mu = \frac{E}{c}t - \vec{p}\vec{r}.$$

(62.3) tənliyinə zaman və koordinatlara görə götürülən törəmələr eyni tərtibdən daxil olduğuna görə, asanlıqla göstərmək olar ki, o Lorens-invariantdır. (62.5) tənliyinə gəldikdə, elektrodinamikadan məlumdur ki, bir inersial hesabat sistemindən digər inersial hesabat sisteminə keçdikdə $(E/c, \vec{p})$ və (φ, \vec{A}) kəmiyyətləri üçün çevrilmə qanunu eyni olduğundan (62.5) tənliyi də Lorens çevrilmələrinə görə invariant olur.

Uyğunluq prinsipinə görə iddia etmək olar ki, *Kleyn-Qordon-Fok* tənliyinin Hamilton operatoru (62.2) və (62.4) münasibətlərindən

$$\check{H} = e\varphi + \sqrt{\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + m_0^2 c^4} \quad (62.10)$$

olar. Qeyri-relyativistik halda bu ifadə Şredinger tənliyinin Hamilton operatoruna keçir, deməli $v \ll c$ və ya $c \rightarrow \infty$ -da (62.5) tənliyindən uyğun Şredinger tənliyi alınmalıdır.

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{-i}{\hbar} m_0 c^2 t} \Phi(\vec{r}, t) \quad (62.11)$$

unitar çevrilməsi vasitəsilə bunu göstərmək olar. (62.11)-i (62.5) tənliyində yazıb, zaman və koordinatlara görə törəmələri hesablasaq,

$$2i\hbar m_0 c^2 \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \hbar^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - 2e\varphi \left(m_0 c^2 \Phi + i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) + e^2 \varphi^2 \Phi = c^2 \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \Phi$$

alınar. İşıq sürəti kifayət qədər böyük kəmiyyət olduğundan bu tənlikdə c^2 ilə mütənasib olan hədlərə nisbətən başqa hədləri nəzərə almamaq olar. Qalan hədləri $2mc^2$ bölsək,

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \Phi + e\varphi \Phi$$

Şredinger tənliyini almış oluruq.

(62.5) tənliyi relyativistik-invariant tənlik olduğundan Lorens çevrilmələri zamanı Ψ -dalğa funksiyası əvvəlkindən yalnız bir sabitlə fərqlənər. Şredinger nəzəriyyəsində olduğu kimi, burada da Ψ normalanma şərtini ödəməlidir. Bu baxımdan həmin sabit $+1$ götürülə bilər (-1 götürülə bilməz, çünki Lorens çevrilmələri kəsilməz çevrilmələrdir). Digər tərəfdən, koordinatların inversiyası (güzgü əksi) çevrilməsində, yə'ni Ψ -yə inversiya operatoru ilə təsir etdikdə funksiya $+1$ və ya -1 -ə vurular. Başqa sözlə, (62.5) tənliyinə daxil olan Ψ -funksiyası ya skalyar (işarəsi dəyişilmədikdə) və ya psevdoskalyar (işarəsi dəyişildikdə) ola bilər.

(62.5) tənliyi də kvant mexaniki sistemin zamana görə inkişafını (evolyusiyasını) xarakterizə edir. Sistemin halı x, y, z, t dəyişənlərindən asılı Ψ -dalğa funksiyası ilə təsvir olunur, spini xarakterizə edən dəyişən isə daxil olmur. Deməli, baxılan tənlik yalnız spinə malik olmayan zərrəciklərin hərəkətini təsvir edə bilər. Spinə malik zərrəciklərin hərəkətini təsvir etmək üçün isə (62.5) tənliyi, yəqin ki, müəyyən dəyişikliklərə ugramalıdır.

(62.5) tənliyini ödəyən Ψ -funksiyasının mahiyyətini aydınlaşdırmaq üçün

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 \quad (62.12)$$

kəsilməzlik tənliyini ödəyən ρ ehtimal sıxlığının və \vec{j} ehtimal sıxlığı cərəyanının ifadələrini tapaq. Bu işi elektromaqnit sahəsi olmadığı hal üçün görək.

(62.3) tənliyini sol tərəfdən Ψ^+ -ya, Ψ^+ üçün yazılmış tənliyi sağdan Ψ^- yə vurub tərəf-tərəfə çıxaraq:

$$\frac{1}{c^2} \left(\Psi^+ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Psi^- \frac{\partial^2 \Psi^+}{\partial t^2} \right) = \Psi^+ \nabla^2 \Psi - \Psi^- \nabla^2 \Psi^+$$

bunu

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi^- \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \right) = \vec{\nabla} (\Psi^+ \vec{\nabla} \Psi - \Psi^- \vec{\nabla} \Psi^+) \quad (62.13)$$

şəklinə salmaq olar. (62.13)-ü $\frac{i\hbar}{2m}$ vuruğuna vurub, ehtimal sıxlığı və ehtimal sıxlığı cərəyanını uyğun olaraq

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi^- \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \right), \quad (62.14)$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^+ \vec{\nabla} \Psi - \Psi^- \vec{\nabla} \Psi^+) \quad (62.15)$$

şəkində təyin etsək, (62.13) bərabərliyi (62.12) kəsilməzlik tənliyinə çevrilər.

Bildiyimiz kimi ehtimal sıxlığı həmişə müsbət kəmiyyət olmalıdır. Lakin ρ -nun (62.14) ilə verilmiş ifadəsi həmişə müsbət kəmiyyət olmaya da bilər. Doğrudan da K-Q-F tənliyi zamana görə ikinci tərtib tənlik olduğundan, dalğa funksiyasının zamana görə dəyişməsinə təyin etmək üçün başlanğıc anda Ψ -nin yalnız özü yox, onun zamana görə birinci tərtib törəməsi

$\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ -də verilməlidir. Başlanğıc anda Ψ və $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ ixtiyari seçilə bildiyindən

(62.14) ifadəsi ilə təyin olunan ρ müsbət, mənfi və sıfır ola bilər. Buna görə də ρ -ya zərrəciklərin koordinatlarının vahid intervalda paylanma ehtimalı kimi baxmaq olmaz. İlk vaxtlarda bu, K-Q-F nəzəriyyəsinin çətinliklərindən biri sayılırdı.

Qeyd edək ki, relyativistik nəzəriyyədə, yəni böyük enerjilər oblastında, zərrəciklərin sayı saxlanmaya da bilər $N\rho = \rho_N$ -yə zərrəciklərin sayının sıxlığı kimi baxmaq olmaz. Enerjinin kifayət qədər böyük qiymətlərində ($MeV \approx 10^6 eV$ oblastında) zərrəcik-antizərrəcik cütünün yaranması və ya annihilyasiyası baş verir. Daha böyük enerji ($QeV = 10^9 eV$) oblastında

isə cütүн annihiliasiyası müxtəlif zərrəciklərdən ibarət şırnaq yaradır. Lakin bütün belə hadisələrdə elektrik yükünün yekun qiyməti saxlanır. Ona görə də ρ və ya ρ_N əvəzində elektrik yükünün $\rho_e = e\rho$ sıxlığından danışmaq olar, belə ki, bir tərəfdən o, (62.12) tənliyi şəklində yükün saxlanması gətirir, digər tərəfdən isə ρ_e elektrik yükünün işarəsindən asılı olaraq mənfi və müsbət qiymət ala bilər.

Dediklərimizdən çıxır ki,

$$\rho_e = \frac{i\hbar e}{2mc^2} \left(\Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \right), \quad (62.16)$$

$$\vec{j}_e = \frac{e\hbar}{2mi} (\Psi^+ \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^+) \quad (62.17)$$

ifadələrinə uyğun olaraq, yükün və elektrik cərəyanı şiddətinin sıxlıqları kimi baxmaq olar. Cərəyan şiddəti sıxlığının ifadəsi onun (17.12) qeyri-relyativistik nəzəriyyədə alınan ifadəsi üzərində düşür, yükün sıxlığı isə yalnız $v \ll c$ şərtində özünün Şredinger nəzəriyyəsindəki qiymətini alır.

Doğrudan da, (62.16) ifadəsində (61.2)-dən $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi$ götürüb alınan

$$\rho_e = \frac{eE}{mc^2} \Psi^+ \Psi \quad (62.18)$$

ifadəsində $E = mc^2$ əvəzini etsək, ρ_e üçün adi $\rho_e = e \Psi^+ \Psi$ ifadəsini alırıq.

İndi də K-Q-F tənliyini sərbəst zərrəcik üçün həll edək. (62.3) tənliyinin həllini

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

şəklində axtaraq, onda (62.3)-dən

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + k^2 \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (62.19)$$

alınar, burada

$$k^2 = \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2}.$$

(62.19) tənliyinə uyğun xarakteristik tənliyinin xassəsinə əsasən onun

həlli

$$\Psi(\vec{r}) = Ce^{i\vec{k}\vec{r}} = Ce^{i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}},$$

burada $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ –dalğa ədədi vektorudur. Bu həlli (62.19)-da yazsaq, zərrəciyin enerjisi və impulsu arasında

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$$

münasibəti alınır. Buradan

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} = \pm \varepsilon = \lambda \varepsilon. \quad (62.20)$$

Beləliklə, (62.3) tənliyi enerjinin və impulsun müəyyən qiymətində iki həllə malikdir:

$$\Psi_\lambda(\vec{r}, t) = Ce^{i(\vec{p}\vec{r} - \lambda \varepsilon t)}. \quad (62.21)$$

Ψ -nin (62.21) ilə verilmiş qiymətini (62.14)-də yerinə yazsaq,

$$\rho_e^\lambda = \frac{\lambda e \varepsilon}{mc^2} \Psi^+ \Psi \quad (62.22)$$

olar. Buradan çıxır ki, $\Psi_{\lambda=+1}$ həlli enerjinin $E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} > 0$ halına uyğun müəyyən \vec{p} impulsu e yükünə malik zərrəciyin sərbəst hərəkətini təsvir edərsə, $\Psi_{\lambda=-1}$ həlli isə həmin \vec{p} impulsu, lakin əks işarəli elektrik yükünə malik zərrəciyin sərbəst hərəkətini təsvir edir. Qeyd edək ki, ikinci həllər eyni zamanda sərbəst hərəkətin tam enerjisinin mənfii işarəli qiymətinə uyğundur. Deməli, (62.3) tənliyi $E = -\sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} < 0$ kimi mənfii tam enerjili həllərə də malikdir. E -nin mənfii qiyməti $E = mc^2$ bərabərliyindən mənfii kütlənin varlığına uyğundur. Mənfii kütlə anlayışı isə başa düşülmür. Bu fakt K-Q-F tənliyinin ikinci çətinliyi hesab olunurdu.

Beləliklə, relyativistik nəzəriyyə K-Q-F tənliyinin təmsilində elektrik yükünün mütləq qiymətində bir yox, iki zərrəcikli təsvirə gətirmiş olur, yəni yüksək enerjilərdə bir zərrəcikli təsviri saxlamaq mümkün deyildir. Bu nəzəriyyədə ortaya çıxan hər iki çətinlik Dirak nəzəriyyəsində daha

ətraflı müzakirə olunacaqdır. Qeyd edək ki, Dirak nəzəriyyəsini də bir zərrəcikli nəzəriyyə hesab etmək olmaz. *Kleyn-Qordon-Fok* tənliyinin tətbiqinə misal olaraq spinsiz elektronun atomdakı hərəkətinə baxaq.

§63. Spini sıfır olan elektronun nüvə sahəsindəki hərəkəti

Hidrogenəbənzər atomlar misalında *Kleyn-Qordon-Fok* tənliyinin həllinə baxaq. Nöqtəvi nüvənin sferik simmetrik sahəsi $\vec{A} = 0$, $\varphi = \frac{Ze}{r}$ potensialları ilə təsvir olunduğundan K-Q-F. tənliyinin Hamilton operatoru

$$\check{H} = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2} - \frac{Ze^2}{r} \quad (63.1)$$

zamandan asılı olmur. Sistemin stasionar halları üçün (62.5)-dən

$$\left[\left(E + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 + \hbar^2 c^2 \vec{\nabla}^2 - m_0^2 c^4 \right] \Psi = 0 \quad (63.2)$$

tənliyi alınır. Bu tənlikdə dəyişənlərə ayırma əməliyyatını §39-da olduğu kimi apararaq.

Sferik koordinat sistemində

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2$$

olduğundan, (63.2) tənliyinin həllini

$$\Psi = \frac{1}{r} u_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (63.3)$$

kimi axtarmaq olar. Onda

$$\nabla_{\theta, \varphi}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

bərabərliyini nəzərə alsaq, hərəkət miqdarı momentinin müəyyən qiymətinə uyğun radial tənlik

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2Z\alpha E}{\hbar cr} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{r^2} - \frac{m_0^2 c^4 - E^2}{\hbar^2 c^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (63.4)$$

şəklini alar, burada $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ – incə quruluş sabitidir.

Axırıncı tənliyi həll etmək üçün §39-da tətbiq olunan metoddan istifadə edək. Bunun üçün (63.4) tənliyində

$$\rho = \beta r, \quad \beta = \frac{\alpha E}{\hbar c}, \quad \varepsilon = \frac{E^2 - m_0^2 c^4}{\hbar^2 c^2} \quad (63.5)$$

əvəzlərini daxil etməklə adsız kəmiyyətlərə keçək. Alınan

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{\rho^2} \right) u_l(\rho) = 0 \quad (63.6)$$

tənliyi (40.17) Şredinger tənliyinin demək olar ki, üzərinə düşür. Bu oxşarlığı daha da gücləndirmək üçün

$$l'(l'+1) = l(l+1) - \alpha^2 Z^2 \quad (63.7)$$

əvəzini götürək. Onda (40.17) ilə (63.6) arasında tam oxşarlıq alınır:

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l'(l'+1)}{\rho^2} \right) u_{l'}(\rho) = 0. \quad (63.8)$$

(63.8) tənliyinin ρ dəyişənindən asılılığı tamamilə (40.17)-də olduğu kimidir. Lakin tənliklərə daxil olan sabitlər bir-birindən fərqlənir. Yəqin ki, bu fərq (63.8)-in həlli xarakterini dəyişə bilməz. (63.8) tənliyinə daxil olan və ρ^2 ilə tərs mütənasib, relyativistik cazibə potensial enerjisi rolunu oynayan əlavə $\frac{\alpha^2 Z^2}{\rho^2}$ həddinə gəldikdə isə o, bəzi hallarda tənliyin həlli xarakterinə müəyyən təsir göstərə bilər.

(63.8) ilə (40.17)-nin müqayisəsi göstərir ki, (63.8)-in həlli tam mənasilə (40.17)-nin həlli yolu ilə aparıla bilər. (63.8) tənliyinin həllinin $\rho \rightarrow \infty$ -da sonlu qalması üçün $u_{l'}(\rho)$ funksiyası $e^{-\rho}$ vuruğu ilə mütənasib olmalıdır:

$$u_r(\rho) = e^{-\gamma\rho} f_r(\rho), \quad \gamma = \sqrt{-\varepsilon}. \quad (63.9)$$

$f_r(\rho)$ funksiyası isə görünüşcə (40.19) tənliyinin üzərinə düşən tənliyi ödəyir. $f_r(\rho)$ -nin $\rho \rightarrow 0$ -da sonlu qalması üçün isə o,

$$f_r(\rho) = \rho^{l'+1} \sum_k a_k \rho^k \quad (63.10)$$

şəklində axtarılır. Yəqin ki, $\rho^{l'+1}$ vuruğu burada dalğa funksiyasının $\rho \rightarrow 0$ -da sonlu qalmasını təmin etməlidir. l' isə (63.7) tənliyini ödəyir. (63.7) -nin sağ tərəfi sabit kəmiyyət olduğundan onun həlli $l'^2 + l' + a = 0$ kvadrat tənliyinin həlli kimi axtarıla bilər:

$$l'_\pm = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2}. \quad (63.11)$$

Qeyri-relyativistik halda, yəni $\alpha^2 Z^2 \rightarrow 0$ -da l' üçün (63.7)-dən $l'_+ = l$, $l'_- = -l - 1$ kimi iki həll alınır. (63.10)-da $f_r(\rho)$ funksiyasının bu halda sonlu qalması üçün, Şredinger nəzəriyyəsində olduğu kimi, l' üçün $l' = l'_+ = l$ həllini saxlamaq lazımdır. l' üçün l'_+ kökünün götürülməsi tələbi o qədər də inandırıcı deyildir, çünki $\alpha Z < \frac{1}{2}$ -də (63.11)-dəki l'_+ və l'_- köklərinin hər ikisi l -in bütün qiymətlərində həqiqi kəmiyyətlərdir və $l=0$ -da $l'_+ < 0$ qalır. Bu zaman $u_r(\rho)$ funksiyası $\rho \rightarrow 0$ da sonlu qalmır. $Z\alpha > \frac{1}{2}$ olduqda isə $l=0$ -da l'_+ kökü kompleks kəmiyyət olur və $u_r(\rho)$ funksiyasının kəsilməz rəqslərinə gətirir.

Bu halda elektronun enerji spektri kəsilməz olur və elektronun nüvə üzərinə «düşməsi» ehtimalı yaranır. Deməli, belə kökü götürmək həqiqətə uyğun nəticəyə gətirmir. Buradan görünür ki, $\alpha Z \neq 0$ olduqda dalğa funksiyasının hər yerdə sonlu qaldığını tələb etmək mümkün deyildir. Lakin onun kvadratik inteqrallanan olmasını, yəni normalanma şərtinin ödədiyini tələb etmək lazımdır. Bu axırıncı tələb isə yalnız l'_+ kökü üçün ödənilir.

(63.10)-a daxil olan sıranın sonlu qalması tələbi isə sonsuz sıranın sonlu sayda hədlərdən ibarət sıraya, yəni çoxhəddiyə (polinoma) çevrilməsinə gətirir. Sıranın hər hansı n_r həddən sonra gələn hədlərin sıfıra bərabər olması üçün, (40.24) oxşar olaraq,

$$2\gamma(n_r + l' + 1) - 2Z = 0 \quad (63.12)$$

şerti ödənilməlidir. Burada $n_r + l' + 1$ cəmini n' ilə işarə etsək, l' -in l'_+ kökündə

$$n' = n_r + l'_+ + 1 = n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2 Z^2} \quad (63.13)$$

olar. $(n' - l' - 1)$ ədədinin mənfəi ədəd olması tələbindən (63.10)-dakı sıra $F(-(n' - l' - 1), 2l' + 2, \rho)$ cırlaşmış hiperhəndəsi funksiya bərabər olar. Beləliklə, $u_r(\rho)$ funksiyası

$$u_r(\rho) = \rho^{l'+1} F(-(n' - l' - 1), 2l' + 2, \rho)$$

və buradan sistemin radial funksiyası üçün

$$R_r(\rho) = \rho^{l'} e^{-\gamma\rho} F(-(n' - l' - 1), 2l' + 2, \rho) \quad (63.14)$$

ifadəsi alınır.

(63.9), (63.12) və (63.13) ifadələrindən

$$\gamma = \frac{Z}{n'} \text{ və ya } \gamma^2 = \frac{Z^2}{n'^2} = -\varepsilon. \quad (63.15)$$

(63.5) bərabərliklərində ε -nin məxrəcindəki β -ni onun ifadəsi ilə əvəz etsək, sistemin tam enerjisi

$$E = \frac{m_0 c^2}{\left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n'^2}\right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (63.16)$$

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ incə quruluş sabitinin qiyməti kiçik olduğuna görə, çox ağır atomlar müstəsna olmaq şərtilə, bütün atomlar üçün αZ hasilı vahiddən kiçik qalacaq. (63.16)-da n' -i onun (63.13)-dəki qiyməti ilə əvəz edəndən sonra alınan ifadəni αZ -in üstlərinə görə sıraya ayırsaq,

$$E_{nl} = m_0 c^2 \left\{ 1 - \frac{Z^2 a^2}{2n^2} - \frac{Z^4 a^4}{2n^4} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right\} \quad (63.17)$$

alınır, burada $n = n_r + l + 1$ – baş kvant ədədidir.

(63.17)-dəki birinci hədd zərrəciyin sükunət enerjisini, ikinci hədd

$$-\frac{m_0 c^2 \alpha^2 Z^2}{2n^2} = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = E_n^0.$$

m_0 kütləli zərrəciyin $v \ll c$ qeyri-relyativistik yaxınlaşmada Kulon sahəsin-dəki hərəkətinin enerjisi (bax: (40.26), üçüncü hədd

$$E_{nl}^r = -\frac{m_0 c^2 Z^4 \alpha^4}{2n^4} \left[\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right] = -\frac{E_n^0 Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2 n^2} \left[\frac{3}{4} - \frac{n}{l+1/2} \right] \quad (63.18)$$

isə enerjiyə relyativistik əlavədir.

E_{nl}^r -in n -dən başqa l kvant ədədindən də asılılığı göstərir ki, relyativistik effektlərin nəzərə alınması atomun enerji səviyyələrinin qeyri-relyativistik nəzəriyyədə olan (§39 bax) l -ə görə cırlaşmanı aradan götürür. Başqa sözlə atomun n -in müəyyən qiymətinə uyğun E_{nl} enerji səviyyəsi $l=0, 1, \dots, n-1$, yəni n sayda bir-birinə çox yaxın yerləşmiş müxtəlif səviyyələrə parçalanır.

Alınan nəzəri nəticələri təcrübə ilə müqayisə etmək üçün hidrogenin Balmer seriyasında ($n=2$) spektral xəttin müşahidə olunan parçalanmasını (dubletin iki yaxın xətti arasındakı məsafəni) (63.17)-dən alınan qiymətilə müqayisə edək. (63.17)-dən ($n=2$ də $l=0,1$ olduğundan) bu parçalanma üçün

$$\Delta\omega = \frac{E_{21} - E_{20}}{\hbar} = \frac{8 m_0 e^4 \alpha^2}{3 \hbar^3 16} \quad (63.19)$$

alınır. Təcrübədən $\Delta\omega$ üçün alınan qiymət isə (63.19) ilə verilən qiymətdən üç dəfə kiçikdir. Bu uyğunsuzluq göstərir ki, atomun spektrində müşahidə olunan incə quruluş, yalnız zərrəciyin kütləsinin sürətdən asılılığı (relyativistik effekt) ilə təyin olunmur. Bundan başqa, §75-də görəcəyimiz kimi, elektronun spinə malik olması faktı da spektrin incə quruluşunun yaranma-sına səbəb olur.

Yuxarıda qeyd etdik ki, K–Q–F. tənliyinə daxil olan Ψ -dalğa funksiyası ya skalyar və ya da psevdoskalyar kəmiyyətdir, yəni tənlik yalnız spini sıfır

olan zərrəciklərin (π , K və δ mezonlar qrupu) xassələrini təsvir edə bilər. Elektronun spini isə $1/2$ -dir və o, spini yarım tam olan zərrəciklərə, yəqin ki, tətbiq oluna bilməz. Belə zərrəciklər üçün çox ehtimal ki, başqa tənlik yazılmalıdır.

Qeyd edək ki, K - Q - F tənliyi spini vahid olan zərrəciklərin təsviri üçün də tətbiq oluna bilər. Məsələn, fotonun hərəkətini təsvir etmək üçün K - Q - F tənliyində $m_0=0$ götürülməli, və $\Psi(\vec{r}, t)$ funksiyası elektromaqnit sahəsinin $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektor potensialı ilə əvəz olunmalıdır.

§64. Dirak tənliyi

Qeyri-relyativistik (Şredinger) və o vaxtın relyativistik (K - Q - F) kvant mexanikası ilə təcrübi nəticələr arasındakı uyğunsuzluqları aradan götürmək və ehtimal sıxlığının mənfi işarəyə malik olması ilə əlaqədar çətinlikləri həll etmək məqsədilə Dirak, $\frac{\partial}{\partial t}$ -yə və buradan da $\vec{\nabla}$ operatoruna görə xətti relyativistik invariant tənlik tapmaq məsələsini qarşıya qoydu.

Dirak düşündü ki, a^2+b^2 kvadratik ifadəni $(a+ib)(a-ib)$ kimi xətti vuruqlara ayırdıqda adi fəzanın vahidindən əlavə kompleks fəzanın $i = \sqrt{-1}$ vahidini daxil etməli oluruqsa, müxtəlif riyazi fəzaların vahidlərindən istifadə etməklə, istənilən kvadratik ifadəni, o cümlədən $\vec{E}^2 - c^2\vec{p}^2 - m_0^2c^4$ -ü xətti vuruqların hasili şəklində yazmaq olar. Beləliklə, Dirak (62.3) tənliyini

$$(E - c\alpha_1\tilde{p}_1 - c\alpha_2\tilde{p}_2 - c\alpha_3\tilde{p}_3 - \alpha_4m_0c^2)(E + c\alpha_1\tilde{p}_1 + c\alpha_2\tilde{p}_2 + c\alpha_3\tilde{p}_3 + \alpha_4m_0c^2)\Psi = 0 \quad (64.1)$$

kimi iki xətti operatorun hasili ilə təyin olunan tənlik şəklində yazmağı təklif etdi. Burada α_1 , α_2 , α_3 , α_4 -zaman və koordinatlardan asılı olmayan ixtiyari riyazi fəzaların vahidləridir. (64.1)-də birinci mütərizəni \tilde{M} , ikincini \tilde{N} ilə işarə etsək, onu

$$\tilde{M}\tilde{N}\Psi = 0 \quad \text{və ya} \quad \tilde{N}\tilde{M}\Psi = 0 \quad (64.2)$$

kimi yazmaq olar. \tilde{M} və \tilde{N} müxtəlif operatorlar olduğundan, yəqin ki, birinin məxsusi funksiyaları digərinin məxsusi funksiyaları üzərinə düşmür (belə ki, xarici sahədəki hərəkət halında onlar kommutasiya etmir). Ona

görə də $\tilde{M}\Psi = 0$ ($\tilde{N}\Psi \neq 0$) və ya da $\tilde{N}\Psi = 0$ ($\tilde{M}\Psi \neq 0$) olar. Başqa sözlə,

$$(\tilde{E} - c\alpha_i\tilde{p}_i - \alpha_4 m_o c^2)\Psi = 0 \quad (64.3)$$

və ya

$$(\tilde{E} + c\alpha_i\tilde{p}_i + \alpha_4 m_o c^2)\Psi = 0 \quad (64.4)$$

tənliyini əsas götürmək olar. Bu tənliklərin hər ikisi, biri digərindən asılı olmayaraq, **Dirak tənliyi** adlanır. Onların hər ikisi eyni fiziki nəticələrə gətirir. Başqa sözlə, baxılan sistemin hərəkət xarakteri hansı tənliyin əsas tənlik götürülməsindən asılı deyildir. Müəlliflərin əksəriyyəti (64.3) tənliyini əsas götürürlər. Burada biz də həmin tənliklə işləyəcəyik.

α_i və α_4 kəmiyyətlərinin mahiyyətini başa düşmək və analitik ifadələrini tapmaq üçün (64.3) tənliyindən (62.3) tənliyinə keçək. Bunun üçün təsir qanunu məlum olmayan α_i və α_4 kəmiyyətlərinə operator kimi baxmaq şərtilə (64.1)-ə daxil olan operatorların hasilini açaq:

$$\left\{ E^2 - \sum_{i=1}^3 \alpha_i^2 \tilde{p}_i^2 - \sum_{i \neq k} (\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i) \tilde{p}_i \tilde{p}_k - \right. \\ \left. - \sum_i (\alpha_4 \alpha_i + \alpha_i \alpha_4) \tilde{p}_i m_o c^2 - \alpha_4^2 m_o^2 c^4 \right\} \Psi = 0.$$

Bu tənliyin (62.3) tənliyinin üzərinə düşməsi üçün

$$\begin{aligned} \alpha_1^2 &= \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \alpha_4^2 = I \\ \alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i &= 0 \quad (i \neq k) \\ \alpha_i \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_i &= 0 \end{aligned} \quad (64.5)$$

bərabərlikləri ödənilməlidir. Onları bir münasibət şəklində yazmaq olar:

$$\alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \quad (64.6)$$

(burada $\mu, \nu = 1, 2, 3, 4$ qiymətlərini alır). (64.5) və (64.6)-dan görünür ki, α_i və α_4 kəmiyyətləri bir-birilə kommutasiya etmir, deməli onlar adi ədədlər deyil. Bu xassə yalnız operatorlara xasdır.

Buna oxşar münasibətlər Diraka qədər Pauli matrisaları üçün məlum idi. Enerji və impulsun müəyyən qiymətində elektron spininin verilmiş ox (məsələn, z-oxu) üzrə iki müxtəlif proyeksiyaya uyğun halları (hidrogenin

spektrində spektr xətlərinin incə quruluşu) fərqləndirmək üçün Pauli kvant mexanikasına iki sətir-sütunlu matrisalar daxil etmişdi (bax §61).

$$\sigma'_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma'_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma'_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (64.7)$$

(σ'_z -in diaqonal olduğu təsvirdə). Bu matrisalar (64.5)-ə oxşar

$$\begin{aligned} \sigma_x'^2 = \sigma_y'^2 = \sigma_z'^2 = I' \\ \sigma_i' \sigma_k' + \sigma_k' \sigma_i' = 0 \quad (i \neq k) \\ \sigma_i' \sigma_k' = \sum_l i \tilde{\varepsilon}_{ikl} \sigma_l' \end{aligned} \quad (64.8)$$

bərabərliklərini ödəyir. Buna uyğun Pauli tənliyində (bax §61) Ψ -dalğa funksiyası iki komponentli matrisa şəklində götürülür:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}; \Psi^+ = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \end{pmatrix} \quad (64.9)$$

(burada «+» işarəsi ermit qoşmanı, «*» isə kompleks qoşmanı göstərir).

(64.5)-ə daxil olan münasibətlərin sayı (64.8)-dəki münasibətlərin sayından çox olduğundan α_i, α_4 , Dirak matrisaları Pauli matrisaları ilə eyni ola bilməzdi. Müəyyən olundu ki, (64.5) münasibətlərini ödəyən ən aşağı tərtibli (ölçülü) matrisalar dörd sətir-sütunlu matrisalar olmalıdır. Kvant mexaniki sistemin xassələri təsvirin seçilməsindən asılı olmadığına görə (64.5) münasibətlərini ödəyən istənilən təsvirdə seçilmiş matrisalar əsas götürülə bilər. Dirak, öz matrisalarını qurmaq üçün Pauli matrisalarından istifadə etdi:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0' & \sigma_i' \\ \sigma_i' & 0 \end{pmatrix}, \alpha_4 = \rho_3 = \beta = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}. \quad (64.10)$$

Buna Pauli-Dirak təsviri deyilir. Məlumdur ki, unitar çevrilmələrin köməyi ilə bu matrisaları istənilən başqa təsvirdə də yazmaq olar. Bu, heç də alınan fiziki nəticələrin dəyişməsinə gətirmir.

Matrisaların seçilməsi məsələsini axıra çatdırmaq üçün qeyd edək ki, Dirak α_i, α_4 matrisaları əvəzində hər biri üç matrisadan ibarət iki qrup mat-

risa seçmişdi:

$$\sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma'_i & 0' \\ 0' & \sigma'_i \end{pmatrix}, i=1, 2, 3$$

və

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0' & I' \\ I' & 0' \end{pmatrix}, \rho_2 = \begin{pmatrix} 0' & -iI' \\ iI' & 0' \end{pmatrix}, \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}, \quad (64.11)$$

burada σ'_i –Pauli, $0' = \begin{pmatrix} 00 \\ 00 \end{pmatrix}$ – sıfır, $I' = \begin{pmatrix} 10 \\ 01 \end{pmatrix}$ – vahid matrisalardır. α_i, α_4 matrisaları ilə σ_i, ρ_i matrisaları arasında əlaqə

$$\alpha_i = \rho_1 \sigma_i, \alpha_4 = \rho_3 = \beta \quad (64.12)$$

kimidir. [Qeyd edək ki, σ_i və ρ_i matrisaları bir-birilə kommutasiya edir və ayrılıqda (64.4) oxşar münasibətləri ödəyir:

$$\begin{aligned} \sigma_i \rho_k &= \rho_k \sigma_i, \\ \sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i &= 2\delta_{ik}, \\ \rho_i \rho_k + \rho_k \rho_i &= 2\delta_{ik}. \end{aligned} \quad (64.13)$$

Asanlıqla göstərmək olar ki, axırıncı matrisalar

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_k &= -\sigma_k \sigma_i = i \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} \sigma_l \\ \rho_i \rho_k &= -\rho_k \rho_i = i \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} \rho_l \end{aligned} \quad (64.14)$$

buradan da

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_k - \sigma_k \sigma_i &= 2i \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} \sigma_l \\ \rho_i \rho_k - \rho_k \rho_i &= 2i \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} \rho_l \end{aligned} \quad (64.15)$$

münasibətlərini ödəyir.

(64.3) Dirak tənliyini məxsusi qiymət və məxsusi funksiyaaya uyğun

$$\tilde{H}\Psi = E\Psi$$

tənliyi şəklində yazıb, (64.3) ilə müqayisə etsək, Dirak nəzəriyyəsində

$$\tilde{H} = c\alpha_i\tilde{p}_i + \rho_3m_0c^2 = c\tilde{\alpha}\tilde{p} + \rho_3m_0c^2 \quad (64.16)$$

sistemin Hamilton operatoru olur.

Dirak matrisalarının dörd sətir-sütunlu olması dalğa funksiyanın da dörd komponentli seçilməsinə gətirir:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 0 0 0 \\ \Psi_2 0 0 0 \\ \Psi_3 0 0 0 \\ \Psi_4 0 0 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}; \Psi^+ = \begin{pmatrix} \Psi_1^* \Psi_2^* \Psi_3^* \Psi_4^* \\ 0 0 0 0 \\ 0 0 0 0 \\ 0 0 0 0 \end{pmatrix} = (\Psi_1^* \Psi_2^* \Psi_3^* \Psi_4^*). \quad (64.17)$$

Bu funksiyalar Dirak *spinoru* və ya *bispinor* adlanır (bildiyimiz kimi, iki komponentli kəmiyyətə spinor deyilir, məsələn, $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ Pauli funksiyası).

Matrisaların vurulma və toplanma qaydalarına əsasən köstərmək olar ki, (64.3) Dirak tənliyi dörd tənlikdən ibarət aşağıdakı kimi

$$\begin{aligned} (E - m_0c^2)\Psi_1 - c(\tilde{p}_x - i\tilde{p}_y)\Psi_4 - c\tilde{p}_z\Psi_3 &= 0 \\ (E - m_0c^2)\Psi_2 - c(\tilde{p}_x + i\tilde{p}_y)\Psi_3 + c\tilde{p}_z\Psi_4 &= 0 \\ (E + m_0c^2)\Psi_3 - c(\tilde{p}_x - i\tilde{p}_y)\Psi_2 - c\tilde{p}_z\Psi_1 &= 0 \\ (E + m_0c^2)\Psi_4 - c(\tilde{p}_x + i\tilde{p}_y)\Psi_1 + c\tilde{p}_z\Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (64.18)$$

bircins tənliklər sisteminin yığcam (matrisa şəklində) şəklidir.

Nəhayət müasir fizikada Dirak nəzəriyyəsində istifadə olunan matrisalarla oxucunu tanış etmək üçün Dirak tənliyini kovariant və ya dördölçülü şəkildə yazaq.

§ 65. Dirak tənliyinin kovariant şəkli

(64.3) Dirak tənliyində \tilde{E} enerji və \tilde{p} impuls operatorlarını uyğun ifa-

dələr ilə əvəz edək

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} - \rho_3 m_0 c^2 \right) \Psi = 0. \quad (65.1)$$

Bunun hər bir həddini $\hbar c$ -yə bölüb, birinci həddə i -ni məxrəcə keçirəndən sonra tənliyi soldan ρ_3 -ə vursaq

$$\left(\rho_3 \frac{\partial}{\partial(ict)} - i\rho_3 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} + k_0 \right) \Psi = 0 \quad (65.2)$$

olar.

$$\gamma_4 = \rho_3, \quad \gamma_i = -i\rho_3 \alpha_i = -i\gamma_4 \alpha_i \quad (65.3)$$

şəkildə yeni γ_μ (qamma) matrisalar daxil etdikdə (65.2) tənliyi ($x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$, $x_4=ict$ metrikasında)

$$\left(\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + k_0 \right) \Psi = 0 \quad (65.4)$$

şəklini alır. γ_μ (γ_1, γ_4) matrisaları, (65.3)-də göstərilən mənada, dördölçülü

vektor təşkil edir. (65.4) tənliyi Dirak tənliyinin kovariant şəklidir. $\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu}$

hasili iki eyni təbiətli dördölçülü vektorun skalyar hasili olduğundan, o həmişə skalyar kəmiyyətdir. Beləliklə, Dirak tənliyi relyativistik invariant tənlikdir, yəni o, Lorens çevrilmələri zamanı şəklini dəyişmir.

(64.5) və (64.13) münasibətlərindən istifadə edərək, asanlıqla göstərmək olar ki, γ_μ -matrisaları üçün də (64.6) münasibəti ödənilir:

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (65.5)$$

İndi də Ψ^+ ermit-qoşma funksiyanın ödədiyi tənliyi tapaq. Yuxarıda gördük ki, Şredinger və Kleyn–Qordon–Fok tənliklərindən fərqli olaraq, Dirak tənliyi matrisa şəklində yazılmış bircins sistem tənlikdir. Ona görə də verilmiş matrisaya (operatora) uyğun ermit-qoşma matrisa tapmaq üçün kompleks qoşma və transpozisiya (sətir və sütunların yerini dəyişmək)

əmaliyyatlarını aparmaq lazımdır. Ψ (64.17) ilə verilmiş matrisə olduğundan Ψ^* ermit-qoşma funksiya üçün Dirak tənliyi (65.1)-dən

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} - i\hbar c \frac{\partial \Psi^+}{\partial x_i} \alpha_i - \Psi^+ m_0 c^2 \rho_3 = 0 \quad (65.6)$$

və ya (65.2)-dən

$$-\frac{\partial}{\partial(ict)} (\rho_3 \Psi^+)^+ + \frac{\partial}{\partial x_i} (-i\rho_3 \alpha_i \Psi^+)^+ + k_0 \Psi^+ = 0 \quad (65.6')$$

Handwritten notes:
 $\Psi^+ \rho_3$ (with arrow pointing to the first term)
 $\Psi^+ (\rho_3 \Psi^+)^+ = \Psi^+ \gamma^+$ (with arrow pointing to the second term)

şəkində yazılır. Ermit-qoşma matrisələrin tapılması qaydasından istifadə etsək,

$$(\rho_3 \Psi^+)^+ = \Psi^+ \rho_3, \quad (-i\rho_3 \alpha_i \Psi^+)^+ = \Psi^+ (-i\rho_3 \alpha_i)^+ = \Psi^+ \gamma_i^+$$

olar. Asanlıqla göstərmək olar ki, $\alpha_i, \rho_i, \sigma_i$ və onların törəməsi olan γ_μ matrisələri də ermit-qoşma (özünə-qoşma) matrisələrdir:

$$\gamma_4^+ = \rho_3^+ = \rho_3 = \gamma_4, \quad \gamma_i^+ = (-i\rho_3 \alpha_i)^+ = i\alpha_i^+ \rho_3 = -i\rho_3 \alpha_i = \gamma_i.$$

Bunları (65.6)-da nəzərə alsaq,

$$\frac{\partial \Psi^+}{\partial x_4} \gamma_4^+ - \frac{\partial \Psi^+}{\partial x_i} \gamma_i - k_0 \Psi^+ = 0.$$

Bu tənliyi kovariant şəkə salmaq üçün ikinci həddin işarəsini dəyişmək lazımdır. Bu məqsədlə onu sağdan γ_4 vuraq, (65.5)-dən $\gamma_i \gamma_4 = -\gamma_4 \gamma_i$ olduğunu nəzərə alıb

$$\bar{\Psi} = \Psi^+ \gamma_4 \quad (65.7)$$

əvəzini daxil etsək, yuxarıdakı tənlik

$$\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x_\mu} \gamma_\mu - k_0 \bar{\Psi} = 0 \quad (65.8)$$

kovariant şəkildə yazıla bilər.

§ 66. Kəsilməzlik tənliyi. Ehtimal sıxlığı və ehtimal cərəyanı sıxlığı

Yuxarıda dediklərimizə əsasən (64.3) və ona qoşma (65.1) tənliklərini

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + i\hbar c \alpha_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} - \rho_3 m_0 c^2 \Psi &= 0, \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} - i\hbar c \frac{\partial \Psi^+}{\partial x_i} \alpha_i - m_0 c^2 \Psi^+ \rho_3 &= 0 \end{aligned}$$

şəklində yazaq. Burada birinci tənliyi soldan Ψ^* -ya, ikinci tənliyi isə sağdan Ψ -yə vurub, birincidən ikincini çıxanda ρ_3 ilə mütənəsb hədlər ixtisar olunur. Nəticəni $i\hbar$ -ə böləndən sonra

$$\Psi^+ \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} \Psi + c \Psi^+ \alpha_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} + c \frac{\partial \Psi^+}{\partial x_i} \alpha_i \Psi = 0$$

alınar. α_i matrisaları zaman və koordinatlardan asılı deyil, onda

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^+ \Psi) + \frac{\partial}{\partial x_i} (c \Psi^+ \alpha_i \Psi) = 0$$

olar. Burada

$$\rho = \Psi^+ \Psi, \quad j_i = c \Psi^+ \alpha_i \Psi \quad (66.1)$$

əvəzlərini qəbul etdikdə

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{və ya} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad (66.2)$$

kəsilməzlik tənliyinə gəlirik. Beləliklə, ρ – ehtimal sıxlığı, \vec{j} isə ehtimal cərəyanı sıxlığıdır. (66.1)-dən görünür ki, Dirak nəzəriyyəsində (Şredingərdə olduğu kimi) ρ həmişə müsbət kəmiyyətdir. Dirak bunu özünə məqsəd qoymuş və ona nail olmuşdu. Lakin adətən kəsilməzlik tənliyinə elek-

trik yükünün (və ya başqa təbiətli yükün) saxlanması baxımından yanaşılırsa, yükün sıxlığını ifadə edən

$$\rho_e = e\rho = e\Psi^+\Psi \quad (66.3)$$

kəmiyyəti yükün işarəsindən asılı olaraq, mənfi və müsbət ola bilər və yükün saxlanma qanunu

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \text{div } \vec{j}_e = 0 \quad (66.4)$$

şəklində yazılar, burada

$$\vec{j}_e = ec\Psi^+\vec{\alpha}\Psi \quad (66.5)$$

elektrik cərəyanı sıxlığıdır. (66.2) kəsilməzlik tənliyi (66.4) mənada başa düşülsə, ρ_e və \vec{j}_e -də «e» indeksini yazmamaq da olar.

(66.1) və (64.17)-dən matrisaların hasili qaydasına əsasən

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\rho_e}{e} = \Psi^+\Psi = (\Psi_1^*\Psi_2^*\Psi_3^*\Psi_4^*) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \\ &= \Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2 + \Psi_3^*\Psi_3 + \Psi_4^*\Psi_4 \end{aligned}$$

bir elementdən ibarət matrisa, yəni adi funksiyadır, beləcə də j_i -nin ifadəsini yazmaq olar, məsələn

$$\begin{aligned} j_1 &= \frac{j_{1e}}{ec} = \Psi^+\alpha_1\Psi = (\Psi_1^*\Psi_2^*\Psi_3^*\Psi_4^*) \begin{pmatrix} 0001 \\ 0010 \\ 0100 \\ 1000 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = \\ &= \Psi_1^*\Psi_4 + \Psi_2^*\Psi_3 + \Psi_3^*\Psi_2 + \Psi_4^*\Psi_1 \end{aligned}$$

Kəsilməzlik tənliyi kovariant şəkildə daha aydın məna kəsb edir. (65.3) və (65.7)-dən

$$\rho = e\Psi^+\Psi = e\Psi^+\gamma_4\gamma_4\Psi = e\bar{\Psi}\gamma_4\Psi$$

$$j_i = ec\Psi^+\alpha_i\Psi = ec^i\Psi^+\gamma_4\gamma_i\Psi = iec\bar{\Psi}\gamma_i\Psi$$

Bunları (66.4)-də yazıb, hər iki həddi *ic*-yə bölsək,

$$\frac{\partial}{\partial(ict)}\bar{\Psi}\gamma_4\Psi + \frac{\partial}{\partial x_i}\bar{\Psi}\gamma_i\Psi = 0$$

alınar.

$$j_4 = e\bar{\Psi}\gamma_4\Psi, \quad j_i = e\bar{\Psi}\gamma_i\Psi \quad (66.6)$$

kimi $j_\mu(j_i, j_4)$ dördölçülü kəmiyyət daxil edəndə kəsilməzlik tənliyi kovariant şəkildə

$$\frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} = 0 \quad (66.7)$$

olur. (66.7) tənliyinin Lorens çevrilmələrinə görə invariant qalması üçün $j_\mu = e\bar{\Psi}\gamma_\mu\Psi$ kəmiyyəti dördölçülü polyar vektor olmalıdır. Əksər hallarda kəmiyyəti $\bar{\Psi}\tilde{L}\Psi$ şəklində yazmadan, sadəcə deyirlər ki, $\alpha_\mu(-i\alpha_i, I)$ və ya $\gamma_\mu(\gamma_i, \gamma_4)$ kəmiyyətləri (matrisaları) dördölçülü vektor təşkil edir.

§67. Dirak nəzəriyyəsində spin problemi

Atomar sistemlərin spektrində müşahidə olunan incə quruluşu izah etmək üçün atomda elektronun orbital hərəkət miqdarından başqa daha bir momentə–məxsusi momentə (yəni spinə) malik olduğu fərziyyəsi irəli sürüldü. Bir optik elektronlu atomar sistemlərin spektrində spektral xəttin iki yaxın xətdən ibarət olduğunu izah etmək üçün fərz olundu ki, enerjinin, hərəkət miqdarı momentinin və onun proyeksiyalardan birinin müəyyən qiymətində məxsusi moment (spin) verilmiş istiqamətdə yalnız iki proyeksiyaya malikdir.

Orbital momentin, məsələn, *z* oxu üzrə proyeksiyasının $L_z = m\hbar$ ($m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \neq$) bərabər olmasına oxşar olaraq spinin *z* oxu üzrə proyeksiyasının da

$$S_z = m_s \hbar$$

olduğunu qəbul etmək olar. Lakin, bu halda m_s yalnız $m_s = \pm \frac{1}{2}$ kimi iki qiymət almalıdır. Bu baxımdan Pauli kvant mexanikasına məxsusi qiymətlər spektri iki qiymətdən ibarət olan operatorlar və ya matrisalar daxil etdi. O, spin operatorunu

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}' \quad (67.1)$$

kimi seçməyi təklif etdi, burada $\vec{\sigma}'(\sigma'_x, \sigma'_y, \sigma'_z)$ ifadələri (64.7) ilə verilmiş Pauli matrisalarıdır.

Dirak nəzəriyyəsində spin operatoru üçün (67.1) ifadəsi saxlanır, Pauli matrisaları əvəzində isə ifadələri (64.11) ilə verilmiş Dirak matrisaları götürülür.

Lakin Dirak nəzəriyyəsində nə orbital hərəkət miqdarı momenti operatoru $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$ və nə də spin operatoru \vec{S} (64.16) ilə verilmiş \tilde{H}^D Dirak Hamilton operatoru ilə kommutasiya etmir, yəni sistemin enerjisi ilə onlar eyni zamanda müəyyən qiymətə malik olmur. Bunu isbat etmək üçün \vec{L}_z və \vec{S}_z operatorlarının \tilde{H}^D ilə kommutasiyasını yoxlamaq kifayətdir:

$$(\vec{L}_z \tilde{H}^D - \tilde{H}^D \vec{L}_z) \Psi = \{ \vec{L}_z (c\vec{\alpha}\vec{p} + \rho_3 m_0 c^2) - (c\vec{\alpha}\vec{p} + \rho_3 m_0 c^2) \vec{L}_z \} \Psi$$

\vec{L}_z ilə \vec{p}_z -in kommutasiya etdiyini (bax (13.13) və $\rho_3 m_0 c^2$ koordinatlardan asılı olmadığını nəzərə alsaq,

$$(L_z \tilde{H}^D - \tilde{H}^D L_z) \Psi = c\alpha_1 (\vec{L}_z \vec{p}_x - \vec{p}_x \vec{L}_z) + c\alpha_2 (\vec{L}_z \vec{p}_y - \vec{p}_y \vec{L}_z) \Psi,$$

(13.13) münasibətlərindən

$$\vec{L}_z \tilde{H}^D - \tilde{H}^D \vec{L}_z = i\hbar c (\alpha_1 \vec{p}_y - \alpha_2 \vec{p}_x) \neq 0 \quad (67.2)$$

alınır. Eynilə bunun kimi

$$(\vec{S}_z \tilde{H}^D - \tilde{H}^D \vec{S}_z) \Psi = \frac{\hbar}{2} \left\{ \sigma_z (c\vec{\alpha}\vec{p} + \rho_3 m_0 c^2) - (c\vec{\alpha}\vec{p} + \rho_3 m_0 c^2) \sigma_z \right\} \Psi$$

σ_i ilə ρ_i və σ_z ilə $\alpha_z = \rho_i \sigma_z$ matrisaları kommutasiya etdiyindən

$$(\tilde{S}_z \tilde{H}^D - \tilde{H}^D \tilde{S}_z) \Psi = \frac{\hbar}{2} c \rho_1 \{ (\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z) \tilde{p}_x + (\sigma_z \sigma_y - \sigma_y \sigma_z) \tilde{p}_y \} \Psi,$$

(64.14) münasibətlərindən $\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i \sigma_y$, və $\sigma_z \sigma_y = -\sigma_y \sigma_z = -i \sigma_x$ olduğundan

$$\tilde{S}_z \tilde{H}^D - \tilde{H}^D \tilde{S}_z = i \hbar c (\alpha_2 \tilde{p}_x - \alpha_1 \tilde{p}_y) \quad (67.3)$$

alınır.

(67.2) və (67.3) münasibətlərindən görünür ki, sistemin orbital hərəkət miqdarı momenti ilə spin momentinin cəmi olan

$$\tilde{\tilde{J}} = \tilde{\tilde{L}} + \tilde{\tilde{S}} \quad (67.4)$$

tam moment operatorunun \tilde{J}_z (eləcə də \tilde{J}_x, \tilde{J}_y) komponenti \tilde{H}^D operatoru ilə kommutasiya edir:

$$(\tilde{J}_z \tilde{H}^D - \tilde{H}^D \tilde{J}_z) \Psi = 0$$

yəni

$$(\tilde{\tilde{J}} \tilde{H}^D - \tilde{H}^D \tilde{\tilde{J}}) \Psi = 0 \quad (67.5)$$

olur. Beləliklə, $\tilde{\tilde{J}}$ və \tilde{H}^D operatorları ümumi məxsusi funksiyalara malikdir və sistemin enerjisi ilə onun tam momenti eyni zamanda müəyyən qiymət ala bilər.

Yuxarıda dediklərimizdən çıxır ki, Dirak nəzəriyyəsində spin, Pauli tənliyində olduğu kimi, ona xaricdən əlavə olunmur. Dirak tənliyinin özündə o, öz əksini tapmış olur.

§68. Dirak matrisalarının tenzor ölçüsü və fiziki mahiyyəti

Yuxarıda qeyd etdik ki, $\alpha_\mu (-i\alpha_i, I)$ yaxud $\gamma_\mu (\gamma_i, \gamma_4)$ matrisalar çoxluğu dördölçülü vektor təşkil edir. Dirak nəzəriyyəsində təsadüf olunan

digər matrisaların da tenzor ölçüsünü təyin edək. Bunun üçün $E=mc^2$ ifadəsini

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{m_0 c^2 (1 - \beta^2)}{\sqrt{1 - \beta^2}} + \frac{m_0 c^2 \beta^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

şəkildə yazaq. $\beta = \frac{v}{c}$ olduğunu nəzərə alsaq

$$E = m v^2 + m_0 c^2 \sqrt{1 - \beta^2} \quad (68.1)$$

olar. Məlumdur ki, kvant mexanikasında fiziki kəmiyyətin orta qiyməti onun klassik qiyməti üzərinə düşür (Erenfest teoremləri). Dirak nəzəriyyə-sində enerjinin orta qiyməti (64.16)-dan

$$\bar{E} = \int \Psi^+ \tilde{H} \Psi (d\vec{r}) = c \int \Psi^+ \tilde{\alpha} \vec{p} \Psi (d\vec{r}) + m_0 c^2 \int \Psi^+ \rho_3 \Psi (d\vec{r})$$

və ya

$$\bar{E} = c \bar{\alpha} \vec{p} + m_0 c^2 \bar{\rho}_3. \quad (68.2)$$

(68.1) ilə (68.2) -nin müqayisəsindən

$$\bar{v} = c \bar{\alpha} = c \int \Psi^+ \vec{\alpha} \Psi (d\vec{r}), \text{ yaxud } \bar{\alpha} = \frac{\bar{v}}{c} \quad (68.3)$$

$$\bar{\rho}_3 = \int \Psi^+ \rho_3 \Psi (d\vec{r}) = \sqrt{1 - \beta^2}$$

alınar. Deməli, $\vec{\alpha}$ -matrisası $\frac{\bar{v}}{c}$ fiziki kəmiyyətinə uyğun üçölçülü vektor operator, ρ_3 isə bir komponentli $\sqrt{1 - \beta^2}$ skalyar kəmiyyətə uyğun skalyar operatorudur. Buradan çıxır ki, zərrəciyin sükunət kütləsini də operator hesab etmək olar. Doğrudan da

$$m_0 = m \sqrt{1 - \beta^2} = m \rho_3 = \frac{m}{\rho_3}. \quad (\rho_3^2 = 1) \quad (68.4)$$

Digər matrisaların tenzor ölçüsünü tapmaq məqsədilə Dirak tənliyini xarici elektromaqnit sahəsindəki hərəkət üçün yazaq. Bunun üçün, Şredinqer nəzəriyyəsində olduğu kimi, (64.3) tənliyində \vec{E} -ni $\vec{E} - e\varphi$, \vec{p} -ni isə $\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ ilə əvəz etmək lazımdır, burada $\varphi(\vec{r}, t)$, $\vec{A}(\vec{r}, t)$ -elektromaqnit sahəsinin skalyar və vektorial potensiallarıdır. Bu halda (64.3) tənliyi

$$\left\{ \vec{E} - e\varphi - c\alpha\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) - \rho_3 m_0 c^2 \right\} \Psi = 0 \quad (68.5)$$

olar. (68.5)-ə soldan $\vec{E} - e\varphi + c\alpha\vec{P} + \rho_3 m_0 c^2$ operatoru ilə təsir etsək (burada $\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ -dir):

$$(E - e\varphi + c\alpha_i \vec{P}_i + \rho_3 m_0 c^2)(E - e\varphi - c\alpha_k P_k - \rho_3 m_0 c^2)\Psi = 0.$$

Mötərizələri bir-birinə vurandan sonra oxşar (eyni) hədləri ixtisar edib, Dirak matrisalarının xassələrinə görə cəmi sifra bərabər olan hədləri atsaq,

$$\left\{ (\vec{E} - e\varphi)^2 + c\alpha_i \vec{P}_i (\vec{E} - e\varphi) - (\vec{E} - e\varphi) c\alpha_i \vec{P}_i - c^2 \sum_{i,k} \alpha_i \alpha_k \vec{P}_i \vec{P}_k - \rho_3^2 m_0^2 c^4 \right\} \Psi = 0 \quad (68.6)$$

alınar. Asanlıqla göstərmək olar ki,

$$\begin{aligned} \text{a) } c \sum_i \left\{ \alpha_i \vec{P}_i (\vec{E} - e\varphi) - (\vec{E} - e\varphi) \alpha_i \vec{P}_i \right\} \Psi &= -ie\hbar c \alpha_i \left(-\frac{\partial \varphi}{\partial x_i} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_i}{\partial t} \right) \Psi = \\ &= -ie\hbar c \vec{\alpha} (-\text{grad} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}) \Psi = -ie\hbar c \vec{\alpha} \vec{\mathcal{E}} \Psi \end{aligned}$$

$$\text{b) } (\vec{E} - e\varphi)^2 \Psi = (\vec{E} - e\varphi)(\vec{E} - e\varphi)\Psi = (E - e\varphi)^2 \Psi - i\hbar e \frac{\partial \varphi}{\partial t} \Psi$$

$$\text{v) } \sum_{i,k} \alpha_i \alpha_k \vec{P}_i \vec{P}_k \text{ ikiqat hasilə gəldikdə isə qeyd edək ki, } \vec{P}_i \text{ və } \vec{P}_k \text{ opera-}$$

torları kommutasiya etmədiyindən, onu

$$\sum_{i,k} \alpha_i \alpha_k \check{P}_i \check{P}_k \Psi = \left\{ \sum_i \alpha_i^2 \check{P}_i^2 + \sum_{i \neq k} (\alpha_i \alpha_k \check{P}_i \check{P}_k + \alpha_k \alpha_i \check{P}_k \check{P}_i) \right\} \Psi$$

kimi yazmaq lazımdır. (64.6)-dan $\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = 1$, $\alpha_i \alpha_k = -\alpha_k \alpha_i (i \neq k)$ olduğundan

$$\begin{aligned} \sum_{i,k} \alpha_i \alpha_k \check{P}_i \check{P}_k \Psi &= \left\{ \sum_i \check{P}_i^2 + \sum_{i \neq k} \alpha_i \alpha_k (\check{P}_i \check{P}_k - \check{P}_k \check{P}_i) \right\} \Psi = \\ &= \left\{ \sum_i \check{P}_i^2 + \frac{ie\hbar}{c} \sum_{i \neq k} \alpha_i \alpha_k F_{ik} \right\} \Psi \end{aligned}$$

alınar. Burada

$$F_{ik} = \frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k}$$

elektromağnit sahəsinin antisimmetrik tenzorudur. $\alpha_i, \rho_i, \sigma_i$ matrisaların xassələrindən

$$\alpha_i \alpha_k = \rho_i \sigma_i \rho_i \sigma_k = \sigma_i \sigma_k = i \sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl} \sigma_l$$

və

$$F_{12} = \mathcal{H}_z, F_{23} = \mathcal{H}_x, F_{31} = \mathcal{H}_y$$

olduğunu nəzərə alsaq ($\vec{\mathcal{H}}$ – maqnit sahəsinin intensivlik vektoru)

$$c^2 \sum_{i,k} \alpha_i \alpha_k \check{P}_i \check{P}_k \Psi = \sum_i c^2 \check{P}_i^2 \Psi - ech \vec{\sigma} \vec{\mathcal{H}} \Psi$$

olar.

a), b), v)- də alınan ifadələri (68.6)-da yazsaq, tənlik

$$\{(E - e\varphi)^2 - c^2 \vec{P}^2 - m_0^2 c^4 - iehc \vec{\alpha} \vec{\mathcal{E}} + ech \vec{\sigma} \vec{\mathcal{H}}\} \Psi = 0 \quad (68.7)$$

şəklə düşər. Sonuncu iki həddin fiziki mahiyyətini aydınlaşdırmaq üçün alçaq enerji oblastına keçək. Elektrik ($\vec{\mathcal{E}}$) və maqnit ($\vec{\mathcal{H}}$) sahələrini bircins sahə fərz etsək, sistemin tam enerjisi

$$\tilde{E} \rightarrow E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} = m_0 c^2 (1 - \beta^2)^{-1/2} = m_0 c^2 + E(p)$$

kimi yazıla bilər. $E(p)$ tam enerjinin yalnız impulsu (sürətlə) mütənəşib olan hissəsidir. Bu yaxınlaşmada

$$(E - e\varphi)^2 - m_0^2 c^4 = (E(\tilde{p}) - e\varphi + m_0 c^2)(E(\tilde{p}) - e\varphi - m_0 c^2) \approx \\ \approx 2m_0 c^2 (E(p) - e\varphi)$$

olar. Bunu (68.7) -də yerinə yazıb, bütün hədləri $2m_0 c^2$ -na bölək:

$$\left\{ E(p) - e\varphi - \frac{1}{2m_0} \tilde{p}^2 - i \frac{e\hbar}{2m_0 c} \tilde{\alpha} \tilde{\mathcal{E}} + \frac{e\hbar}{2m_0 c} \tilde{\sigma} \tilde{\mathcal{H}} \right\} \Psi = 0 \quad (68.8)$$

(68.4) ifadəsini və $\rho_3 \tilde{\alpha} = \rho_3 \rho_1 \tilde{\sigma} = i \rho_2 \tilde{\sigma}$ bərabərliyini nəzərə alsaq, (68.8) tənliyi

$$\left\{ E(p) - e\varphi - \frac{1}{2m} \tilde{p}^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \rho_2 \tilde{\sigma} \tilde{\mathcal{E}} + \frac{e\hbar}{2mc} \rho_3 \tilde{\sigma} \tilde{\mathcal{H}} \right\} \Psi = 0. \quad (68.9)$$

Alınan tənliyi uyğun Şredinger tənliyi ilə müqayisə etdikdə görürük ki, burada axırıncı iki hədd əlavə alınmış olur. Onlar, yəqin ki, kvant mexaniki sistemin xarici elektrik və maqnit sahələri ilə qarşılıqlı təsirin nəticəsi olaraq ortaya çıxır. Elektrodinamika kursundan məlumdur ki, \vec{d} elektrik və $\vec{\mu}$ maqnit momentlərinə malik olan sistemlər elektromaqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsirdə olur və bu təsirin enerjisi uyğun olaraq $-\vec{d} \cdot \vec{\mathcal{E}}$ və $-\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{H}}$ bərabərdir. Beləliklə, (68.9) tənliyindən bir nəticə olaraq çıxır ki, hər bir elektrik yükünə malik olan kvant mexaniki sistem

$$\vec{d} = \frac{e\hbar}{2mc} \rho_2 \tilde{\sigma} \quad \text{və} \quad \vec{\mu} = \frac{e\hbar}{2mc} \rho_3 \tilde{\sigma} \quad (68.10)$$

ifadələri ilə təyin olunan elektrik və maqnit momentlərinə malik olmalıdır.

Digər tərəfdən bilirik ki $(\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, \mathcal{E}_z)$ və $(\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z)$ çoxluğu ikinci rəq antisimmetrik tenzor (F_{ik}) təşkil edir. Enerji skalyar kəmiyyət olduğundan

$$\rho_2 \sigma_i \text{ və } \rho_3 \sigma_i \quad (68.11)$$

altı kəmiyyət çoxluğu da (68.3) mənada ikinci rəqə antisimmetrik tenzor təşkil etməlidir. Bu antisimmetrik tenzor

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{2i} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu) \quad (68.12)$$

ifadəsi ilə təyin olunur. γ_μ -matrisasının digər matrisalarla əlaqəsindən və axırıncıların xassələrindən istifadə edərək göstərmək olar ki, $\sigma_{\mu\nu}$ -nin altı asılı olmayan komponentləri (68.11)-dəki kəmiyyətlərin üzərinə düşür.

Bildiyimiz kimi $\vec{\mathcal{E}}$ polyar, $\vec{\mathcal{H}} = [\vec{\nabla} \vec{A}]$ isə aksial (psevdo) vektordur.

Güzgü əksi çevrilmələrdə $\vec{\mathcal{E}}$ -nin komponentləri işarəsini dəyişir, $\vec{\mathcal{H}}$ -in komponentləri isə işarəsini dəyişmir. Digər tərəfdən $\vec{\sigma}$ -vektoru koordinatlardan asılı olmadığına görə güzgü əksi çevrilmələrində onun komponentləri işarəsini dəyişmir, yəni o, psevdovektordur. Deməli, (68.9) tənliyində $\rho_2 \vec{\sigma} \vec{\mathcal{E}}$ və $\rho_3 \vec{\sigma} \vec{\mathcal{H}}$ hasilərinin skalyar olması üçün ρ_2 psevdoskalyar, ρ_3 isə skalyar (yuxarıda göstəriləyi kimi) kəmiyyət olmalıdır.

$\vec{\sigma}$ psevdovektor olduğundan dördölçülü $S_\mu(i\rho_1, \sigma_i)$, dördölçülü spin operatoru da psevdovektordur. Deməli, Dirak nəzəriyyəsində (68.3) -də göstərilən mənada on altı müxtəlif kəmiyyət var:

		Komponentlərin sayı
$\bar{\Psi} \Psi = \Psi^+ \rho_3 \Psi$	- skalyar	1
$\bar{\Psi} \gamma_5 \Psi = i \Psi^+ \rho_2 \Psi$	- psevdoskalyar	1
$\bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi' = \Psi^+ (-i\alpha_i, I) \Psi$	- vektor	4
$\bar{\Psi} \gamma_5 \gamma_\mu \Psi = \Psi^+ (\sigma_i, i\rho_1) \Psi$	- psevdovektor	4
$\bar{\Psi} \sigma_{\mu\nu} \Psi = \Psi^+ (\rho_2 \sigma_i, \rho_3 \sigma_i) \Psi$	- ikinci rəqə antisimmetrik tenzor	6
Cəmi		<hr/> 16

Burada $\gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4$ kimi təyin olunur.

Beləliklə, Dirak nəzəriyyəsinə müxtəlif tenzor ölçülü yalnız on altı kəmiyyət daxildir. σ_i və ρ_i matrisaların istənilən sayda bir-birinə hasili bu on altı kəmiyyətdən birinə gətirir. Deməli, bu kəmiyyətlər çoxluğu qrup təşkil edir.

§ 69. Zərrəciyin sərbəst hərəkəti üçün Dirak tənliyinin həlli

$$U = c\alpha_1 \vec{p}_1 + \beta_3 m_0 c^2 = c\alpha \vec{p} + \beta_3 m_0 c^2$$

Dirak Hamilton operatoru (64.16) ilə $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ impuls operatoru kommutasiya etdiyindən (64.3) tənliyinin ümumi həllini L^3 həcmli fəzada yayılan və hər fəza koordinatına görə periodu L olan müstəvi dalğaların, yaxud impuls operatorunun məxsusi funksiyalarının superpozisiyası şəklində ax-tarmaq olar:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{p}} u(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t + \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}} = \sum_{\vec{p}} \Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t), \quad (69.1)$$

burada $\vec{p}\vec{r} = p_i r_i$, $p_i = \frac{2\pi}{L} n_i$ -impulsun komponentləri, $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ impuls operatorunun məxsusi funksiyasıdır, $n_i (n_1, n_2, n_3)$ -tam müsbət ədədlərdir.

(69.1)-i (64.3)-də yerinə yazanda $u(\vec{p})$ amplitudu üçün

$$(E - c\alpha \vec{p} - \rho_3 m_0 c^2) u(\vec{p}) \quad (69.2)$$

tənliyi alınır. (69.2)-nin həllini Ψ -nin (64.17) ifadəsinə uyğun olaraq

$$u(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\vec{p}) \\ \varphi_2(\vec{p}) \\ \chi_1(\vec{p}) \\ \chi_2(\vec{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{p}) \\ \chi(\vec{p}) \end{pmatrix} \quad (69.3)$$

kimi axtarmaq olar, burada $\varphi(\vec{p})$ və $\chi(\vec{p})$

$$\varphi(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\vec{p}) \\ \varphi_2(\vec{p}) \end{pmatrix}, \quad \chi(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \chi_1(\vec{p}) \\ \chi_2(\vec{p}) \end{pmatrix} \quad (69.4)$$

spinor funksiyalardır.

$u(\vec{p})$ -nin (69.3) şəklinə uyğun olaraq, α_i və ρ_3 -ün Pauli matrisaları ilə verilmiş (64.10) ifadələrindən istifadə edildikdə, (69.2) tənliyi iki xətti tənliyə parçalanır:

$$\begin{aligned} (E - m_0 c^2)\varphi(\vec{p}) - c(\vec{\sigma}\vec{p})\chi(\vec{p}) &= 0, \\ -c(\vec{\sigma}\vec{p})\varphi(\vec{p}) + (E + m_0 c^2)\chi(\vec{p}) &= 0 \end{aligned} \quad (69.5)$$

Bu sistemin qeyri-trivial həllə malik olması üçün $\varphi(\vec{p})$ və $\chi(\vec{p})$ əmsallarından düzəlmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır:

$$\begin{vmatrix} E - m_0 c^2 & -c(\vec{\sigma}\vec{p}) \\ -c(\vec{\sigma}\vec{p}) & E + m_0 c^2 \end{vmatrix} = 0$$

yaxud

$$E^2 - m_0^2 c^4 - c^2(\vec{\sigma}\vec{p})(\vec{\sigma}\vec{p}) = 0 \quad (69.6)$$

σ_i -Pauli matrisalarının (64.13) xassələrindən istifadə edərək, göstərmək olar ki, ixtiyarı \vec{a} və \vec{b} vektorları üçün

$$(\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b}) = (\vec{a}\vec{b}) + i\vec{\sigma}[\vec{a}\vec{b}] \quad (69.7)$$

bərabərliyi ödənilir*. Burada $\vec{a} = \vec{b} = \vec{p}$ götürsək,

$$(\vec{\sigma}\vec{p})(\vec{\sigma}\vec{p}) = p^2$$

olar. Beləliklə, (69.6) bərabərliyi

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0 \text{ və ya } E = \pm\sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} = \pm\varepsilon = \lambda\varepsilon \quad (69.8)$$

olur, burada $\varepsilon = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}$, $\lambda = \pm 1$ -tam enerjinin işarəsini göstərən vuruqdur.

Beləliklə, (64.3) Dirak tənliyi tam enerjinin həm müsbət ($E > 0$), həm də mənfi ($E < 0$) işarəsinə uyğun həllərə malikdir. Başqa sözlə, (64.3)-ün (69.1) ümumi həlli iki müxtəlif qrup həllərin superpozisiyası olmalıdır:

*Bu bərabərlik Dirakın σ_i və α_i matrisaları üçün də ödənilir:

$$(\vec{\alpha}\vec{a})(\vec{\alpha}\vec{b}) = (\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b}) = (\vec{a}\vec{b}) + i\vec{\sigma}[\vec{a}\vec{b}]$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{p}, \lambda} u(\lambda, \vec{p}) e^{-\frac{i}{h} \lambda \varepsilon t + \frac{i}{h} \vec{p} \vec{r}} = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{p}, \lambda=1} u(\vec{p}) e^{-\frac{i}{h} \varepsilon t + \frac{i}{h} \vec{p} \vec{r}} +$$

$$+ \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{p}, \lambda=-1} u(-\vec{p}) e^{\frac{i}{h} \varepsilon t + \frac{i}{h} \vec{p} \vec{r}}.$$

Burada cəm p_x, p_y, p_z yaxud $(-\infty, \infty)$ intervalında p_x, p_y, p_z üzrə getdiyindən, ikinci cəmdə \vec{p} -ni $-\vec{p}$ ilə əvəz etsək, cəm dəyişməz:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{p}} u(\vec{p}) e^{-\frac{i}{h} (\varepsilon t - \vec{p} \vec{r})} + \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{p}} u(-\vec{p}) e^{\frac{i}{h} (\varepsilon t - \vec{p} \vec{r})}$$

Bütün bu dediklərimizdən çıxır ki, (64.3)-ün $\lambda = \pm 1$ qiymətlərinə uyğun ümumi həlli

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{p}, \lambda} u(\lambda, \vec{p}) e^{-\frac{i}{h} (\lambda \varepsilon t - \vec{p} \vec{r})}, \quad (69.9)$$

xüsusi həlli isə

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} u(\lambda, \vec{p}) e^{-\frac{i}{h} (\lambda \varepsilon t - \vec{p} \vec{r})} \quad (69.10)$$

olar. Buna oxşar olaraq, Ψ^* üçün yazılmış (68.1) tənliyinin xüsusi həlli isə

$$\Psi_{\vec{p}}^+(\vec{r}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} u^+(\lambda, \vec{p}) e^{\frac{i}{h} (\lambda \varepsilon t - \vec{p} \vec{r})}. \quad (69.11)$$

Burada $u(\lambda, \vec{p})$ və $u^+(\lambda, \vec{p})$ amplitudları, (64.17)-yə uyğun olaraq,

$$u(\lambda, \vec{p}) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad \text{və} \quad u^+(\lambda, \vec{p}) = (u_1^* u_2^* u_3^* u_4^*) \quad (69.12)$$

kimi dördölçülü matrisalardır.

(69.9) həlli (64.3) tənliyində yazıb E -ni onun (69.8) ilə verilmiş ifadəsi ilə (69.2)-də əvəz etsək, impuls təsvirində yazılmış və enerjinin işarəsini fiksə etməyə imkan verən Dirak tənliyi

$$(\lambda \varepsilon - c \vec{\alpha} \vec{p} - \rho_3 m_0 c^2) u(\lambda, \vec{p}) = 0 \quad (69.13)$$

olar.

Bildiyimiz kimi (bax §61) elektronun (Fermi zərrəciyin) spinə malik olması faktı Pauli tənliyinə xaricdən daxil edilmişdi. Dirak nəzəriyyəsində isə o, tənliyin özündə öz əksini tapır. Ona görə də (69.13) tənliyinin spinin proyeksiyasından asılı həllərini tapmaq maraqlı olardı.

Bundan əvvəlki paraqrafda göstərdik ki, (64.16) ifadəsi ilə verilmiş \check{H}^D Hamilton operatoru hərəkət miqdarı momenti operatoru $\check{L} = [r\vec{p}]$ və spin operatoru $\check{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ ilə ayrılıqda kommutasiya etmir. Spinin S_z proyeksiyası sistemin tam enerjisi ilə eyni zamanda müəyyən qiymət ala bilmir. Lakin, başqa elə bir istiqamət seçmək olar ki, spinin həmin istiqamətdəki proyeksiya \check{H}^D operatoru ilə kommutasiya etsin. Göstərmək olar ki, belə istiqamət zərrəciyin hərəkət istiqaməti, yəni \vec{p} impuls istiqamətidir.

Doğrudan da, $\check{J} = \check{L} + \check{S}$ – tam momentin \vec{p} üzrə proyeksiyasını götürək:

$$(\vec{J}\vec{p}) = (\vec{L}\vec{p}) + (\vec{S}\vec{p})$$

Bu cəmdə orbital hərəkət miqdarı momentinin \vec{p} üzrə proyeksiyası həmişə sıfıra bərabər olduğundan

$$(\vec{J}\vec{p}^o) = (\vec{S}\vec{p}^o) = S_p = \frac{\check{S}\vec{p}}{|\vec{p}|} \quad (69.14)$$

alınar, burada $\vec{p}^o = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$ – ort vektordur. \check{S}_p operatorunun \check{H}^D ilə kommutasiya etdiyini yoxlamaq asandır. Buradan, \check{H}^D -nin (69.11) məxsusi funksiyası $\frac{\check{S}\vec{p}}{|\vec{p}|}$ – operatorunun da məxsusi funksiyası olur.

$$\left(\frac{(\vec{S}\vec{p})}{|\vec{p}|} - s \right) \Psi_p(\vec{r}, t) = 0$$

və ya

$$((\vec{\sigma}\vec{p}) - sp)u(s, \lambda, \vec{p}) = 0 \quad (69.15)$$

$\vec{\alpha} = \rho_1 \vec{\sigma}$ olduğundan (69.13) tənliyində (69.15)-i nəzərə alsaq, $u(s, \lambda, \vec{p})$ amplitudu aşağıdakı xətti tənliklər sistemini ödəyər.

$$(ks - \vec{\sigma}\vec{k})u(\lambda, s, \vec{k}) = 0, \quad (69.16)$$

$$(\lambda K - s\rho_1 k - \rho_3 k_o)u(\lambda, s, \vec{k}) = 0, \quad (69.17)$$

burada $\varepsilon = \hbar cK$, $K = \sqrt{k^2 + k_o^2}$, $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$, $k_o = \frac{m_o c}{\hbar}$ əvəzləri qəbul edilmişdir. Eyni qayda ilə ermit qoşma $u^+(s, \lambda, \vec{k})$ amplitudunun ödədiyi tənliklər sistemi

$$u^+(ks - \vec{\sigma}\vec{k}) = 0, \quad (69.18)$$

$$u^+(\lambda K - s\rho_1 k - \rho_3 k_o) = 0, \quad (69.19)$$

olar.

σ_i və ρ_i matrisalarının (64.11) ilə verilmiş ifadələri və (69.12)-i nəzərə alsaq, (69.16) və (69.17) tənliklərini aşağıdakı iki sistem şəklində yazmaq olar:

$$\begin{aligned} (\lambda K - k_o)u_1 - sku_3 &= 0 \\ (\lambda K - k_o)u_2 - sku_4 &= 0 \\ (\lambda K - k_o)u_3 - sku_1 &= 0 \\ (\lambda K - k_o)u_4 - sku_2 &= 0 \end{aligned} \quad (69.20)$$

və

$$\begin{aligned} (sk - k_3)u_1 - (k_1 - ik_2)u_2 &= 0 \\ (sk + k_3)u_2 - (k_1 + ik_2)u_1 &= 0 \\ (sk - k_3)u_3 - (k_1 - ik_2)u_4 &= 0 \\ (sk + k_3)u_4 - (k_1 + ik_2)u_3 &= 0 \end{aligned} \quad (69.21)$$

(69.21) tənliklər sistemindən asanlıqla s məxsusi qiymətlər spektrini tapmaq olar. Doğrudan da, (69.21)-də birinci və ikinci (və ya üçüncü və dördüncü) tənliklərin nisbətindən

$$\frac{sk - k_3}{k_1 + ik_2} = \frac{k_1 - ik_2}{sk + k_3} \text{ yaxud } s^2 k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2$$

alınır, buradan da $s^2 = 1$, $s = \pm 1$ olur, yəni spin momentinin impuls boyunca proyeksiyası yalnız iki qiymət ala bilər: ya $+\frac{\hbar}{2}$ və ya $-\frac{\hbar}{2}$.

Hesablama sisteminin z oxu zərrəciyin hərəkəti istiqamətinə yönəldilsə, spinin $s_p = \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{|\vec{p}|} = \vec{\sigma} \vec{p}^o$ proyeksiyası spinin uzununa proyeksiyası və ya zərrəciyin *spirallığı* adlanır. Spirallıq dedikdə spinin, yəni polyarlaşma vektoru \vec{S} -in zərrəciyin \vec{p} impulsuna nəzərən fırlanması başa düşülür. Sağ hesablama sistemində s_p sağ vint spirallığını ($s_p = 1$), sol hesablama sistemində isə sol vint spirallığını ($s_p = -1$) xarakterizə edir. Bu nəticəni başa düşmək o qədər də çətin deyildir. Doğrudan da, $(\vec{\sigma} \vec{p}^o)$ skalyar hasilə \vec{p}^o polyar vektor, $\vec{\sigma}$ isə aksial vektordur (yuxarı bax). Sağ hesablama sistemindən fəza inversiya çevrilmələri ($x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$) vasitəsilə sol hesablama sisteminə keçsək, \vec{p}^o vektorunun koordinat oxları üzrə proyeksiyaları işarəsini dəyişir, $\vec{\sigma}$ vektorunun komponentləri isə dəyişmədən qalır, beləliklə bu keçiddə $\vec{S} \vec{p}^o$ hasilə işarəsini dəyişir.

Qeyd edək ki, zərrəciyin sürəti işıq sürətinə yaxınlaşdıqda ($v \sim c$) onun spin momenti impuls istiqamətinə paralel yönəlməyə cəhd edir və o, yalnız uzununa proyeksiyaya malik olur. Spinin bu xassəsi həm fermionlara və həm də bozonlara xasdır. Məsələn, işıq sürəti ilə hərəkət edən fotonun spini \hbar vahidlərində vahidə bərabərdir. Lakin foton, spininin impulsu boyunca $+1\hbar, 0\hbar, -1\hbar$ üç proyeksiyaya uyğun üç hal əvəzində $+\hbar$ və $-\hbar$ proyeksiyalarına uyğun iki halda ola bilər, yəni o, hərəkəti istiqamətinə perpendikulyar proyeksiyasına uyğun hala malik deyildir. Fotonun spin momenti həmişə onun impulsuna paraleldir. Zərrəciyin v sürətinin c -dən xeyli kiçik qiymətlərində isə spin momenti eninə (impulsa perpendikulyar) proyeksiyaya da malik ola bilər. $\frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{|\vec{p}|} = (\vec{\sigma} \vec{p}^o)$ operatoru belə halları nəzərə

almağa imkan vermir. Buradan spinin istənilən proyeksiyasının saxlanmasını təmin edən operatorun daxil edilməsi zəruriyyəti ortaya çıxır. Bu haqda «Kvant elektrodinamikası» və ya sahənin kvant nəzəriyyəsinə həsr olunan kurslardan ətraflı məlumat almaq olar.

(69.20) və (69.21) sistemləri u_i funksiyalarına görə biricins tənliklər sistemi olduğundan, onlar vasitəsilə bu funksiyaların üçünün hər hansı birinə nisbətləri tapıla bilər. Dalğa funksiyasının $\int \Psi^* \Psi (d\vec{r}) = u^+ u = u_1^* u_1 + u_2^* u_2 + u_3^* u_3 + u_4^* u_4 = 1$ normalanma şərtini də nəzərə alanda $u(\lambda, s, k)$ üçün

$$u(\lambda, s, k) = N \begin{vmatrix} -k(k + sk_3) \\ -sk(k_1 + ik_2) \\ \lambda(K + \lambda k_0)(k + sk_3) \\ \lambda s(K + \lambda k_0)(k_1 + ik_2) \end{vmatrix} \quad (69.22)$$

alınar. Buna oxşar olaraq

$$u^+(\lambda, s, k) = N \begin{vmatrix} -k(k + sk_3) \\ -sk(k_1 - ik_2) \\ \lambda(K + \lambda k_0)(k + sk_3) \\ \lambda s(K + \lambda k_0)(k_1 - ik_2) \end{vmatrix}$$

olar, burada

$$N = \frac{1}{2\sqrt{Kk(K + \lambda k_0)(k + sk_3)}} \quad (69.23)$$

normalayıcı vuruqdur.

Zərrəcik z oxu istiqamətində hərəkət edirsə, enerjinin ixtiyari işarəsində ($\lambda = \pm 1$) a spinin impuls boyuncakı proyeksiyası $s=1$ ilə səciyyə olunan halı təsvir edən dalğa funksiyası

$$u(\lambda, s=1, \vec{k}) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \sqrt{1 + \lambda \frac{k_0}{K}} \\ 0 \\ \lambda \sqrt{1 - \lambda \frac{k_0}{K}} \\ 0 \end{vmatrix}, \quad (69.24)$$

b) əks istiqamətdəki proyeksiyaya ($s = -1$) uyğun halın funksiyası isə

$$u(\lambda, s = -1, \vec{k}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \lambda \frac{k_o}{K}} \\ 0 \\ -\lambda \sqrt{1 - \lambda \frac{k_o}{K}} \end{pmatrix} \quad (69.25)$$

olar.

Beləliklə, enerjinin müəyyən λ işarəsində Dirak tənliyi spinin proyeksiyası ilə fərqlənən iki həllə malik olur. Onda impulsun və enerjinin müəyyən qiyməti və enerjinin verilmiş işarəsi ilə təyin olunan ($K, \lambda = 1$) halının dalğa funksiyası (69.11)-dən

$$\Psi(\vec{r}, t, \lambda = 1) = \frac{1}{\sqrt{2L^3}} \left\{ C(s=1) \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{k_o}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{k_o}{K}} \\ 0 \end{pmatrix} + C(s=-1) \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \frac{k_o}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 - \frac{k_o}{K}} \end{pmatrix} \right\} e^{-icK\mathbf{n}\vec{r}} \quad (69.26)$$

şəklində olar. ($K, \lambda = -1$) halının funksiyasını da eyni şəkildə yazmaq olar.

§70. Dirak nəzəriyyəsində mənfi tam enerjili hallar. Pozitron (antizərrəcik)

Yuxarıda gördük ki, Dirak tənliyinin müsbət enerjili ($\lambda = 1$) həllərlə yanaşı mənfi enerjili ($\lambda = -1$) həlləri də mövcuddur. Otuzuncu illərin əvvəllərində mənfi enerjili həllərin varlığı nəzəriyyənin çətinliklərindən ən əsas hesab olunurdu. Bir sıra alimlər Dirak tənliyi üzərində müxtəlif çevrilmələr aparmaqla bu həlləri nəzəriyyədən kənar etməyə çalışmışlarsa da, buna müvəffəq ola bilməmişlər. Sonra məlum oldu ki, mənfi enerjili hallar yalnız Dirak nəzəriyyəsində yox, istənilən relyativistik klassik nəzəriyyədə də ortaya çıxmalıdır.

Doğrudan da, relyativistik mexanikada sərbəst hərəkət edən zərrəciyin

enerjisi, Eynşteynə görə $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ kimi təyin olunur. Buradan enerji üçün $E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}$ kimi eynihüquqlu iki qiymət alınır. Buradan görünür ki, müsbət və mənfi enerji oblastları arasında $E_+(\vec{p}=0) - E_-(p=0) = 2m_0 c^2$ -a bərabər aralıq vardır. Mənfi enerji oblastı sonsuzluğa ($E_- \rightarrow \infty$) qədər yayıldığından, verilmiş şəraitdə, sistem ən kiçik müəyyən enerjili hala malik ola bilməz. Sistemin hər hansı adi halı dayanıqlı qala bilmir və o, spontan olaraq hər an enerjisi daha kiçik olan hala keçməkdə davam edər.

Klassik fizikada mənfi enerjili halların saxlanması heç bir əhəmiyyəti yoxdur, çünki zərrəciyin sərbəst hərəkəti zamanı onun enerjisi yalnız kəsilmədən dəyişir. Müsbət enerjili oblastdan mənfi enerjili oblasta keçmək üçün isə zərrəciyin enerjisi $2m_0 c^2$ qədər sıçrayışla dəyişməlidir. Lakin klassik fizikada enerjisi sıçrayışla dəyişən hərəkət mümkün deyildir. Buna görə də klassik fizikada qabaqcadan belə halları nəzərə almamaq olar.

Kvant mexanikasında isə vəziyyət tam başqadır. Kvant mexanikasında zərrəciyin hərəkəti zamanı onun enerjisi həm kəsilmədən, həm də sıçrayışla dəyişə bilər. Digər tərəfdən, Dirak göstərdi ki, müsbət və mənfi enerjili səviyyələr arasında keçid ehtimalı sıfırdan fərqlidir və belə keçid baş verə bilər. Ona görə də mənfi enerjili səviyyələrin nəzəriyyədən kənar edilməsi doğru olmaz.

Onda ortaya belə bir sual çıxır: niyə adi şəraitdə mənfi enerjili səviyyələr, yəni tam enerjisi mənfi olan sərbəst zərrəcik müşahidə olunmur? Bu sualın cavabını relyativistik kvant nəzəriyyəsinin müəllifi Dirakın özü tapmışdı.

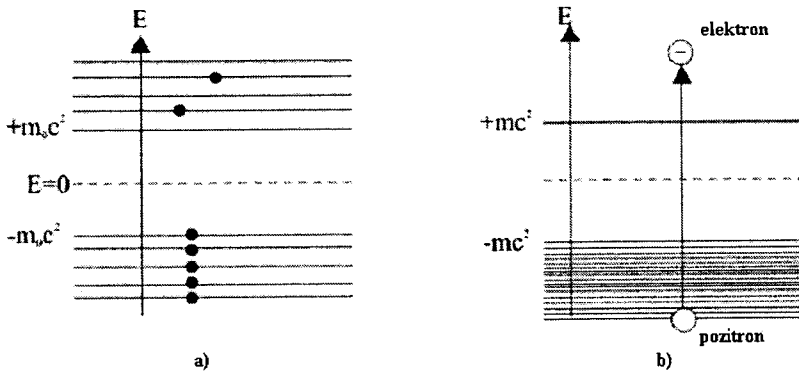
Dirakın fikrincə mənfi enerjili hallar adi şəraitdə ona görə müşahidə olunmur ki, mənfi enerjili hallar Pauli prinsipinə əsasən tam, müsbət enerjili hallar isə qismən tutulmuşdur (şəkil 32,a). Bu səbəbdən müsbət enerji oblastında zərrəciklərin hərəkəti müşahidə olunur, mənfi enerji oblastında isə müşahidə olunmur.

Sistemə hər hansı bir vasitə ilə (məs., γ -kvantlarla) $2m_0 c^2$ bərabər və ya ondan böyük enerji verilmiş olarsa, mənfi enerji halında olan elektronlardan hər hansı biri müsbət enerji oblastına keçər. Bu zaman müsbət enerji oblastında artıq elektron, mənfi enerji oblastında isə onunla eyni zamanda «boş yer» (səviyyə) yaranar (şəkil 32,b).

Dirak mənfi enerjilər fonundakı bu boş yerə kütləsi və yükü elektronun kütləsinə və yükünə bərabər, lakin müsbət kütləli və müsbət yüklü zərrəcik kimi baxmış və onu *pozitron*, yaxud *elektronun antizərrəciyi* adlandırmışdı.

Doğrudan da, belə bir sistemi elektronları sürətləndirən xarici elektrik sahəsinə daxil etsək, hər iki oblastda elektronların enerjisi artdığına görə onlar şəklın yuxarı həssəsinə, «boş yer» isə həmin sürətlə şəklın aşağı

tərəfinə doğru hərəkət edər. Başqa sözlə, «boş yerin» hərəkəti kütləsi və elektrik yükü müsbət olan zərrəciyin hərəkətini xatırladar. Otuzuncu illərin axırlarına yaxın söylənmiş bu fikir 1932-ci ildə Anderson tərəfindən təcrübədə təsdiq olundu. O, həmin ildə kosmik şüaların tərkibində pozitronu müşahidə etməyə müvəffəq oldu. Beləliklə, 1932-ci ildə ilk antizərrəcik kəşf olundu və elementar zərrəciklər fizikasında yeni eranın başlanğıcı qoyuldu.



Şəkil 32. Dirak nəzəriyyəsində zərrəciyin sərbəst hərəkətinə uyğun enerji səviyyələrinin sxemi: a)- həyəcanlanmamış; b)- elektron-pozitron cütü əmələ gələn hallar.

Sonrakı illərdə aparılan təcrübə tədqiqatları nəticəsində aşkar edildi ki, təbiətdə müşahidə olunan zərrəciklərin hamısının –fermion və ya bozon olmasından asılı olmayaraq – uyğun antizərrəciyi vardır.

Elektronun mənfəi enerji oblastundan müsbət enerji oblastına keçməsi prosesi *elektron-pozitron cütünün yaranması*, müsbət enerji oblastında olan hər hansı elektronun mənfəi enerji fonunda olan «boş yerə» keçməsi prosesi isə *elektron-pozitron cütünün annihilyasiyası* adlanır. Elektron-pozitron cütünün malik olduğu enerjinin qiymətindən asılı olaraq elektron-pozitron cütünün annihilyasiyası zamanı yalnız qamma-kvantlar yox, istənilən zərrəcik cütü və ya zərrəciklər şırnağı yarana bilər. Müasir fizikada bu prosedən təbiətdə sərbəst halda çox qısa müddət (10^{-10} – 10^{-20} san) yaşaya bilən qeyri-stabil zərrəciklərin xassələrini öyrənmək üçün istifadə olunur.

Qeyd edək ki, elektron-pozitron, proton-antiproton, neytron-antineytron cütələrinin annihilyasiyası və bu zərrəciklərin nüvələrdən səpilməsi proseslərinin təcrübə öyrənilməsi zəif və güclü (nüvə) qarşılıqlı təsirlərin təbiətinin müəyyən edilməsində və bununla da onların uyğun olaraq W^\pm və Z_0 və qlüon-kvark modellərinin işlənilib dəqiqləşdirilməsində mühüm rol oynamışdır.

§71. Tam moment operatoru və onun xassələri

Şredinger nəzəriyyəsində mərkəzi sahədəki hərəkət üçün (bax: §39-a) kvant mexaniki sistemin fırlanma (orbital) momenti saxlanır, yəni

$$\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}] \quad (71.1)$$

operatorunun kvadratı və \vec{L} -in koordinat oxları üzrə götürülmüş proyeksiyalarından biri sistemin $\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2m} + V(r)$ Hamilton operatoru ilə kommutasiya edir. Sistemin E enerjisi, L^2 hərəkət miqdarı momenti kvadratı və məsələn, L_z proyeksiyası hərəkət inteqralları olur.

Relyativistik effektlər və zərrəciyin spini nəzərə alınan Dirak nəzəriyyəsində \vec{L}_z operatoru sistemin Dirak Hamilton operatoru ilə kommutasiya etmir. }

Doğrudan da, [Dirak nəzəriyyəsində mərkəzi sahədəki hərəkətin Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = c\vec{\alpha}\vec{p} + \rho_3 m_0 c^2 + V(r) \quad (71.2)$$

şəklinə malikdir.

\vec{L}_z və $\vec{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ operatorlarının $\tilde{H} = c\vec{\alpha}\vec{p} + \rho_3 m_0 c^2$ operatoru ilə kommutasiyası uyğun olaraq (67.2) və (67.3) münasibətləri ilə verilmişdir. Buradan çıxır ki, sistemin

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (71.3)$$

tam momentinin \vec{J}_z proyeksiyası (71.2) operatoru ilə kommutasiya edir.

\vec{L} və \vec{S} operatorları ermit olduğundan (71.3) operatoru da ermitdir. \vec{J} -yə uyğun fiziki kəmiyyət sistemin tam momenti adlanır və o saxlanır.

\vec{J} tam moment operatorunun $\vec{J}_x, \vec{J}_y, \vec{J}_z$ komponentləri üçün kommutasiya münasibətlərini tapaq.

(13.14)-dən orbital moment operatorunun komponentləri

$$\vec{L}_i \vec{L}_k - \vec{L}_k \vec{L}_i = i\hbar \tilde{\epsilon}_{ikl} \vec{L}_l \quad (13.14)$$

münasibətlərini ödəyir. $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ spin operatorunun \vec{S}_i komponentləri üçün isə onları təyin edən σ_i Dirak matrisalarının ödədiyi (61.10') münasibətlərindən

$$\vec{S}_i \vec{S}_k - \vec{S}_k \vec{S}_i = i\hbar \tilde{\varepsilon}_{ikl} \vec{S}_l \quad (61.10)$$

alınır. \vec{L}_i və \vec{S}_i operatorları müxtəlif dəyişənlərə təsir etdiyindən, onlar kommutasiya edir.

$$\vec{L}_i \vec{S}_k - \vec{S}_k \vec{L}_i = 0. \quad (71.4)$$

(13.14), (61.10') və (71.4)-dən tam moment operatorunun komponentləri üçün

$$\vec{J}_i \vec{J}_k - \vec{J}_k \vec{J}_i = i\hbar \tilde{\varepsilon}_{ikl} \vec{J}_l \quad (71.5)$$

kommutasiya münasibətləri alınır.

Buradan bir nəticə olaraq çıxır ki, sistemin müəyyən halında tam moment müəyyən qiymətə malik deyildir. Lakin orbital momentdə olduğu kimi, tam moment operatorunun kvadratı ilə onun üç komponentlərindən istənilən birinə uyğun operator kommutasiya edir. Məsələn, \vec{J}^2 ilə \vec{J}_z operatorlarının kommutasiyasını hesablayaq.

(71.3)-dən onların kommutasiyası

$$\vec{J}^2 \vec{J}_z - \vec{J}_z \vec{J}^2 = (\vec{L}^2 + \vec{S}^2) \vec{J}_z - \vec{J}_z (\vec{L}^2 + \vec{S}^2) + 2((\vec{L}\vec{S}) \vec{J}_z - \vec{J}_z (\vec{L}\vec{S}))$$

olar. Burada $\vec{L}^2, \vec{L}_z, \vec{S}^2$ və \vec{S}_z operatorları qarşılıqlı kommutasiya etdiyindən

$$\vec{J}^2 \vec{J}_z - \vec{J}_z \vec{J}^2 = 2[(\vec{L}_x \vec{S}_x + \vec{L}_y \vec{S}_y)(\vec{L}_z + \vec{S}_z) - (\vec{L}_z + \vec{S}_z)(\vec{L}_x \vec{S}_x + \vec{L}_y \vec{S}_y)]$$

və ya

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 \vec{J}_z - \vec{J}_z \vec{J}^2 = 2\{ & (\vec{L}_x \vec{L}_z - \vec{L}_z \vec{L}_x) \vec{S}_x + (\vec{L}_y \vec{L}_z - \vec{L}_z \vec{L}_y) \vec{S}_y + \\ & + \vec{L}_x (\vec{S}_x \vec{S}_z - \vec{S}_z \vec{S}_x) + \vec{L}_y (\vec{S}_y \vec{S}_z - \vec{S}_z \vec{S}_y) \} \end{aligned}$$

alınır. Bu ifadədə (13.14) və (61.10') bərabərliklərini nəzərə alsaq,

$$\check{J}^2 \check{J}_z - \check{J}_z \check{J}^2 = 2i\hbar(-\check{L}_y \check{S}_x + \check{L}_x \check{S}_y - \check{L}_x \check{S}_y + L_y \check{S}_x) = 0. \quad (71.6)$$

Eynilə bunun kimi

$$\check{J}^2 \check{J}_x - \check{J}_x \check{J}^2 = 0, \quad \check{J}^2 \check{J}_y - \check{J}_y \check{J}^2 = 0 \quad (71.7)$$

olur. Asanlıqla göstərmək olar ki \check{J}^2, \check{L}^2 və \check{S}^2 operatorları da qarşılıqlı kommutasiya edir:

$$\check{J}^2 \check{L}^2 - \check{L}^2 \check{J}^2 = 0, \quad \check{J}^2 \check{S}^2 - \check{S}^2 \check{J}^2 = 0, \quad \check{L}^2 \check{S}^2 - \check{S}^2 \check{L}^2 = 0. \quad (71.8)$$

(71.3)-ün kvadratını götürsək,

$$\check{J}^2 = \check{L}^2 + \check{S}^2 + 2(\check{L}\check{S}),$$

buradan

$$\check{L}\check{S} = \frac{1}{2}(\check{J}^2 - \check{L}^2 - \check{S}^2) \quad (71.9)$$

və $\check{L} = \check{J} - \check{S}$ -in kvadratından

$$\check{J}\check{S} = \frac{1}{2}(\check{J}^2 - \check{L}^2 + \check{S}^2) \quad (71.10)$$

alınır. (71.8)–(71.10) ifadələrindən görünür ki, $\check{L}\check{S}$ və $\check{J}\check{S}$ operatorları $\check{J}^2, \check{L}^2, \check{S}^2$ və \check{J}_z operatorları ilə kommutasiya edir və bu altı operator eyni bir ümumi məxsusi funksiyaya malikdir.

§ 72. \check{J}^2 və \check{J}_z operatorlarının məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları

\check{J}^2 və \check{J}_z operatorları kommutasiya etdiyindən onlar ümumi məxsusi funksiyaya malikdir:

$$\begin{aligned} \check{J}^2 \Psi &= J^2 \Psi, \\ \check{J}_z \Psi &= J_z \Psi. \end{aligned} \quad (72.1)$$

\tilde{J}^2 operatoru $\tilde{J}^2 = \tilde{J}_x^2 + \tilde{J}_y^2 + \tilde{J}_z^2$ kimi həmişə müsbət və ermit operatorların kvadratları cəmi olduğundan, özü də həmişə müsbət ermit operatordur.

(72.1) tənliklərinin həllində Pauli yaxınlaşması ilə kifayətlənmək olar. Bu yaxınlaşmada \tilde{S}_i spin operatorları iki sətir-sütunlu σ_i Pauli matrisaları ilə ifadə edildiyindən (72.1) tənliklərin həllini

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (72.2)$$

kimi axtarmaq olar. (72.2)-ni (72.1)-in birinci tənliyində yazıb, (71.3) nəzərə alınsa,

$$(\tilde{L}^2 + \tilde{S}^2 + 2(\tilde{L}\tilde{S})) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = J^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (72.3)$$

olar. $\tilde{J}^2, \tilde{L}^2, \tilde{S}^2$ və $\tilde{L}\tilde{S}$ operatorları ümumi məxsusi funksiyalara malik olduğundan, (72.3)-ün həlli olan Ψ_1 və Ψ_2 funksiyaları \tilde{L}^2 -in (14.28') ilə verilmiş $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ məxsusi funksiyasından yalnız sabitlə fərqlənə bilər. Həmin sabitləri tapmaq üçün (72.3)-də

$$\tilde{L}^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

və

$$\tilde{S}^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l_s(l_s + 1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (72.3')$$

(burada $l_s = \frac{1}{2}$ -dir) olduğunu nəzərə aldıqda (72.3) tənliyi (61.13) əsasən,

$$\left\{ \hbar^2 \left[l(l+1) + \frac{3}{4} \right] \begin{pmatrix} 10 \\ 01 \end{pmatrix} + \hbar \left[\tilde{L}_x \begin{pmatrix} 01 \\ 10 \end{pmatrix} + L_y \begin{pmatrix} 0-i \\ i \ 0 \end{pmatrix} + L_z \begin{pmatrix} 1 \ 0 \\ 0 -1 \end{pmatrix} \right] \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = J^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

və ya bütün hədləri \hbar^2 -na böləndən sonra

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} [\tilde{L}_z \Psi_1 + (\tilde{L}_x - i\tilde{L}_y) \Psi_2] &= \lambda \Psi_1 \\ \frac{1}{\hbar} [(\tilde{L}_x + i\tilde{L}_y) \Psi_1 - \tilde{L}_z \Psi_2] &= \lambda \Psi_2 \end{aligned} \quad (72.4)$$

sistemi şəklində yazmaq olur. Burada

$$\lambda = \eta - l(l+1) - \frac{3}{4}, \quad \eta = \frac{J^2}{\hbar^2} \quad (72.5)$$

əvəzləri qəbul edilmişdir.

$$\tilde{L}_+ = \tilde{L}_x + i\tilde{L}_y, \quad \tilde{L}_- = \tilde{L}_x - i\tilde{L}_y \quad (72.6)$$

kimi bir-birilə qarşılıqlı ermit olan operatorlar daxil edək (bax §13) (13.17)-də göstərilən kimi onlar üçün

$$\tilde{L}_z \tilde{L}_\pm - \tilde{L}_\pm \tilde{L}_z = \pm \hbar \tilde{L}_\pm \quad (72.7)$$

kommutasiya münasibəti ödənilir.

$\tilde{L}_z \tilde{L}_\pm$ operatoru ilə \tilde{L}_z -in $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ məxsusi funksiyasına təsir edək. (72.7) ifadələrinə görə bu təsir

$$\tilde{L}_z \tilde{L}_\pm Y_{lm} = (\tilde{L}_z \tilde{L}_\pm \pm \hbar \tilde{L}_\pm) Y_{lm} = \tilde{L}_\pm (\tilde{L}_z \pm \hbar) Y_{lm} = \hbar(m \pm 1) \tilde{L}_\pm Y_{lm}$$

olur. Buradan çıxır ki, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ funksiyası \tilde{L}_\pm operatorlarının $\hbar(m \pm 1)$ məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyasıdır, yəni

$$\tilde{L}_\pm Y_{lm}(\theta, \varphi) = a Y_{l, m \pm 1}(\theta, \varphi). \quad (72.8)$$

Bu bərabərliyi sol tərəfdən $Y_{lm}^+(\theta, \varphi)$ -ə vurub θ və φ -nin bütün dəyişmə intervalında inteqrallasaq, $Y_{lm}^+(\theta, \varphi)$ -lər üçün ortonormalanma şərtlərindən

$$\int Y_{lm}^+ \tilde{L}_\pm Y_{lm} d\Omega = a \int Y_{lm}^+ Y_{l, m \pm 1} d\Omega = a \delta_{m', m \pm 1}$$

alarıq, yəni \check{L}_{\pm} operatorları üçün yalnız $(\check{L}_{+})_{m\pm 1,m} = \langle m+1 | \check{L}_{+} | m \rangle$ və $(\check{L}_{-})_{m-1,m} = \langle m-1 | \check{L}_{-} | m \rangle$ matrisa elementləri sıfırdan fərqli olur:

$$\langle m+1 | \check{L}_{+} | m \rangle \neq 0; \quad \langle m-1 | \check{L}_{-} | m \rangle \neq 0 \quad (72.9)$$

Bu matrisa elementlərini hesablayaq. Əvvəlcə $\check{L}^2 = \check{L}_x^2 + \check{L}_y^2 + \check{L}_z^2$ operatorunu \check{L}_{\pm} operatorları ilə ifadə edək. Bunun üçün $\check{L}_{\pm} = \check{L}_x \pm i\check{L}_y$ operatorlarını $\check{L}_{\mp} = \check{L}_x \mp i\check{L}_y$ -ə vuraq:

$$\check{L}_{\pm}\check{L}_{\mp} = \check{L}_x^2 + \check{L}_y^2 \mp (\check{L}_x\check{L}_y - \check{L}_y\check{L}_x) = \check{L}_x^2 + \check{L}_y^2 \pm \hbar\check{L}_z$$

Burada $\check{L}_x^2 + \check{L}_y^2$ cəmini \check{L}^2 -in ifadəsindən $\check{L}^2 - \check{L}_z^2$ ilə əvəz etsək,

$$\check{L}_{\pm}\check{L}_{\mp} = \check{L}^2 - \check{L}_z^2 \pm \hbar\check{L}_z \quad (72.10)$$

alarıq. (72.10) ifadəsini soldan və sağdan \check{L}^2 və \check{L}_z operatorlarının məxsusi funksiyaları olan Y_{lm}^+ və Y_{lm} vurub inteqrallasaq,

$$\int Y_{lm}^+ \check{L}_{-} \check{L}_{+} Y_{lm} d\Omega = \langle lm | \check{L}_{-} \check{L}_{+} | lm \rangle = \hbar^2 (l-m)(l+m+1), \quad (72.11)$$

$$\int Y_{lm}^+ \check{L}_{+} \check{L}_{-} Y_{lm} d\Omega = \langle lm | \check{L}_{+} \check{L}_{-} | lm \rangle = \hbar^2 (l+m)(l-m+1),$$

burada $l(l+1) - m^2 \mp m = (l \pm m)(l \mp m + 1)$ olduğu nəzərə alınmışdır. (72.8) tənliyindən görünür ki, \check{L}_{\pm} -un təsiri yalnız m kvant ədədinin dəyişməsinə gətirdiyindən \check{L}_{\pm} operatorların matrisa elementlərinin yazılışında yalnız m indeksini saxlamaqla kifayətlənmək olar:

$$\begin{aligned} \langle m | L_{-} L_{+} | m \rangle &= \hbar^2 (l-m)(l+m+1) \\ \langle m | L_{+} L_{-} | m \rangle &= \hbar^2 (l+m)(l-m+1) \end{aligned} \quad (72.12)$$

Matrisaların vurulma qaydasına görə

$$\langle m / L_{\mp} L_{\pm} / m \rangle = \langle m / L_{\mp} / m' \rangle \langle m' / L_{\pm} / m \rangle \quad (72.13)$$

\tilde{L}_{+} və \tilde{L}_{-} operatorlarının ermit operatorları olduğunu, yəni

$$\langle m / \tilde{L}_{+} / m' \rangle = \langle m' / \tilde{L}_{-} / m \rangle \quad (72.14)$$

nəzərə alsaq, (72.9), (72.12) və (72.13) ifadələrindən

$$\begin{aligned} \langle m+1 / \tilde{L}_{+} / m \rangle &= \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \\ \langle m-1 / \tilde{L}_{-} / m \rangle &= \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)}, \end{aligned} \quad (72.15)$$

yaxud

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{+} Y_l^m(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_{l, m+1}(\theta, \varphi) \\ \tilde{L}_{-} Y_l^m(\theta, \varphi) &= \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l, m-1}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (72.16)$$

alınır. (72.16)-dan çıxır ki, (72.4) sisteminin həllini

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= a Y_l^{m-1}(\theta, \varphi) \\ \Psi_2 &= b Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (72.17)$$

şəklində axtarmaq olar. Onda a və b əmsalları üçün

$$\begin{aligned} (\lambda - m + 1)a - \sqrt{(l+m)(l-m+1)} b &= 0 \\ (\lambda + m)b - \sqrt{(l+m)(l-m+1)} a &= 0 \end{aligned} \quad (72.18)$$

sistemi alınır. (72.18) bircins sistemin sıfırdan fərqli (qeyri-trivial) həllin olması üçün a və b -nin əmsallarından düzəlmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır.

$$\begin{vmatrix} \lambda - m + 1 & -\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \\ -\sqrt{(l+m)(l-m+1)} & \lambda + m \end{vmatrix} = 0$$

Buradan λ

$$\lambda(\lambda+1)=l(l+1) \quad (72.19)$$

bərabərliyi ilə təyin olunur və λ üçün

$$\lambda=l, \lambda=-(l+1) \quad (72.20)$$

kimi iki həll alınır. λ -nın bu qiymətlərini (72.5)-də yazsaq, $\lambda=l$ olanda $\eta = \frac{J^2}{\hbar^2} = l^2 + 2l + \frac{3}{4} = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right)$, $\lambda=-(l+1)$ olanda isə $\eta = l^2 - \frac{1}{4} = \left(l - \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)$ olur. Birinci halda $j = l + \frac{1}{2}$, ikinci halda isə $j = l - \frac{1}{2}$ götürsək, \tilde{J}^2 operatorunun məxsusi qiymətləri üçün hər iki halda

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1) \quad (72.21)$$

ifadəsi alınır. Burada j daxili kvant ədədi adlanır. j -nin $j = l + \frac{1}{2}$ qiyməti orbital və spin momentlərinin toplanmasına, $j = l - \frac{1}{2}$ qiyməti isə onların çıxılmasına uyğundur. j -nin $j = l \pm \frac{1}{2}$ ifadəsində $l=0,1,2,\dots$ müsbət tam qiymətlər aldığından

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \quad (72.22)$$

kimi müsbət yarım tam qiymətlər alır. l -in verilmiş qiymətində isə

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ və } j = l - \frac{1}{2} \quad (72.23)$$

kimi iki müxtəlif qiymət alır. j daxili kvant ədədi tam momentin kvadratını təyin edir. Ona görə o, mənfi qiymətlər ala bilmir. $l=0$ olanda j yalnız

$j = \left| l - \frac{1}{2} \right| = \frac{1}{2}$ qiymətini alır.

\bar{J}^2 operatorunun məxsusi funksiyalarının dəqiq analitik ifadəsini tapmaq üçün λ -nın $\lambda=l$ və $\lambda=-(l+1)$ qiymətlərini (72.18)-də yazıb, (72.2) funksiyasının

$$\int \Psi^* \Psi(d\bar{r}) = \int (\Psi_1^* \Psi_1 + \Psi_2^* \Psi_2)(d\bar{r}) = 1$$

normalanma və $Y_l^m(\theta, \varphi)$ funksiyalarının isə ortonormalanma şərtlərindən tapılan $a^2 + b^2 = 1$ bərabərliyindən istifadə etmək lazımdır. Onda $\lambda = l$, $j = l + \frac{1}{2}$ olanda

$$a = \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}, \quad b = -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}},$$

və məxsusi funksiya

$$\Psi_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^{m-1}(\theta, \varphi) \\ -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} Y_l^m(\theta, \varphi) \end{pmatrix} = Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}}(\theta, \varphi), \quad (72.24)$$

$\lambda = -(l+1)$, $j = l - \frac{1}{2}$ olanda isə

$$a = \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}, \quad b = \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}},$$

uyğun məxsusi funksiya

$$\Psi_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} Y_l^{m-1}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_l^m(\theta, \varphi) \end{pmatrix} = Y_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \quad (72.25)$$

olur. Y_{lm}^j funksiyaları sferik spinorlar adlanır. Onlar üçün ortonormalanma şərti

$$\int Y_{l'm'}^{j'}(\theta, \varphi) Y_{lm}^j(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \delta_{l'l} \quad (72.26)$$

şəklində yazılır. Bu şərtin doğruluğunu yoxlamaq üçün $Y_{lm}^{+(j)}$ funksiyasının

$$Y_{lm}^{+(j)} = (aY_l^{+m-1}, bY_l^{+m}) \quad (72.27)$$

kimi bir sətirli ikinci tərtib matrisa olduğunu və $Y_l^m(\theta, \varphi)$ funksiyalarının ortonormalanma şərtlərini ödədiyini nəzərə almaq lazımdır.

Spini yarım tam olan zərrəciyin mərkəzi sahədəki hərəkətinə aid olan istənilən məsələdə $Y_{lm}^{(j)}(\theta, \varphi)$ sferik spinorlar, yəqin ki, uyğun kvant tənyinin yalnız bucaqlardan asılı hissəsinin həlli olacaqdır.

(72.21), (72.24), (72.25) ifadələrindən görünür ki, tam momentin müəyyən j qiymətinə bir həll yox, maqnit kvant ədədi ilə fərqlənən bir sıra həllər uyğun gəlir, yəni sistemin tam momentin qiyməti ilə təyin olunan halları cırlaşmış olur. Doğrudan da, j kvant ədədi l ilə təyin olunduğundan j -nin və ya l -in verilmiş qiymətinə $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm, \dots, \pm l$ ilə fərqlənən $(2l+1)$ müxtəlif hal funksiyası uyğun gəlir. Bu, tam momentin fəzada müxtəlif istiqamətlərə malik olması ilə izah olunur.

Bunu özümüzdə daha aydın təsəvvür etmək üçün \check{J}_z operatorunun məxsusi qiymətlərini tapaq. $Y_{lm}^j(\theta, \varphi)$ funksiyaları \check{J}_z -in məxsusi funksiyaları olduğundan

$$\check{J}_z Y_{lm}^j = J_z Y_{lm}^j$$

və ya

$$\begin{aligned} (\check{L}_z + \check{S}_z) Y_{lm}^j &= \left[\check{L}_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} aY_l^{m-1} \\ bY_l^m \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \left(\check{L}_z + \frac{\hbar}{2} \right) aY_l^{m-1} \\ \left(L_z - \frac{\hbar}{2} \right) bY_l^m \end{pmatrix} = J_z \begin{pmatrix} aY_l^{m-1} \\ bY_l^m \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (72.28)$$

\tilde{L}_z -in $Y_l^{m'}$ -ə ($m'=m$, yaxud $m'=m-1$) təsirini nəzərə alsaq,

$$\left(\begin{array}{c} \left[(m-1)\hbar + \frac{\hbar}{2} \right] aY_l^{m-1} \\ \left(\hbar m - \frac{1}{2}\hbar \right) bY_l^m \end{array} \right) = \hbar \left(m - \frac{1}{2} \right) \left(\begin{array}{c} aY_l^{m-1} \\ bY_l^m \end{array} \right) = J_z \left(\begin{array}{c} aY_l^{m-1} \\ bY_l^m \end{array} \right)$$

olar. Burada $m_j = m - 1/2$ əvəzini qəbul etsək, \tilde{J}_z -in məxsusi qiymətləri üçün

$$J_z = m_j \cdot \hbar \quad (72.29)$$

ifadəsi alınar.

Bildiyimiz kimi, kvant mexanikasında hal funksiyasının (vektorunun) norması heç vaxt mənfi ola bilməz. Norma həmişə müsbət, xüsusi halda sıfır bərabər olar. Normanın sıfır bərabər olması üçün hal vektorunun özü sıfır bərabər olmalıdır. Hal vektorlarının (72.24) və (72.25) ifadələrindən

görünür ki, (72.1) tənliyinin $j = l + \frac{1}{2}$ -ə uyğun birinci növ həllərinin nor-

ması o vaxt sıfır olar ki, ya $m = -l \left(m_j = (-l - \frac{1}{2}) = -j \right)$ və ya

$m = l + 1 \left(m_j = l - \frac{1}{2} + 1 = l + \frac{1}{2} = j \right)$ olsun (hər iki halda $Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}} = 0$).

$j = l - \frac{1}{2}$ -ə uyğun ikinci növ həllər üçün isə ya $m = l + 1 \left(m_j = l + \frac{1}{2} = j \right)$, ya

da $m = -l \left(m_j = -j \right)$ olsun (hər iki halda $Y_{lm}^{j=l-1/2} = 0$). l orbital kvant ədədinin $l=0, 1, 2, \dots$ müsbət tam qiymətlər aldığından, m_j kvant ədədi hər iki halda $-j$ dan $+j$ -ya qədər

$$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \pm \dots \quad (72.30)$$

kimi $2j + 1$ sayda müxtəlif qiymətlər alır*.

* Spini tam olan zərrəciklər halında həm l və həm də l_s kvant ədədləri müsbət tam qiymət aldığından $j=l+l_s$ kimi təyin olunan daxili kvant ədədi müsbət tam, m -kvant ədədi isə müsbət və mənfi tam qiymətlər alır.

\bar{J}^2, \bar{L}^2 və \bar{S}^2 operatorlarının (72.3') və (72.21) ilə verilmiş qiymətləri əsasında, bundan qabaqkı §-da (71.9) və (71.10) ifadələri ilə verilmiş $\bar{L}\bar{S}$ və $\bar{J}\bar{S}$ skalyar hasillərin məxsusi qiymətləri üçün

$$\bar{L}\bar{S} = \frac{\hbar^2}{2} \{j(j+1) - l(l+1) - l_s(l_s+1)\} \quad (72.31)$$

$$\bar{J}\bar{S} = \frac{\hbar^2}{2} \{j(j+1) - l(l+1) + l_s(l_s+1)\}$$

ifadələri alınır.

§73. Hərəkət miqdarı momentlərinin vektoru toplanması

Kvant mexanikasında elə çoxzərrəcikli sistemlərə təsadüf olunur ki, onların hallarını hərəkət miqdarı momentləri kvadratının və onların proyeksiyasının müəyyən qiymətləri ilə xarakterizə etmək lazımdır. Belə sistemlərə misal olaraq qarşılıqlı təsirdə olmayan və ya kifayət qədər zəif qarşılıqlı təsirdə olan iki zərrəcikli sistemə baxaq.

Sistemdəki zərrəciklərin hərəkət miqdarı momentlərini $\bar{J}(1)$ və $\bar{J}(2)$ ilə işarə edək. Adətən $\bar{J}(1)$ və $\bar{J}(2)$ momentləri iki zərrəciyin orbital, spin, tam momentləri və hətta eyni bir zərrəciyin orbital hərəkət miqdarı və spin momentləri ola bilər. $\bar{J}(1)$ və $\bar{J}(2)$ momentlərinə uyğun operatorları $\bar{J}(1)$ və $\bar{J}(2)$ ilə işarə etsək, onlar üçün ayrılıqda

$$[\bar{J}_i(1), \bar{J}_k(1)] = \bar{J}_i(1)\bar{J}_k(1) - \bar{J}_k(1)\bar{J}_i(1) = i\hbar\varepsilon_{ikl}\bar{J}_l(1) \quad (73.1)$$

$$[\bar{J}_i(2), \bar{J}_k(2)] = i\hbar\varepsilon_{ikl}\bar{J}_l(2); [\bar{J}^2(1), \bar{J}_i(1)] = 0; [\bar{J}^2(2), \bar{J}_i(2)] = 0 \quad (73.2)$$

münasibətləri ödənilər. $i, k=1, 2, 3$. $\bar{J}_i(1)$ və $\bar{J}_k(2)$ operatorları müxtəlif fəzalarda (müxtəlif zərrəciklərin koordinatlarına) təsir etdiyi üçün onlar bir-birilə kommutasiya edir:

$$[\bar{J}_i(1), \bar{J}_k(2)] = 0; [\bar{J}_i(1), \bar{J}^2(2)] = 0; [\bar{J}_i(2), \bar{J}^2(1)] = 0. \quad (73.3)$$

(73.1) və (72.2) münasibətlərindən alınır ki, sistem, hərəkət miqdarı mo-

mentləri kvadratları

$$J^2(1) = \hbar^2 j_1(j_1 + 1); \quad J^2(2) = \hbar^2 j_2(j_2 + 1) \quad (73.4)$$

və onların, deyək ki, z oxu boyunca proyeksiyaları

$$J_z(1) = \hbar m_1; \quad J_z(2) = \hbar m_2 \quad (73.5)$$

eyni zamanda müəyyən qiymət aldığı hallarda ola bilər.

Bildiyimiz kimi j_1 və j_2 -nin verilmiş qiymətində m_1 və m_2 kvant ədədləri

$$\begin{aligned} m_1 &= j_1, j_1 - 1, \dots, -j_1 + 1, -j_1 \\ m_2 &= j_2, j_2 - 1, \dots, -j_2 + 1, -j_2 \end{aligned} \quad (73.6)$$

kimi $(2j_{1,2} + 1)$ sayda müxtəlif qiymət alır.

Belə sistem, yəqin ki, $\check{J}^2(1), \check{J}_z(1)$ operatorlarının $\Psi_{j_1 m_1}$ və $\check{J}^2(2), \check{J}_z(2)$ operatorlarının $\Psi_{j_2 m_2}$ məxsusi funksiyaların hasilı olan

$$\Psi_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \Psi_{j_1 m_1} \Psi_{j_2 m_2} \quad (73.7)$$

dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Hərəkət miqdarı momenti operatorunun məxsusi funksiyaları yalnız bucaq dəyişənlərindən asılı olduğuna görə onları § 14-də qəbul olunmuş işarələrə uyğun olaraq $Y_{jm}(\theta, \varphi)$ kimi işarə edəcəyik. Onda (73.7) bərabərliyi:

$$Y_{j_1 m_1 j_2 m_2} = Y_{j_1 m_1} Y_{j_2 m_2} \quad (73.8)$$

kimi yazılır.

j_1 və j_2 -nin verilmiş qiymətlərində m_1 və m_2 kvant ədədləri (73.6)-ya uyğun olaraq $(2j_1 + 1)$ və $(2j_2 + 1)$ sayda müxtəlif qiymət aldığından, (73.7)-dəki müxtəlif funksiyaların (sistemin kvant hallarının) sayı $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ olar. Beləliklə, sistemin hər bir halı j_1, j_2, m_1, m_2 kvant ədədlərinin verilməsi ilə təyin olunur.

İndi də sistemin tam hərəkət miqdarı momenti operatorunu daxil edək:

$$\check{J} = \check{J}(1) + \check{J}(2). \quad (73.9)$$

(73.9)-un sağ tərəfində dayanan operatorlar üçün (73.1) münasibətləri ödənilməyindən \check{J} tam moment operatorunun proyeksiyaları üçün də həmin

münasibətlər ödənilir:

$$[\check{J}_i, \check{J}_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} \check{J}_l; \quad [J^2, J_i] = 0. \quad (73.10)$$

Tam moment operatorunun z oxu üzrə proyeksiyası $J_z = J_z(1) + J_z(2)$ üçün (73.5) və (73.8)-dən

$$\check{J}_z \Psi_{j_1 m_1 j_2 m_2} = (J_z(1) + J_z(2)) Y_{j_1 m_1} Y_{j_2 m_2} = \hbar(m_1 + m_2) Y_{j_1 m_1} Y_{j_2 m_2} = \hbar m Y_{j_1 m_1 j_2 m_2}$$

bərabərliyi ödənilməsinə görə maqnit kvant ədədləri arasında

$$m = m_1 + m_2 \quad (73.11)$$

kimi sadə münasibət alınır.

(73.9)-a daxil olan operatorların kvadratlarının məxsusi qiymətləri arasında isə belə sadə münasibət yoxdur. Bu onunla əlaqədardır ki,

$$\check{J}^2 = \check{J}^2(1) + \check{J}^2(2) + 2\check{J}(1)\check{J}(2) \quad (73.12)$$

operatoru üçün (73.10) yerdəyişmə münasibətlərindən əlavə

$$\begin{aligned} [J^2, J^2(1)] &= 0; \quad [\check{J}^2, \check{J}^2(2)] = 0, \\ [J_i, J^2(1)] &= 0; \quad [\check{J}_i, \check{J}^2(2)] = 0 \end{aligned} \quad (73.13)$$

kommutasiya münasibətləri ödənilməsi halda: o, (73.12) və (73.1)-dən görüldüyü kimi $\check{J}_i(1)$ və $\check{J}_i(2)$ operatorları ilə kommutasiya etmir.

$$[J^2, J_i(1)] \neq 0; \quad [J^2, J_i(2)] \neq 0. \quad (73.14)$$

Beləliklə, (73.10) münasibətlərindən çıxır ki, tam hərəkət miqdarı momenti momentlərin ümumi kvantlanma qaydasına tabedir:

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad J_z = \hbar m, \quad m = j, j-1, \dots, -j+1, -j. \quad (73.15)$$

(73.13) və (73.14) ifadələri göstərir ki, tam momentin kvadratı və onun z oxu boyunca proyeksiyası ayrı-ayrı hərəkət miqdarı momentlərinin kvadratı ilə eyni zamanda müəyyən qiymət ala, yəni baxılan sistemin halı j, m, j_1, j_2 kvant ədədlərinin verilməsi ilə təyin oluna bilər. Lakin $\check{J}_z(1)$ və $\check{J}_z(2)$

operatorlarının məxsusi qiymətləri isə \tilde{J}^2 -nin məxsusi qiyməti ilə eyni zamanda ölçülə bilmir və beləliklə (73.8) ilə verilmiş $Y_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ dalğa funksiyası \tilde{J}^2 -nin məxsusi funksiyası olmur.

(73.8) ilə verilmiş $Y_{j_1 m_1}, Y_{j_2 m_2}$ funksiyalar çoxluğu ortonormalanmış funksiyaların tam sistemini təşkil etdiyindən (bax, §72) sistemin j, m, j_1, j_2 kvant ədədləri ilə təyin olunan hallarını xarakterizə edən $Y_{j m, j_1 j_2}$ dalğa funksiyasını superpozisiya prinsipinə görə, $Y_{j_1 m_1}$ və $Y_{j_2 m_2}$ funksiyalarının xətti kombinasiyası şəklində göstərmək olar:

$$Y_{j m j_1 j_2} = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} Y_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} Y_{j_1 m_1} Y_{j_2 m_2}. \quad (73.16)$$

Bura daxil olan $C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m}$ əmsalları vektoru toplanma əmsalları və ya Klebş-Qordon (K-Q) əmsalları adlanır.

$Y_{j m j_1 j_2}$ funksiyalarının faza vuruğu elə seçilir ki, bu əmsallar həqiqi ədəd olsun. Adətən $Y_{j m j_1 j_2}$ və $Y_{j_1 m_1}, Y_{j_2 m_2}$ funksiyaları eyni dəyişənlərdən asılıdır. $Y_{j_1 m_1}$ və $Y_{j_2 m_2}$ funksiyalardan biri bucaq koordinatlarından, digəri isə spin dəyişənindən asılıdırsa, $Y_{j m j_1 j_2}$ funksiyası spinli sferik funksiya adlanır.

§72-də biz belə bir hal üçün bir zərrəcikli sistemin $\tilde{J} = \tilde{L} + \tilde{S}$ tam momenti operatorunun $Y_{lm}^{j=l \pm \frac{1}{2}}$ məxsusi funksiyalarını tapmışdıq. (72.24) və

(72.25) ifadələrində $Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}}$ və $Y_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}}$ funksiyalarının qabağındakı əmsallar bu vektoru toplanmanın Klebş-Qordon əmsallarıdır. Həmin ifadələrdə

$S_{1/2}(s_z)$ və $S_{-1/2}(s_z)$ spin funksiyaları onların $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ və $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ifadələri ilə əvəz olunmuşdur.

(73.16)-dan alınır ki, K-Q əmsalları sistemi təşkil edən zərrəciklərin hərəkət miqdarı momenti proyeksiyaları verilmiş olan (m_1, m_2) təsvirdən tam moment və onun proyeksiyası verilmiş olduğu (J, m) təsvirinə keçid əmsallarıdır.

$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m}$ əmsallarına daxil olan m, m_1 və m_2 kvant ədədləri üçün (73.11) bərabərliyi ödənildiyindən (73.16)-da m_1 və m_2 üzrə olan ikiqat cəm formal xarakter daşıyır, m -in verilmiş qiymətində (73.16)-dakı cəmi

onlardan yalnız biri üzrə aparmaq olar.

Yuxarıda qeyd etdik ki, j_1, j_2 ilə j arasında (73.11)-ə oxşar sadə bərabərlik yoxdur. j_1 və j_2 -nin verilmiş qiymətində J -nin ala biləcək qiymətlərini tapmaq üçün aşağıdakı kimi mülahizə aparmaq olar.

Tutaq ki, m_1 və m_2 özünün (73.6)-dakı verilmiş ən böyük qiymətini alır: $m_1=j_1, m_2=j_2$ onda $m = m_1 + m_2 = j_1 + j_2$ qiyməti m -in də ən böyük qiyməti olar: $m_{\max} = j_1 + j_2$. m -in bu qiymətinə bir $Y_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ halı və bir $Y_{j m j_1 j_2}$ halı uyğun gəlir. Tam momentin proyeksiyası $m = m_1 + m_2 - 1$ -ə bərabər olanda m -in bu qiymətinə $m_1=j_1, m_2=j_2-1$ və $m_1=j_1-1, m_2=j_2$ kimi iki $Y_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ halı və $j=j_1+j_2$ ($m=J-1$) və $j=j_1+j_2-1$ ($m=J$) kimi iki $Y_{j m j_1 j_2}$ halı uyğundur. Eləcə də $m=m_1+m_2-2$ qiymətinə $m=j_1, m_2=j_2-2, m_1=j_1-1, m_2=j_2-1, m_1=j_1-2, m_2=j_2$ kimi üç $Y_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ halı, $J=j_1+j_2, J=j_1+j_2-1, J=j_1+j_2-2$ kimi üç $Y_{j m j_1 j_2}$ halı uyğun gəlir və i.a. Beləliklə, m kvant ədədi bir vahid azalanda m -in müəyyən qiymətinə uyğun sistemin mümkün hallarının sayı bir vahid artır. Bu prosesi $j_1 > j_2$ olan hal üçün $m=j_1-j_2$ qiymətinə qədər davam etdirmək olar. m -in bu qiymətində m_2 kvant ədədi j_2 -dən $-j_2$ -yə qədər $2j_2+1$ sayda müxtəlif qiymət alır. m_1 isə $m_1=m-m_2$ bərabərliyindən təyin olunur. Bu zaman j kvant ədədi j_1+j_2 -dən j_1-j_2 -yə qədər $(2j_2+1)$ sayda müxtəlif qiymət alır. Bu zaman hər iki $Y_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ və $Y_{j m j_1 j_2}$ təsvirdə kvant halların sayı $(2j_2+1)$ olur. Sonra $m=j_1-j_2-1$ ola bilər. Lakin m_2 yenə də j_2 -dən $-j_2$ -yə kimi, m_1 isə $m_1=j_1-1, \dots, j_1-2j_2-1$ qiymətlərini alır. $m_2 \leq j_2$ olduğundan onun üçün $(j_2, -j_2)$ intervaldan kənarında qiymət mövcud olmadığından j üçün yeni qiymət alınmır və sistemin mümkün olan kvant hallarının sayı $(2j_2+1)$ olaraq qalır. m -in $-j_1-j_2$ -yə qədər azalması da j üçün yeni qiymətə gətirmir. Beləliklə, j_1 və j_2 -nin verilmiş qiymətində j kvant ədədi $j_{\max} = j_1 + j_2$ ilə $j_{\min} = |j_1 - j_2|$ arasında

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2| \quad (73.17)$$

sayda müxtəlif qiymət alır. $j_1 > j_2$ olanda onların sayı $(2j_2+1)$, $j_1 < j_2$ olanda isə $(2j_1+1)$ -ə bərabərdir. Bu mənada da axırncı həddin modulu götürülmüşdür. j -nin (j_{\max}, j_{\min}) intervaldakı $Y_{j m j_1 j_2}$ hallarının ümumi sayı $Y_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ təsvirində olduğu kimi, yenə də

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) \quad (73.18)$$

olar.

Bu nəticənin vektor modeli adlanan model vasitəsilə şərhini vermək olar. Uzunluğu j_1 və j_2 olan iki \vec{j}_1 və \vec{j}_2 vektorun vektoru toplanmasında alınan \vec{J} vektorunun j uzunluğu, vektorların paralel halına uyğun j_1+j_2 maksimum qiyməti ilə onların antiparalel halına uyğun $|j_1-j_2|$ minimum qiyməti arasında yerləşən ardıcıl tam (yarım tam) ədədlərə bərabər qiymətlərdir.

(73.16) keçidində iştirak edən dalğa funksiyaları ortonormalıyıcı şərtini ödədiyindən Klebş–Qordon əmsalları da həmin şərtləri ödəyir:

$$\sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} C_{j_1 m_1' j_2 m_2'}^{j' m'} = \delta_{j j'} \delta_{m m'}, \quad (73.19)$$

$$\sum_{J m} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} C_{j_1 m_1' j_2 m_2'}^{j m} = \delta_{m_1 m'} \delta_{m_2 m_2'} \quad (73.20)$$

$$\sum_{m_1 m} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} C_{j_1 m_1 j_2 m_2'}^{j m} = \frac{2j+1}{2j_2+1} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{m_2 m_2'} \quad (73.21)$$

Bu ortonormalıyıcı şərtləri (73.16) keçidinin unitar keçid olduğuna dəlalət edir. Bundan başqa (73.19)–(73.21) münasibətləri keçid əmsallarının tam sistem təşkil etdiyini göstərir.

$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m}$ əmsalları həqiqi kəmiyyətlər olduğundan (j, m) təsvirindən (m_1, m_2) təsvirinə keçid də həmin əmsallarla aparılır:

$$Y_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \sum_{J m} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} Y_{j m j_2} \quad (73.22)$$

Vektoru toplanma əmsalları sadə fiziki mənaya malikdir. (73.16) keçidində $(C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m})^2$ -1 sistemin tam momenti j -ya, onun proyeksiyası m -ə bərabər olan $Y_{j m j_2}$ halında zərrəciyin birinin, deyək ki, \vec{J}_1 momentinin z oxu üzrə proyeksiyasının müəyyən m_1 qiymətində, ikinci momentin proyeksiyasının $m_2 = m - m_1$ qiyməti alma ehtimalını göstərir. (73.22) keçidində isə həmin $(C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m})^2$ -1 hər iki momentin m_1 və m_2 proyeksiyaları verildiyi $Y_{j_1 j_2 m_1 m_2}$ halında sistemin tam momentinin j -ya bərabər olma ehtimalıdır.

K–Q əmsalları aşağıdakı simmetriya xassələrinə malikdir.

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C_{j_2 m_2 j_1 m_1}^{j m} \quad (73.23)$$

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C_{j_1 - m_1, j_2 - m_2}^{j_1, -m} \quad (73.24)$$

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = (-1)^{j_2 + m_2} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_2+1}} C_{j_1, -m_1, j_2 m_2}^{j_1, -m_1} \quad (73.25)$$

$$C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j m} = (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_1+1}} C_{j_1 m_1, j_2 - m_2}^{j_2, -m_2} \quad (73.26)$$

Misal üçün j_1 -in istənilən, $j_2 = 1/2$ qiymətində K-Q əmsalları üçün alınan cədvəli göstərik:

j	$m_2 = \frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$j_1 + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$
$j_1 - \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$

Belə bir hal §72-də təhlil olunmuşdur. Həmin §-da spini $\frac{1}{2}\hbar$ olan bir zərrəcikli sistemin $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ tam momentinin məxsusi funksiyaları hesablanmışdır. Cədvəldə $j_1 = l$ götürüb, m -i $m - \frac{1}{2}$ ilə əvəz etsək, §72-də (72.24) və (72.25) ifadələrdəki əmsalları almış olarıq.

§74. Dirak tənliyinin müxtəlif yaxınlaşmaları

Yüklü zərrəciyin elektromaqnit sahəsindəki hərəkəti

$$\left[E - e\varphi - c\alpha \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) - \rho_3 m_0 c^2 \right] \Psi = 0 \quad (74.1)$$

Dirak tənliyi ilə təsvir olunur. Bu tənliyin ümumi şəkildə həlli mürəkkəb riyazi hesablamalarla əlaqədardır. Lakin Dirak nəzəriyyəsində həll edilən

bir çox məsələlər üçün (74.1) tənliyini bu və ya başqa yaxınlaşmada həll etmək və buradan da relyativistik və başqa təbiətli düzəlişləri hesablamaq məsələnin nisbətən tam təhlili üçün kifayət edir.

Çox da böyük olmayan sürətlər halında ($v < c$), zəif ($e\varphi, e\vec{A} \ll m_0 c^2$) xarici sahədəki hərəkət üçün (74. 1) tənliyini v/c və v^2/c^2 dəqiqliyi ilə həll etmək kifayət edir.

a) Əvvəlcə (74.1) tənliyinin qeyri-relyativistik (və ya Pauli) yaxınlaşmasını tapaq. Bu yaxınlaşma Dirak tənliyində yalnız v/c tərtibli hədlərin saxlanması uyğundur.

Dirak matrisalarının Pauli matrisaları ilə verilmiş (64.11) ifadələrindən istifadə edərək (74.1) tənliyini

$$(E - e\varphi)\Phi_1 = c\vec{\sigma}\vec{P}\Phi_2 \quad (74.2)$$

$$(E - e\varphi + 2m_0 c^2)\Phi_2 = c\vec{\sigma}\vec{P}\Phi_1$$

sistemi şəklində yazsaq, burada

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad \Phi_2 = \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \quad (74.3)$$

və $E \approx E' + m_0 c^2$, $\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$ -dir. (74.2)-nin ikinci tənliyindən

$$\Phi_2 = \frac{c\vec{\sigma}\vec{P}}{2m_0 c^2 + E' - e\varphi} \Phi_1 = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(1 + \frac{E' - e\varphi}{2m_0 c^2}\right)^{-1} \vec{\sigma}\vec{P}\Phi_1$$

Zəif sahələr üçün $E' - e\varphi \ll 2m_0 c^2$ olduğundan

$$\Phi_2 = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(1 - \frac{E' - e\varphi}{2m_0 c^2}\right) \vec{\sigma}\vec{P}\Phi_1. \quad (74.4)$$

Bunu (74.2)-də birinci tənlikdə yerinə yazsaq, alınmış tənlik yalnız Φ_1 üçün olar:

$$(E' - e\varphi)\Phi_1 = \frac{\vec{\sigma}\vec{P}}{2m_0} \left(1 - \frac{E' - e\varphi}{2m_0 c^2}\right) \vec{\sigma}\vec{P}\Phi_1. \quad (74.5)$$

Tam enerjinin müsbət qiymətləri ($E > 0$) üçün $\frac{E' - e\varphi}{2m_0c^2} \sim \frac{mv^2}{m_0c^2} \sim \frac{v^2}{c^2}$ olduğundan, baxılan yaxınlaşmada bu həddi vahidə nisbətən nəzərə almasaq, (74.4) və (74.5) ifadələri uyğun olaraq

$$\Phi_2 = \frac{\vec{\sigma}\vec{P}}{2m_0c} \Phi_1 \quad (74.4')$$

və

$$(E' - e\varphi)\Phi_1 = \frac{(\vec{\sigma}\vec{P})(\vec{\sigma}\vec{P})}{2m_0} \Phi_1 \quad (74.5')$$

şəklinə düşər. Həm Dirak və həm də Pauli matrisaları üçün doğru olan

$$(\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b}) = (\vec{a}\vec{b}) + i\vec{\sigma}[\vec{a}\vec{b}] \quad (74.6)$$

münasibətindən istifadə etdikdə (burada \vec{a}, \vec{b} ixtiyari vektorlardır)

$$(E' - e\varphi)\Phi_1 = \frac{1}{2m_0} (\vec{P}^2 + i\vec{\sigma}[\vec{P}\vec{P}])\Phi_1 \quad (74.7)$$

alınar. $\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}$ operatorunun komponentlərinin qeyri-kommutativliyini və \vec{p} -nin özündən sağda duran funksiyalara təsir etdiyini nəzərə alsaq,

$$\left[\vec{P}\vec{P} \right] \Phi_1 = -\frac{e}{c} ([\vec{p}\vec{A}] + [\vec{A}\vec{p}])\Phi_1 = -\frac{e}{c} [\vec{p}\vec{A}] \cdot \Phi_1 = i\hbar \frac{e}{c} \text{rot } \vec{A} \cdot \Phi_1$$

olar. $\vec{\mathcal{H}} = \text{rot } \vec{A}$ olduğundan

$$\left[\vec{P}\vec{P} \right] \Phi_1 = \frac{ie\hbar}{c} \vec{\mathcal{H}} \Phi_1. \quad (74.7')$$

Bunu (74.7)-də yerinə yazanda (61.15) Pauli tənliyini alırıq:

$$\left(E' - e\varphi - \frac{1}{2m_0} P^2 + \frac{e\hbar}{2m_0c} (\vec{\sigma}\vec{\mathcal{H}}) \right) \Phi_1 = 0. \quad (74.8)$$

Deməli, qeyri-relyativistik yaxınlaşmada, yəni Dirak tənliyində yalnız v/c tərtibli hədləri saxladıqda, o, Pauli tənliyinə keçir. (74.8) tənliyində sonuncu

$$V^{maq} = \frac{e\hbar}{2m_0c} \vec{\sigma} \vec{\mathcal{H}} = -\vec{\mu}_s \vec{H} \quad (74.9)$$

həddi zərrəciyin spinə malik olması hesabına meydana çıxmışdı və o, spin maqnit momenti

$$\vec{\mu}_s = \frac{e\hbar}{2m_0c} \vec{\sigma} = \frac{e}{m_0c} \vec{S}, \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (74.10)$$

ilə xarici maqnit sahəsi arasında meydana çıxan qarşılıqlı təsiri xarakterizə edir (burada $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ – spin operatorudur).

(74.10) münasibəti spin mexaniki momenti ilə uyğun maqnit momenti üçün De-Qaaz və Eynşteyn təcrübələrində alınmış münasibətin üzərinə düşür və maddələrin maqnit xassələrinin yalnız spin maqnit momenti hesabına olmasını göstərir. Digər tərəfdən, maqnit sahəsinin zərrəciyin hərəkətinə spinin varlığı ilə əlaqədar olan təsiri qeyri-relyativistik yaxınlaşmada artıq özünü göstərir. Elektrik sahəsinin zərrəciyin hərəkətinə spinlə əlaqədar təsiri isə bu yaxınlaşmada meydana çıxmır. Bu təsir, aşağıda görəcəyimiz kimi (bu paragrafın b) bəndinə bax), yalnız sonrakı yaxınlaşmada (yəni (74.1) tənliyinə v^2/c^2 tərtibli hədlər də daxil olduqda) özünü göstərir. \sphericalangle

Beləliklə, Dirak nəzəriyyəsi zərrəciyin daxili maqnit momentinə (spinə) malik olmasını qabaqcadan söyləməklə bərabər, onun qiyməti üçün (təcrübəyə uyğun) düzgün qiymətə gətirir. Bu, Dirak nəzəriyyəsinin əsas üstün cəhətlərindən biri hesab olunur.

b) Pauli tənliyini çıxarılanda biz, (74.5) tənliyində yalnız v/c tərtibli hədləri saxlamışdıq. Bu yaxınlaşmada, (74.8)-dən göründüyü kimi, elektrik sahəsinin elektronun hərəkətinə spinin varlığı ilə əlaqədar təsiri meydana çıxmır. Elektronun hərəkətinə bu təsirlə yanaşı relyativistik düzəlişlərin də əhəmiyyəti böyükdür. Bunları hesablamaq üçün (74.5) tənliyində v/c tərtibli hədlərlə yanaşı, v^2/c^2 tərtibli hədləri saxlamaq lazımdır.

(74.4) və (74.4') münasibətlərindən görünür ki, (74.5) tənliyinin həlli olan Φ_1 funksiyası iki komponentli funksiyaya uyğun normalanma şərtini ödəmir və dalğa funksiyasının fiziki mənasına uyğun şəklə malik deyildir. Doğrudan da

$$1 = \int \Psi^+ \Psi (d\vec{r}) = \int (\Phi_1^* \Phi_1 + \Phi_2^* \Phi_2) (d\vec{r}) = \int \Phi_1^* \left(1 + \frac{p^2}{4m_0^2 c^2} \right) \Phi_1 (d\vec{r}) \quad (74.11)$$

bərabərliyində $1 + p^2/4m_0^2 c^2$ vuruğu meydana çıxır və Φ_1 üçün normalanma şərti adi şəkllə malik olur.

İki komponentli funksiyalar üçün də normalanma şərtini adi şəkildə saxlamaq üçün

$$\Phi = g \Phi_1 \quad (74.11')$$

kimi yeni iki komponentli funksiya daxil edək. Onda

$$\int \Phi^* \Phi (d\vec{r}) = \int \Phi_1^+ g^+ g \Phi_1 (d\vec{r}) = 1 \quad (74.12)$$

olar. (74.11) ilə (74.12)-ni müqayisə etsək,

$$g^2 = 1 + \frac{\tilde{p}^2}{4m_0^2 c^2},$$

buradan v^2/c^2 dəqiqliyi ilə

$$g = 1 + \frac{\tilde{p}^2}{8m_0^2 c^2}; \quad g^{-1} = 1 - \frac{\tilde{p}^2}{8m_0^2 c^2}$$

alınır. Göründüyü kimi g çevrilmə operatoru ermit qoşma operatorudur: $g^+ = g$. Lakin unitar deyildir: $g^+ \neq g^{-1}$.

$\Phi_1 = g^{-1} \Phi$ -i (74.5)-də yazıb, onda yalnız v/c və v^2/c^2 hədləri ilə məhdudlaşsaq,

$$(E' - V - \frac{(E' - V)\tilde{p}^2}{8m_0^2 c^2}) \Phi = \left\{ \frac{(\vec{\sigma}\tilde{p})(\vec{\sigma}\tilde{p})}{2m_0} - \frac{(\vec{\sigma}\tilde{p})(E' - V)(\vec{\sigma}\tilde{p})}{4m_0^2 c^2} - \frac{(\vec{\sigma}\tilde{p})(\vec{\sigma}\tilde{p})\tilde{p}^2}{16m_0^3 c^2} \right\} \Phi$$

və ya (74.6) münasibətinə əsasən

$$\left(E' - V - \frac{(E' - V)\tilde{p}^2}{8m_0^2 c^2} \right) \Phi =$$

$$= \left\{ \frac{\check{\check{P}}^2 + i\check{\sigma}[\check{\check{P}}\check{\check{P}}]}{2m_0} - \frac{(\check{\sigma}\check{p})(E' - V)(\check{\sigma}\check{p})}{4m_0^2 c^2} - \frac{p^4}{16m_0^3 c^2} \right\} \Phi \quad (74.13)$$

olar.

$\check{\check{p}}$ və $\check{\sigma}$ operatorlarının təsir qanunlarından istifadə edərək (74.13) tənliyini sadələşdirək. $(\check{\sigma}\check{p})(E' - V)(\check{\sigma}\check{p})\Phi$ həddi hesablanan zaman nəzərə almaq lazımdır ki, $\check{\check{p}} = -i\hbar\check{\nabla}$ operatoru yalnız V və Φ -ə təsir edir (E' koordinatlardan asılı deyildir):

$$\begin{aligned} (\check{\sigma}\check{p})(E' - V)(\check{\sigma}\check{p})\Phi &= (E' - V)\check{p}^2\Phi - (\check{\sigma}\check{p}V)(\check{\sigma}\check{p})\Phi = (E' - V)\check{p}^2\Phi - \\ &- i\hbar e(\check{\sigma}\check{\mathcal{E}})(\check{\sigma}\check{p})\Phi = \{(E' - V)\check{p}^2 - i\hbar e(\check{\mathcal{E}}\check{p}) + \hbar e\check{\sigma}[\check{\mathcal{E}}\check{p}]\}\Phi \quad (74.14) \end{aligned}$$

Burada $V = e\varphi$ və $\check{\mathcal{E}} = -\check{\nabla}\varphi$ -dən istifadə edilmişdir.

$\frac{\check{p}^4}{16m_0^3 c^2}$ həddini sadələşdirək. Baxılan həddin özü v^2/c^2 tərtibli ol-

duğundan, $\frac{\check{p}^2}{2m_0}$ operatoru üçün

$$\frac{\check{p}^2}{2m_0}\Phi = (E' - V)\Phi \quad (74.15)$$

bərabərliyindən istifadə etmək olar. Onda

$$\begin{aligned} \frac{\check{p}^4}{2m_0}\Phi &= \check{p}^2(E' - V)\Phi = (E' - V)\check{p}^2\Phi - (\check{p}^2V)\Phi - 2(\check{p}V)(\check{p}\Phi) = \\ &= (E' - V)\check{p}^2\Phi + e\hbar^2\nabla^2\varphi\cdot\Phi - 2i\hbar e(\check{\mathcal{E}}\check{p})\Phi \quad (74.16) \end{aligned}$$

və buradan

$$(E' - V)\check{p}^2\Phi = \left(\frac{\check{p}^4}{2m_0} - e\hbar^2\nabla^2\varphi + 2i\hbar e(\check{\mathcal{E}}\check{p}) \right)\Phi \quad (74.17)$$

alınır. (74.14) və (74.17) ifadələrini (74.13)-də yerinə yazıb (74.7') bəra-

bərliyi nəzərə aldıqda

$$(E' - e\varphi - \frac{\tilde{p}^2}{2m_0})\Phi = \left\{ -\frac{\tilde{p}^4}{8m_0^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}[\vec{\mathcal{E}}\vec{p}]) + \right. \\ \left. + \frac{e\hbar^2}{8m_0^2c^2}\nabla^2\varphi - \frac{e}{m_0c}(\vec{A}\vec{p}) - \mu_s(\vec{\sigma}\vec{\mathcal{H}}) \right\}\Phi \quad (74.18)$$

olar. (74.18) tənliyi relyativistik zərrəciyin xarici elektrik və maqnit sahələrindəki hərəkətini xarakterizə edir. Ona relyativistik və spin effektləri ilə əlaqədar sistemin xarici elektrik və maqnit sahələri ilə qarşılıqlı təsir enerji operatorları daxildir.

Axırıncı tənliyi kvant mexaniki tənliklərinə xas olan ümumi şəkildə yazsaq,

$$(E - \tilde{H})\Phi = 0, \quad (74.19)$$

onun \tilde{H} Hamilton operatorunu

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + \tilde{H}_3 + \tilde{H}_4 \quad (74.20)$$

kimi beş həddin cəmi kimi göstərmək olar. (74.19) tənliyinə gətirən yaxınlaşma zəif relyativistik yaxınlaşma adlanır. Burada

$$\tilde{H}_0 = \frac{\tilde{p}^2}{2m_0} + e\varphi \quad (74.21)$$

xarici elektrostatik sahədə hərəkət edən qeyri-relyativistik zərrəciyin Hamilton operatorudur.

$$\tilde{H}_1 = -\frac{\tilde{p}^4}{8m_0^3c^2} \quad (74.22)$$

zərrəciyin sürətinin kifayət qədər böyük olması ($v \sim c$) ilə əlaqədar olan relyativistik düzəliş operatorudur.

$$H_2 = -\frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}[\vec{\mathcal{E}}\vec{p}]) \quad (74.23)$$

spin-orbital qarşılıqlı təsir operatoru adlanır və zərrəciyin spin maqnit momentinə elektrik sahəsinin təsirini xarakterizə edir.

$$H_3 = \frac{e\hbar^2}{8m_0^2c^2} \nabla^2 \varphi \quad (74.24)$$

kontakt qarşılıqlı təsir operatoru adlanır və onun zərrəciyin enerji səviyyəsinə verdiyi düzəlişə *Darvin düzəlişi* deyilir. Onun klassik analoqu yoxdur və ona əyani məna vermək mümkün olmur.

$$\check{H}_4 = \frac{e}{m_0c} (\vec{A}\vec{p}) + \frac{e\hbar}{2m_0c} (\vec{\sigma}\vec{\mathcal{H}}) \quad (74.25)$$

operatoru zərrəciyin spin və orbital maqnit momentlərinə maqnit sahəsinin təsirini xarakterizə edir.

§75. Relyativistik elektronun ($v \sim c$) nüvənin Kulon sahəsində hərəkəti

Hidrogen və hidrogenəbənzər atomlarda elektronun nüvənin Kulon sahəsindəki hərəkətinin enerji səviyyələri üçün Şredinger nəzəriyyəsində

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \quad (75.1)$$

ifadəsi alınır (bax: 40.26), burada $R = \frac{me^4}{2\hbar^3}$ *Ridberq* sabitidir. Bu nəticənin

təcrübə ilə müqayisəsi göstərir ki, o, təcrübə faktları tam təsvir edə bilmir. Hidrogenəbənzər atomların spektrlərində spektr xətləri incə quruluşa malikdir: hər bir xətt bir-birinə çox yaxın iki xətdən ibarətdir. Spin və relyativistik effektləri özündə əks etdirməyən Şredinger nəzəriyyəsi spektr xətlərinin incə quruluşunu izah edə bilmir. Hidrogen atomunun düzgün nəzəriyyəsi yalnız Dirak tənliyi vasitəsilə qurula bilər. Lakin Dirak tənliyinin Kepler məsələsi üçün həlli mürəkkəb riyazi hesablamalarla əlaqədardır. Ondan alınan nəticələrə kifayət qədər yaxın nəticələrə (74.18) tənliyi vasitəsilə də gəlmək olur.

Baxılan halda xarici elektromaqnit sahəsi olmadığından ($\vec{\mathcal{H}} = 0$,

$\bar{A}(x) = 0$) (74.18) tənliyinin sağ tərəfində yalnız birinci üç hədd qalır. Yuxarıda qəbul etdiyimiz işarələrə əsasən onu

$$E\Phi = \tilde{H}\Phi$$

və ya

$$E\Phi = (\tilde{H}_0 + \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + \tilde{H}_3)\Phi \quad (75.2)$$

şəklində yazaq.

Yuxarıda göstərdik ki, v/c yaxınlaşmada Dirak tənliyi Pauli tənliyinə keçir. Xarici maqnit sahəsi olmadıqda isə Pauli tənliyinin Hamilton operatoru Şredinger Hamilton operatoru üzərinə düşür, yəni $\tilde{H}_0^H = \tilde{H}_0^S = \tilde{H}_0$ olur. $\tilde{H}_1, \tilde{H}_2, \tilde{H}_3$ operatorlarına uyğun kəmiyyətlər isə v^2/c^2 tərtibli kiçik kəmiyyətlərdir. Ona görə də (75.2) tənliyini həll etmək üçün stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsinə tətbiq etmək və birinci yaxınlaşma ilə kifayətlənmək olar. Lakin baxılan halda sıfırıncı yaxınlaşmanın dalğa funksiyaları olaraq Şredinger tənliyinin həlləri olan

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (75.3)$$

funksiyalarını yox, spini nəzərə almaqla tapılmış iki komponentli (72.24) və (72.25) funksiyalarını götürmək lazımdır:

$$\Psi_{nlm}^{(J)} = R_{nl}(r)Y_{lm}^{(J)}(\theta, \varphi). \quad (75.4)$$

Bu onunla əlaqədardır ki, (75.3) funksiyaları (75.2) tənliyinə daxil olan \tilde{H}_2 spin-orbital qarşılıqlı təsir operatoru ilə kommutasiya etməyən \tilde{L}_z operatorunun məxsusi funksiyaları olduğu halda, (75.4) funksiyaları isə \tilde{H}_2 ilə kommutasiya edən tam moment operatorunun \tilde{J}_z komponenti operatorunun məxsusi funksiyalarıdır. Bu baxımdan spektrin incə quruluşunun hesablanması üçün (75.3) yox, (75.4) funksiyaları götürülməlidir. Beləliklə, fərz olunur ki, sıfırıncı yaxınlaşmada $\Psi_{nlm}^{(J)}(\theta, r, \varphi)$ funksiyaları

$$E^0\Psi^{(J)} = \tilde{H}_0\Psi^{(J)}$$

və ya

$$(E^0 - e\varphi)\Psi^J = \frac{\tilde{p}^2}{2m_0}\Psi^{(J)} \quad (75.5)$$

tənliyinin həlləridir. Onda $R_n(r)$ funksiyaları (40.37) ilə verilir. (75.2) tənliyində $V = \check{H}_1 + \check{H}_2 + \check{H}_3$ operatoruna həyəcanlanma operatoru kimi baxıldıqda, enerjiyə birinci tərtib düzəliş

$$E^{(1)} = \int \Psi^{+(J)} V \Psi^{(J)}(d\vec{r}) = \int \Psi^{+(J)} \check{H}_1 \Psi^{(J)}(d\vec{r}) + \int \Psi^{+(J)} \check{H}_2 \Psi^{(J)}(d\vec{r}) + \int \Psi^{+(J)} \check{H}_3 \Psi^{(J)}(d\vec{r}) \quad (75.6)$$

kimi hesablanır.

a) Relyativistik düzəliş. Bu düzəlişi hesablamaq üçün (75.5) tənliyindən istifadə edək. Düzəlişi hər hansı ixtiyari (n, l, m) halına hesablamış olsaq, (75.5) tənliyindəki E^0 kəmiyyəti qeyri-relyativistik yaxınlaşmada hesablanan və (75.1) ifadəsi ilə verilmiş baxılan halın E_n^0 enerjisi üzərinə

düşər. $\Psi^{(J)}$ funksiyaları həyəcanlanmamış sistemin, yaxud $\check{H}_0 = \frac{\check{p}^2}{2m_0} + e\varphi$ operatorunun məxsusi funksiyaları olduğundan

$$E_1^{rel} = - \int \Psi^{+(J)} \frac{\check{p}^4}{8m_0^3 c^2} \Psi^{(J)}(d\vec{r}) = - \frac{1}{2m_0 c^2} \int \Psi^{+(J)} (E_n^0 - e\varphi)^2 \Psi^{(J)}(d\vec{r}) \quad (75.7)$$

alınar. Nüvənin Kulon sahəsindəki hərəkəti üçün $e\varphi = -\frac{Ze^2}{r}$ olduğundan

(75.7)-də $E_n^0 - e\varphi$ kəmiyyəti yalnız r -in mütləq qiymətindən asılı olur. Ona görə bucaqlara görə integral

$$\int Y_{lm}^{+(J)}(\theta, \varphi) Y_{lm}^{(J)}(\theta, \varphi) d\Omega = 1$$

və

$$E_1^{rel} = \frac{1}{2m_0 c^2} \int R_{nl} \left(E_n^0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 R_{nl} r^2 dr = \frac{1}{2m_0 c^2} (E_n^{02} + 2E_n^0 Ze^2 \overline{r^{-1}} + Ze^4 \overline{r^{-2}})$$

olur. $\overline{r^{-1}}$ ilə $\overline{r^{-2}}$ -nin (40.46) ilə verilmiş

$$\overline{r^{-1}} = \frac{Z}{a} \frac{1}{n^2} = \frac{2R\hbar Z}{e^2 n^2}, \quad \overline{r^{-2}} = \left(\frac{Z}{a} \right)^2 \frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)} = \frac{2RZ^2 m_0}{\hbar n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)}$$

qiymətlərini yuxarıda yerinə yazsaq,

$$E_1^{rel} = E_{nl}^{rel} = -\frac{R\hbar Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4} \right) \quad (75.8)$$

alırıq, burada $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ -incə quruluşu sabitidir.

b) Spin-orbital qarşılıqlı təsirə uyğun düzəliş. Əvvəlcə mərkəzi sahədəki hərəkət üçün \check{H}_2 operatorunun şəklini dəyişək. Spin operatorunun $\check{S} = \frac{\hbar}{2} \check{\sigma}$, nüvənin Kulon sahəsi üçün $\varphi = \frac{Ze}{r}$ və $\vec{E} = -\text{grad}\varphi = \frac{Ze\vec{r}}{r^3}$ (burada e -elektronun yüküdür) olduğunu nəzərə alsaq,

$$\check{H}_2 = \frac{Ze^2}{2m_0c^2} \frac{(\check{S}\check{L})}{r^3} \quad (75.9)$$

şəklinə düşür, burada $\check{L} = [\check{r}\check{p}]$ - orbital hərəkət miqdarı momenti operatorudur. Buradan görünür ki, \check{H}_2 -i \check{S} spin və \check{L} orbital momenti operatorları ilə təyin olunur, buna görə də \check{H}_2 spin-orbital qarşılıqlı təsir operatoru adlanır. Ona uyğun düzəliş

$$E_2^{s.o.} = \int \Psi^{+(J)} H_2 \Psi^{(J)}(d\vec{r}) = \frac{Ze^2}{2m_0c^2} \overline{r^{-3}} \int Y_{lm}^{(J)}(\check{S}\check{L}) Y_{lm}^{(J)} d\Omega$$

olar. Burada $\overline{r^{-3}} = \int R_{nl} r^{-3} R_{nl} r^2 dr$ -dir və (40.46)-ya əsasən

$$\overline{r^{-3}} = \left(\frac{Z}{a} \right)^3 \frac{1}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

bərabərdir.

Burada (71.9)-dan

$$\check{L}\check{S} = \frac{1}{2}(\check{J}^2 - \check{L}^2 - \check{S}^2)$$

bərabərliyindən istifadə edib, \tilde{J}^2, \tilde{L}^2 və \tilde{S}^2 operatorlarının eyni $Y_{lm}^{(j)}(\theta, \varphi)$ məxsusi funksiyalara malik olduğunu nəzərə alsaq, spin-orbital qarşılıqlı təsir enerjisi üçün

$$E_2^{s.o.} = \frac{\hbar^2 Z^2 e^2}{4m_0 c^2} r^{-3} [j(j+1) - l(l+1) - l_s(l_s+1)], l \neq 0$$

$$E_2^{s.o.} = 0, l = 0$$

alınır. r^{-3} -ü qiymətilə əvəz etdikdə

$$E_2^{s.o.} = \frac{R\hbar Z^4 \alpha^2}{2n^3} \frac{[j(j+1) - l(l+1) - l_s(l_s+1)](1 - \delta_{l0})}{l(l + \frac{1}{2})(l+1)} \quad (75.10)$$

burada

$$\delta_{l0} = \begin{cases} 1, & l = 0 \\ 0, & l \neq 0 \end{cases}$$

və kvadrat mötərizə

$$j(j+1) - l(l+1) - l_s(l_s+1) = \begin{cases} l, & j = l + l_s \\ -(l+1), & j = l - l_s \end{cases} \quad (75.11)$$

v) Kontakt qarşılıqlı təsirə uyğun düzəliş

$$E_3^k = \int \Psi^{+(j)} \tilde{H}_3 \Psi^{(j)}(d\vec{r}) = \frac{\hbar^2 e}{8m_0^2 c^2} \int \Psi^{+(j)} \nabla^2 \varphi \Psi^{(j)}(d\vec{r}). \quad (75.12)$$

Nüvənin Kulon sahəsinin mərkəzi sahə olması fərziyyəsinə əsasən nüvəyə nöqtəvi yük kimi baxmaq olar. Nöqtəvi yükün yaratdığı sahənin potensialı isə Puasson tənliyi ilə təyin olunur:

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho(\vec{r}) = -4\pi e \delta(\vec{r})$$

Bunu (75.12)-də yerinə yazıb, $\delta(\vec{r})$ funksiyası vasitəsilə inteqral götürsək,

$$E^k = \frac{\pi Z e^2 \hbar^2}{2 m_0^2 c^2} \left| \Psi^{(j)}(0) \right|^2 \quad (75.13)$$

alarıq. Burada

$$\left| \Psi^{(j)}(0) \right|^2 = \left| R_{nl}(0) \right|^2 Y_{lm}^{+(j)} Y_{lm}^{(j)}.$$

R_{nl} – radial funksiyanın (40.37) ifadəsindən

$$R_{nl}(0) = \frac{2}{n^{3/2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \delta_{l0}$$

və $l=0$ olduqda isə $Y_{lm}^{(j)} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ olur. Onda

$$\left| \Psi^{(j)}(0) \right|^2 = \frac{1}{\pi \cdot n^3} \left(\frac{Z}{a} \right)^3.$$

Bunu (75.13)-də yerinə yazsaq, kontakt qarşılıqlı təsir enerjisi üçün

$$E_3^k = \frac{R\hbar Z^4 \alpha^2}{n^3} \delta_{l0} \quad (75.14)$$

alarıq. (75.10) və (75.14) ifadələrini toplayıb (75.11) bərabərliyini nəzərə alsaq, relyativistik effektdə və ələcə də spin-orbital və kontakt qarşılıqlı təsire uyğun əlavə enerji

$$E_{nj}^{(1)} = E_1^{rel} + E_2^{s.o.} + E_3^k = -\frac{R\hbar Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \quad (75.15)$$

olar. Beləliklə, hidrogen və hidrogenəbənzər atomların enerji spektri üçün

$$E_{nlj} = E_{nl}^o + E_{nj}^{(1)} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (75.16)$$

qiyməti alınır. Buradan görünür ki, spektral xətlərin parçalanması ikinci

hədlə təyin olunur və parçalanmış xətlər arasındakı məsafə incə quruluş sabiti α -nın kvadratı ilə mütənasibdir.

④) **Spektrin incə quruluşu.** (75.16) ifadəsi Dirak tənliyinin dəqiq həlli vasitəsi ilə alınmış uyğun ifadədən v^4/c^4 və daha yüksək tərtibli hədlərlə fərqlənir*. Elektronun atomdakı sürətləri üçün isə onların elə bir böyük əhəmiyyəti yoxdur.

Atomun stasionar halları üçün alınmış (75.16) ifadəsindən görünür ki, spektral xətlərin incə quruluşu yalnız j daxili kvant ədədindən asılıdır. Atomun s səviyyələri incə quruluşa malik deyildir, çünki $l=0$ olanda j yalnız

$j = \frac{1}{2}$ qiymətini alır. Bütün başqa səviyyələr, l -in verilmiş qiymətində

$j = l \pm \frac{1}{2}$ qiymətlərini aldığından, iki səviyyəyə parçalanır. Doğrudan da,

$n=1$, $l=0$ və $j = \frac{1}{2}$ olur. Bu üç ədədə atomun yeganə bir $1s_{1/2}$ səviyyəsi uyğun gəlir. $n=2$ olanda isə l orbital kvant ədədi $l=0$ və $l=1$ qiymətlərini

alır. Burada $2s_{1/2}$ səviyyəsi parçalanmır. $l=1$ olanda isə $j = l \pm \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ və

$j = l - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ kimi iki qiymət alır və atomun bu səviyyəsi $2p_{1/2}$ və $2p_{3/2}$

kimi iki səviyyəyə parçalanır və i.a. (şəkil 33). Belə parçalanmaya səviyyələrin *multiplətliyi* deyilir.

§40-da gördük ki, hidrogen atomunun n və l -in verilmiş qiymətlərinə uyğun səviyyəsi maqnit kvant ədədinə görə $2l+1$ dəfə cırılşmış olur. Səviyyənin incə quruluşu nəzərə alındıqda onun cırılşma tərtibi bir qədər

dəyişir. Baxılan halda l -in verilmiş qiymətində $j = l \pm \frac{1}{2}$ kimi iki qiymət,

m_j maqnit kvant ədədi isə $-j, \dots, +j$ kimi $2j+1$ müxtəlif qiymətlər alır. Beləliklə, nl səviyyəsinin cırılşma tərtibi $2l+1$ yox, $2(2l+1)$ -ə bərabər olur.

* Doğrudan da, Dirak tənliyinin dəqiq həllindən alınan

$$E_{nlj} = m_0 c^2 \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{\left[n - j + 1/2 + \sqrt{(j+1/2)^2 - \alpha^2 Z^2} \right]} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (75.17)$$

ifadəsini $\alpha^2 Z^2$ -in üstlərinə görə sıraya ayıraraq, birinci iki hədlə kifayətləndikdə (75.16) ifadəsi alınır.

$$E = E_0 + E_{(1)} = \frac{R h c}{n^2} \left[1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (75.16)$$

Doğrudan da, $n=1$, $l=0$ səviyyəsinin cırılma tərtibi $j = \frac{1}{2}$, $m_j = \pm \frac{1}{2}$ olduğundan 2, $n=2$, $l=1$ səviyyəsinin cırılma tərtibi isə $j = \frac{1}{2}, m_j = \pm \frac{1}{2}$ və $j = \frac{3}{2}, m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ olduğundan 6-ya bərabər olur və i.a.

Spektral xətlərin parçalanma tərtibini (incə quruluşunu) hesablamaq üçün seçmə qaydalarından istifadə etmək lazımdır. n , l və m üçün seçmə qaydaları §42-də alınmışdır: Δn -istənilən, $\Delta l = \pm 1$ və $\Delta m = 0, \pm 1$. Bu

qaydalara və $l = j \pm \frac{1}{2}, m_j = m \pm \frac{1}{2}$

bərabərlikləri əsasında j və m_j üçün $\Delta j = 0, \pm 1$ və $\Delta m_j = 0, \pm 1$ seçmə qaydaları alınır. Deməli, mümkün olan keçidləri müəyyən etmək üçün Δn istənilən,

$$\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1 \\ \Delta m &= 0, \pm 1, \Delta m_j = 0, \pm 1 \end{aligned} \quad (75.18)$$

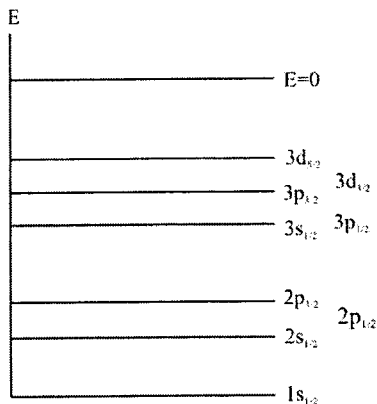
seçmə qaydalarından istifadə etmək lazımdır.

Layman seriyasının hər istənilən ($n, l=1$) səviyyəsindən ($n=1, l=0$) səviyyəsinə keçidlərə uyğun hər bir xətti $np_{1/2}$ -dən $1s_{1/2}$ və $np_{3/2}$ -dən $1s_{1/2}$ səviyyəsinə keçidlərlə yaranan iki xəttə parçalanır. Simvolik olaraq bu xətləri

$$\omega^{(1)} = (1s_{1/2}) - (np_{1/2}); \quad \omega^{(2)} = (1s_{1/2}) - (np_{3/2}) \quad (75.19)$$

kimi göstərir. Eynilə ($n, l=0, 1, 2$) səviyyələrindən ($n=2, l=0, 1$) səviyyələrə keçidlərə uyğun Balmer seriyası üçün aşağıdakı parçalanmaları alırıq:

$$\omega^{(1)} = (2s_{1/2}) - (np_{1/2}); \quad \omega^{(2)} = (2s_{1/2}) - (np_{3/2});$$



Şəkil 33. Hidrogen atomunun enerji səviyyələrinin incə quruluşu (multipletliyi).

$$\begin{aligned}
\omega^{(3)} &= (2p_{1/2}) - (ns_{1/2}); & \omega^{(4)} &= (2p_{1/2}) - (nd_{3/2}); \\
\omega^{(5)} &= (2p_{3/2}) - (ns_{1/2}); & \omega^{(6)} &= (2p_{3/2}) - (nd_{3/2}); \\
\omega^{(7)} &= (2p_{3/2}) - (nd_{5/2}).
\end{aligned}
\tag{75.20}$$

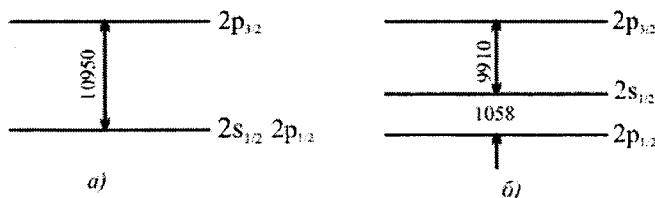
Relyativistik və spin effektlərinin təzahürü nəticəsi kimi spektral xətlərin incə quruluşunun izahı Dirak nəzəriyyəsinin ən mühüm müvəffəqiyyətlərindən biri idi. Lakin nəzəriyyənin təcrübə ilə daha diqqətli müqayisəsi göstərdi ki, onlar arasında tam uyğunluq mövcud deyildir.

(75.16) düsturundan və şəkil 33-dən görüldüyü kimi Dirak nəzəriyyəsinə görə $2s_{1/2}$ və $2p_{1/2}$ səviyyələri tam mənası ilə bir-birinin üzərinə düşür:

$$E_{20\frac{1}{2}} = E_{21\frac{1}{2}} = \frac{R}{4} \left(1 + \frac{5\alpha^2}{16} \right). \tag{75.21}$$

Lakin 1947-ci ildə Lemb və Rizerford radiospektroskopiya metodlarının köməyi ilə hidrogen atomunda $2s_{1/2}$ və $2p_{1/2}$ səviyyələrinin enerjiləri arasındakı fərqi ölçə bilmiş və göstərmişdilər ki, $2s_{1/2}$ səviyyəsi $2p_{1/2}$ səviyyəsinə nisbətən təxminən $\frac{1}{10} \frac{R\alpha^2}{16}$ qədər yuxarıda yerləşir. Buna *Lemb sürüşməsi* deyilir (bax: §80).

Şəkil 34-də $2p_{1/2}$, $2s_{1/2}$, və $2p_{3/2}$ səviyyələri üçün Dirak nəzəriyyəsində, Lemb və Rizerford təcrübələrində alınan nisbi vəziyyətləri göstərilmişdir, onlar arasındakı fərq meqaherslərlə göstərilir. Təcrübə ilə nəzəriyyə arasındakı bu uyğunsuzluq yalnız kvant elektrodinamikasında izah olunur və o, vaxtilə axırıncının sürətlə inkişafına səbəb olmuşdur.



Şəkil 34. Hidrogen atomunun $2s$ və $2p$ səviyyələrinin Dirak nəzəriyyəsində (a) və Lemb-Rizerford təcrübəsində alınan (b) nisbi vəziyyətləri.

§50-nin q) bəndində göstərdik ki, elektromaqnit sahəsinin hər bir kvant halında real (eninə) fotonların sayı sıfıra bərabər olarsa, sahənin belə halı **elektromaqnit sahəsinin vakuumu** və yaxud **virtual fotonlar sahəsi** adlanır. İlk dəfə 1947-ci ildə N.Bete nəzəri olaraq göstərdi ki, Lemb sürüşməsi

elektromaqnit sahəsi vakuununun atomun $2s_{1/2}$ səviyyəsində olan elektrona təsiri nəticəsidir. Sahənin vakuumu ilə elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsir virtual fotonlarla daşınır. Nəzəriyyədən Lemb sürüşməsi üçün 1040 meqahers alınır, bu da təcrübədən alınan qiymətə (1058 meqahers) olduqca yaxındır.

ğ) İfrat incə quruluş. Elektronun sferik simmetrik Kulon sahəsində hərəkətini tədqiq etdikdə göstərdik ki, atomun enerji səviyyəsi tam momentin proyeksiyasını təyin edən m_j kvant ədədindən asılı deyil, tam momentin mütləq qiymətini təyin edən j kvant ədədindən asılıdır. Ona görə də atomun hər bir enerji səviyyəsi $(2j+1)$ tərtibdən cırlaşmışdır. Bu cırlaşma yalnız sahənin mərkəzilik (sferik simmetriklilik) şərti pozulanda yox (bax: §89), atomun nüvəsi maqnit momentinə malik olduqda da ortadan götürülür. Adətən atomların əksəriyyətinin nüvəsi maqnit momentinə malikdir. Belə atomlarda onun elektronları ilə nüvənin maqnit momenti arasında qarşılıqlı təsir meydana çıxır və o, elektron nüvəyə yaxın olduqca güclü olur. Nüvə maqnetonu elektron maqnetonundan təxminən min dəfə kiçik olduğundan atomun səviyyələrinin ifrat incə quruluşu (qonşu səviyyələr arasındakı məsafə) səviyyələrin incə quruluşundan bir o qədər kiçik olmalıdır.

Baxılan effektin kiçikliyini və nüvəyə yaxın olan elektronlar üçün onun nisbətən böyük qiymət aldığını nəzərə alaraq, sadəlik naminə, yalnız hidrogen atomunun s səviyyəsinin ifrat incə quruluşunu öyrənməklə kifayətlənmək olar. Bu halda elektronun və sükunətdəki nüvənin maqnit momentləri spin maqnit momentləri olduğundan, atom səviyyələrinin ifrat incə quruluşunun tədqiqini Pauli yaxınlaşmasında aparmaq olar.

İki zərrəciyin spin maqnit momentləri arasındakı qarşılıqlı təsirə, onlardan birinin (deyək ki, protonun) maqnit momentinin yaratdığı maqnit sahəsində digərinin həmin sahə ilə qarşılıqlı təsiri kimi baxmaq olar. (61.5) əsasən belə qarşılıqlı təsir operatoru

$$H^{maq} = \frac{e}{mc} (\vec{A}\vec{p} + \vec{S}\vec{\mathcal{H}}) \quad (75.22)$$

şəklindədir. Burada \vec{A} – nüvənin maqnit momenti sahəsinin vektor potensialı, $\vec{\mathcal{H}}$ – həmin sahənin intensivliyi, $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ elektronun spin operatorudur.

Atom nüvəsinin $\vec{\mu}$ maqnit momentinə nöqtəvi maqnit dipolu kimi baxsaq, onun yaratdığı sahənin vektor potensialı

$$\vec{A} = \frac{[\vec{\mu}\vec{r}]}{r^3} = - \left[\vec{\mu}\vec{\nabla} \frac{1}{r} \right]$$

kimi təyin olunur. Sahəyə uyğun intensivlik vektoru

$$\vec{\mathcal{H}} = \text{rot} \vec{A} = - \left[\vec{\nabla} \left[\vec{\mu} \vec{\nabla} \frac{1}{r} \right] \right] = -\vec{\mu} \nabla^2 \frac{1}{r} + (\vec{\mu} \vec{\nabla}) \vec{\nabla} \frac{1}{r}. \quad (75.23)$$

Bunu (75.22)-də yazsaq,

$$\tilde{H}^{maq} = \frac{e}{mc} \left\{ (\vec{p} \left[\vec{\mu}_p \vec{\nabla} \frac{1}{r} \right]) + (\vec{\mu}_p \vec{\nabla}) (\vec{S} \vec{\nabla} \frac{1}{r}) - (\vec{S} \vec{\mu}_p) \vec{\nabla}^2 \frac{1}{r} \right\}$$

və ya

$$\tilde{H}^{maq} = \frac{e}{mc} \left\{ -\frac{\vec{\mu}_p \vec{L}}{r^3} + (\vec{\mu}_p \vec{\nabla}) (\vec{S} \vec{\nabla} \frac{1}{r}) - (\vec{S} \vec{\mu}_p) \vec{\nabla}^2 \frac{1}{r} \right\} \quad (75.24)$$

olar. Burada $\vec{L} = [\vec{r} \vec{p}]$ – elektronun orbital momenti operatorudur, $\vec{\mu}_p$ – protonun maqnit momentidir.

Atomun enerjisinə əlavəni birinci yaxınlaşmada hesablamaq istəsək, \tilde{H}^{maq} operatorunun bu qarşılıqlı təsirə nəzərən həyəcanlanmamış sistemin (40.40) dalğa funksiyalarına görə orta qiymətini götürmək lazımdır. Bu orta qiymət s səviyyəsi üçün hesablandıqda, (75.24) ifadəsində birinci hədd sıfıra bərabər olur. Digər tərəfdən nüvənin spin maqnit momenti operatoru $\vec{\mu}_p = \mu_p \vec{\sigma}'_p$ və elektronun maqnit momenti operatoru $\vec{\mu} = \mu_B \vec{\sigma}'$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$H^{maq} = \mu_p \mu_B \left\{ (\vec{\sigma}'_p \vec{\nabla}) (\vec{\sigma} \vec{\nabla} \frac{1}{r}) - (\vec{\sigma}'_p \vec{\sigma}') \nabla^2 \frac{1}{r} \right\} \quad (75.25)$$

olar, burada $\vec{\sigma}'$ – Pauli matrisaları, $\mu_p = \frac{e\hbar}{2M_p c}$ – nüvə, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ – Bor

maqnitonu, M_p – protonun kütləsidir.

\tilde{H}^{maq} -in orta qiymətindəki inteqral $\vec{\mu}_p$ və $\vec{\mu}_B$ momentlərinin nisbi yönündən asılı olur. Fəzada seçilmiş istiqamət olmadığına görə (xarici sahə yoxdur) (75.25)-dəki birinci həddi bu vektorların istiqamətləri üzrə orta qiyməti ilə əvəz etmək olar

$$(\vec{\sigma}'_p \vec{\nabla}) \left(\vec{\sigma}'_p \vec{\nabla} \frac{1}{r} \right) \approx \frac{1}{3} (\vec{\sigma}'_p \vec{\sigma}') \nabla^2 \frac{1}{r} \quad (75.26)$$

və nöqtəvi yükün sahəsində

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

olduğundan

$$\bar{H}^{maq} = -\frac{8\pi}{3} \mu_p \mu_B (\vec{\sigma}'_p \vec{\sigma}') \delta(\vec{r}). \quad (75.27)$$

Elektronun və protonun $\vec{\sigma}'$ operatorları vasitəsi ilə sistemin tam spin operatorunu qurmaq olar:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} (\vec{\sigma}'_p + \vec{\sigma}'), \quad (75.28)$$

onun kvadratının məxsusi qiyməti

$$S^2 = \hbar^2 S(S+1)$$

və ya (75.28)-dən

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\vec{\sigma}'_p{}^2 + \vec{\sigma}'^2 + 2\vec{\sigma}'_p \vec{\sigma}')$$

olar, burada $\vec{\sigma}'^2 = 3$ olduğundan

$$2S(S+1) = 3 + \vec{\sigma}'_p \vec{\sigma}'$$

və ya

$$\vec{\sigma}'_p \vec{\sigma}' = 2S(S+1) - 3 \quad (75.29)$$

olar. (75.29)-u (75.27)-də yazıb, \bar{H}^{maq} orta qiymətini hesablasaq,

$$\Delta E^{if.i.q.} = \int \Psi_{nlm}^* H^{maq} \Psi_{nlm} (d\vec{r}) = \frac{8\pi}{3} \mu_p \mu_B [2S(S+1) - 3] \int \Psi_{nlm}^* \Psi_{nlm} \delta(\vec{r}) (d\vec{r})$$

olar. Burada

$$\int \Psi_{nlm}^*(\vec{r}) \Psi_{nlm}(\vec{r}) \delta(\vec{r})(d\vec{r}) = |\Psi_{nlm}(0)|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a^3}$$

olduğundan,

$$\Delta E_{s=0}^{f.i.q.} = \frac{8}{3} \frac{\mu_p \mu_B}{n^3 a^3} [2S(S+1) - 3] \quad (75.30)$$

olar, n – baş kvant ədədi, $a = \frac{\hbar^2}{m_e c^2}$ – birinci Bor orbitinin radiusudur.

Burada iki halı fərqləndirmək olar:

a) Proton və elektronun spinləri antiparaleldir, onda $S=0$ və

$$\Delta E_{s=0}^{f.i.q.} = -8 \mu_p \mu_B \frac{1}{n^3 a^3} \quad (75.31)$$

b) Spinlər paraleldir, $S=1$

$$\Delta E_{s=1}^{f.i.q.} = \frac{8}{3} \cdot \frac{\mu_p \mu_B}{n^3 a^3}. \quad (75.32)$$

(75.31) ilə (75.32) ifadələri arasındakı fərq atomun s səviyyəsinin ifrat incə quruluşunu verir:

$$\omega^{f.i.q.} = \frac{\Delta E_{s=1}^{f.i.q.} - \Delta E_{s=0}^{f.i.q.}}{\hbar} = \frac{32}{3} \frac{\mu_p \mu_B}{\hbar n^3 a^3}. \quad (75.33)$$

Atomun nüvəyə ən yaxın $1s$ səviyyəsi ($n=1$) üçün nəzəri fərq

$$\Delta \omega^{\text{noz}} = 1417 \text{ MHz}$$

bərabərdir. Bu fərğin təcrübi qiyməti isə

$$\Delta \omega^{\text{oc}} = 1420 \text{ MHz}.$$

Müasir təcrübələr (75.33) daxil olan kəmiyyətləri olduqca dəqiq ölç-

məyə imkan verdiyinə görə təcrübə ilə nəzəriyyə arasındakı fərqi yalnız elektromaqnit sahəsinin vakuüm halının elektrona etdiyi təsir nəticəsində (bax: Lemb sürüşməsi) elektronun maqnit momentinin bir Bor maqnetonu μ_B -dən əlavə kiçik μ_{an} anomal maqnit momentinə də malik olması ilə izah etmək mümkün olmuşdur. Nəzəriyyəyə görə elektronun maqnit momenti

$$\mu_{el} = \mu_B + \mu_{an}$$

bərabərdir. μ_{an} isə $\mu_{an} = 0,00116\mu_B$ -yə bərabərdir. Bu halda nəzəriyyə ilə təcrübənin nəticələri dəqiq bir-birinin üzərinə düşür.

IX FƏSİL

MAQNİT VƏ ELEKTRİK SAHƏLƏRİNDƏ HƏRƏKƏT

§76. Elektronun bircins maqnit sahəsində hərəkəti

Sərbəst elektronun xarici maqnit sahəsində hərəkətini Pauli yaxınlaşmasında tədqiq etməklə kifayətlənəcəyik, çünki belə baxış onun əsas xüsusiyyətlərini aydınlaşdırmağa imkan verir. Hərəkətin tənliyini almaq üçün (61.1)-də (§61, Pauli tənliyi) $V(r) = 0, \varphi = 0$ götürmək lazımdır:

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}\sigma'_z \right\} \Psi = E\Psi \quad (76.1)$$

və ya

$$\frac{1}{2\mu} \left[\vec{p}^2 - \frac{2e}{c} \vec{A}\vec{p} - \frac{e}{c} (\vec{p}\vec{A}) + \frac{e^2 A^2}{c^2} \right] \Psi + \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}\sigma'_z \Psi = E\Psi \quad (76.1')$$

Burada $(\vec{p}\vec{A})$ – mötərizəsi \vec{p} operatorunun yalnız \vec{A} -ya təsir etdiyini göstərir.

Bircins maqnit sahəsinin z oxu boyunca yönəldiyini fərz etsək, $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0, \mathcal{H}_z = \mathcal{H}$ olar və \vec{A} vektor-potensial

$$A_x = -y\mathcal{H}, A_y = A_z = 0$$

kimi seçilə bilər. Onda $\vec{p}\vec{A} = -i\hbar \operatorname{div} \vec{A} = 0$ və (76.1) tənliyi

$$\left(\frac{\check{p}_y^2}{2\mu} + \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} y\check{p}_x + \frac{e^2\mathcal{H}^2}{2\mu c^2} y^2 + \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}\sigma'_z \right) \Psi = E\Psi \quad (76.2)$$

şəklinə düşər. Bu tənliyi, mərkəzi sahədəki hərəkəti təsvir edən (39.2') tənliyi kimi dəqiq həll etmək olar. (76.2) tənliyinin sol tərəfində dayanan

$$\check{H} = \frac{\check{p}_y^2}{2\mu} + \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} y\check{p}_x + \frac{e^2\mathcal{H}^2}{2\mu c^2} y^2 + \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}\sigma'_z \quad (76.3)$$

Hamilton operatoru $\check{p}_x, \check{p}_z, \sigma'_z$ operatorları ilə kommutasiya etdiyindən (76.2) tənliyinin həllini

$$\Psi(x, y, z, s_z) = \varphi(y) e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} S_\alpha(s_z) \quad (76.4)$$

şəklində axtarmaq olar, burada $S_\alpha(s_z) - \sigma'_z$ operatorunun, $e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)}$ isə \check{p}_x və \check{p}_z operatorlarının məxsusi funksiyalarıdır. (76.4)-ü (76.2) tənliyində yazsaq, $\varphi(y)$ funksiyası üçün

$$\left(\frac{\check{p}_y^2}{2\mu} + \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} y p_x + \frac{e^2\mathcal{H}^2}{2\mu c^2} y^2 \right) \varphi(y) = \left(E - \frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} \sigma'_z \right) \varphi(y) \quad (76.5)$$

tənliyi alınır. Burada

$$\frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} y p_x + \frac{e^2\mathcal{H}^2}{2\mu c^2} y^2 = \frac{\mu\omega_L^2}{2} (y + y_0)^2 \quad (76.6)$$

$$y_0 = \frac{c p_x}{e\mathcal{H}}, \omega_L = \frac{e\mathcal{H}}{\mu c}, y' = y + y_0, \varepsilon = E - \frac{p_z^2}{2\mu} + \frac{\hbar\omega_L}{2} \sigma'_z$$

əvəzlərini qəbul etdikdə, (76.5) tənliyi

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\varphi(y')}{dy'^2} + \frac{\mu\omega_L^2}{2} y'^2 \varphi(y') = \varepsilon\varphi(y') \quad (76.7)$$

şəklinə düşür, burada ω_L -tsiklik tezlik, $\sigma'_z = \pm 1$ spin operatorunun məxsusi qiymətidir ($\frac{\hbar}{2}$ vahidlərində). (76.7) tənliyi xətti ossilyatorun §35-də tədqiq edilən tənliyidir. Onun həllindən məxsusi funksiyalar və məxsusi qiymətlər üçün (bax: §35)

$$\varphi_n(y') = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega_L}{\hbar}} y' \quad (76.8)$$

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_L \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n=0,1, 2, \dots \quad (76.9)$$

ifadələri alınır, burada $H_n(\xi)$ ifadəsi (35.30) ilə verilmiş Ermit-Çebişov polinomudur. Beləliklə, spinə malik elektronun xarici bircins maqnit sahəsindəki hərəkətinin enerji səviyyələri n, p_x, σ'_z kimi üç kvant ədədindən asılı olur. Doğrudan da (76.6) və (76.9)-dan

$$E_{n,p_x,\sigma_z} = \hbar\omega_L \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_x^2}{2\mu} + \frac{\hbar\omega_L}{2} \sigma'_z \quad (76.10)$$

olur. (76.10)-dakı birinci hədd sahəyə perpendikulyar müstəvidə baş verən eninə (tsiklotron) hərəkət enerjisidir. O, $n=0,1,2,\dots$ yə uyğun olaraq diskret dəyişir və bu diskret enerji səviyyələri *Landau səviyyələri* adlanır. İkinci hədd elektronun sahə istiqamətində yerdəyişmə enerjisidir. p_x kvant ədədi $(-\infty, \infty)$ intervalında kəsilmədən dəyişdiyindən, uyğun enerji səviyyələri kəsilməz spektr təşkil edir. Nəhayət üçüncü hədd spin maqnit momentinin maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsir enerjisidir və $\sigma'_z = \pm 1$ -ə uyğun olaraq yalnız iki qiymət ala bilər.

(76.4) və (76.8)-dən (76.2) tənliyinin məxsusi funksiyaları üçün

$$\Psi_{n,p_x,p_z,\sigma_z}(x,y,z,s_z) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) S_\alpha(s_z) \quad (76.11)$$

ifadəsi alınır. (76.11) və (76.10)-dan görünür ki, bircins maqnit sahəsində hərəkət edən elektronun dalğa funksiyası dörd kvant ədədindən asılıdır, enerji səviyyələri isə yalnız üç kvant ədədi ilə təyin olunur. $E_{np_z\sigma_z}$ enerjisi p_x kvant ədədinin işarəsindən asılı deyil, lakin onun $(-\infty, \infty)$ intervalında aldığı müxtəlif qiymətlərin hamısı üçün eyni bir qiymətə malikdir, deməli, hər bir səviyyə sonsuz tərtib cırlaşmışdır. Digər tərəfdən, $E_{np_z\sigma_z}$ -in eninə

hərəkətə və spinin varlığına uyğun olan hissəsi $\hbar\omega_L\left(n + \frac{1}{2} + \frac{\sigma_z}{2}\right)$ -yə bərabərdir.

$\sigma_z=1$ -də n -nin $n-1$ -ə və $\sigma_z=-1$ -də n -in $n-1$ -ə uyğun səviyyələri eyni enerjiyə aid olur. Ona görə də hər bir enerji səviyyəsi hətta $p_x=0$, $p_z=0$ da belə iki qat cırlaşmış olur. $n=0$, $p_z=0$, $\sigma_z=-1$ -ə uyğun əsas səviyyə isə cırlaşmamışdır.

$E_{n p_x \sigma_z}$ enerji səviyyələri p_x və σ_z kvant ədədlərinə görə cırlaşmış olduğundan, yalnız (76.11) ilə verilmiş dalğa funksiyaları yox, onların p_x və σ_z üzrə superpozisiyası nəticəsində alınan

$$\Psi_{n p_x \sigma_z}(x, y, z) = \sum_{\sigma'_z} \int C(p_x) \Psi_{n p_x \sigma'_z} dp_x \quad (76.12)$$

dalğa funksiyalar çoxluğu da onun məxsusi funksiyalarıdır.

§77. Normal Zeyeman effekti

Bir optik elektrona malik atomların xarici maqnit sahəsindəki hərəkətinin kvant nəzəriyyəsi ilə tanış olaq. Belə hərəkəti ya (62.5) Kleyn-Qordon-Fok (KQF) və ya da (61.14) Pauli tənliyi ilə təsvir etmək olar.

Əvvəlcə KQF-tənliyinə müraciət edək. Sahənin bircins olduğunu qəbul etsək, dalğa funksiyanın zamandan asılılığı,

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i(E + \mu c^2)t}{\hbar}} \quad (77.1)$$

ifadəsi ilə verilir. (77.1)-i (62.5)-də yazsaq, $\Psi(\vec{r})$ üçün

$$\left\{ E - \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) - \frac{e}{\mu c} \vec{A} \vec{p} + \frac{1}{2\mu c^2} \left[(E - V)^2 - e^2 A^2 \right] \right\} \Psi = 0 \quad (77.2)$$

tənliyi alınar, burada $V = -e\phi$ və $\vec{p} \vec{A} = -i\hbar \text{div} \vec{A} = 0$ götürülmüşdür. Tənlikdəki $(E - V)^2$ həddi maqnit sahəsindən asılı deyil və kütlənin sürətdən relyativistik asılılığına, $e^2 A^2$ həddi isə zərrəciyin sahəyə perpendikulyar müstəvidə tsiklik hərəkətinə gətirir (bax: §76). Hər iki hədd enerjiyə kiçik relyativistik əlavə verir. Atomun enerji səviyyələrinin sadəcə sürüşməsinə gətirən bu əlavələri baxılan halda nəzərə almamaq olar. Onda KQF tənliyi maqnit sahəsindəki hərəkət üçün yazılmış Şredinger tənliyi üzərinə düşür:

$$E\Psi = \left(\frac{\tilde{p}^2}{2\mu} + V - \frac{e}{\mu c} \tilde{A}\tilde{p} \right) \Psi. \quad (77.3)$$

z oxunu maqnit sahəsi istiqamətində yönəldib, bircins maqnit sahəsi üçün doğru olan

$$\tilde{A} = \frac{1}{2} [\tilde{\mathcal{H}}\tilde{r}]$$

ifadəsindən

$$\begin{aligned} A_x &= -\frac{1}{2} y \tilde{\mathcal{H}}_z = -\frac{1}{2} y \tilde{\mathcal{H}}, \\ A_y &= \frac{1}{2} x \tilde{\mathcal{H}}_z = \frac{1}{2} x \tilde{\mathcal{H}}, \\ A_z &= 0 \end{aligned} \quad (77.3')$$

olduğundan

$$\frac{e}{\mu c} \tilde{A}\tilde{p} = \frac{e\tilde{\mathcal{H}}}{2\mu c} (x\tilde{p}_y - y\tilde{p}_x) = \frac{e\tilde{\mathcal{H}}}{2\mu c} \tilde{L}_z \quad (77.3'')$$

alınar. Onda (77.3) tənliyi

$$E\Psi = \left(\frac{\tilde{p}^2}{2\mu} + V(r) - \frac{e\tilde{\mathcal{H}}}{2\mu c} \tilde{L}_z \right) \Psi \quad (77.4)$$

şəklə düşər.

$$\tilde{H}_0 = \frac{\tilde{p}^2}{2\mu} + V(r)$$

xarici sahə olmadıqda atomun Hamilton operatorunun məxsusi funksiyaları §40-dan bizə məlumdur:

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}. \quad (77.5)$$

\tilde{H}_0 operatoru orbital hərəkət miqdarı momentinin z oxu istiqamətindəki

proyeksiyasına uyğun \tilde{L}_z operatoru ilə kommutasiya etdiyinə görə onlar eyni məxsusi funksiyalara malikdir:

$$\tilde{L}_z \Psi_{nlm} = \hbar m \Psi_{nlm}. \quad (77.6)$$

(77.5) və (77.6)-dan enerjinin məxsusi qiymətlər spektri üçün

$$E_{nlm} = E_{nl}^0 + \frac{e\mathcal{H}}{2\mu} \hbar m \quad (77.7)$$

ifadəsi alınar. Belə atomun şüalanma tezliyi:

$$\omega_{n'l'm',nlm} = \frac{E_{n'l'm'} - E_{nlm}}{\hbar} = \frac{E_{n'l'}^0 - E_{nl}^0}{\hbar} + O_L(m' - m),$$

yaxud

$$\omega = \omega_o + O_L \Delta m$$

olar. Burada ω -sahə olduğu, ω_o -sahə olmadığı halda şüalanma tezlikləri,

$$O_L = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} - Larmor \text{ tezliyidir.}$$

Nisbətən böyük intensivliyə malik dipol keçidləri üçün $\Delta m = 0, \pm 1$ olduğundan, maqnit sahəsinin təsiri altında atomun hər bir spektr xətti

$$\omega_1 = \omega_o, \omega_2 = \omega_o + O_L, \omega_3 = \omega_o - O_L$$

tezlikli üç xəttə parçalanacaqdır. Maqnit sahəsində atomun spektr xətlərinin belə üç xəttə parçalanmasına *normal Zeyeman effekti* deyilir.

İndi də Zeyeman effektini elektronun spinini nəzərə alan (61.14) Pauli tənliyi vasitəsilə təhlil edək. Bu halda, yəqin ki, (77.4) tənliyinə spin maqnit momentinin xarici maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsirini nəzərə alan

$$-\vec{M}_s \vec{\mathcal{H}} = \frac{e}{\mu c} \vec{S} \vec{\mathcal{H}} \text{ həddi əlavə olunmalıdır. } \vec{\mathcal{H}} \parallel z \text{ olduqda (77.4) tənliyi}$$

$$E\Psi = \left(\tilde{H}_o - \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} (\tilde{L}_z + 2S_z) \right) \Psi \quad (77.4')$$

şəklinə düşər. Burada $\tilde{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma'_z$ -spin operatoru, $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ - Pauli funksiyasıdır. S_z -in Ψ -yə təsiri

$$S_z\Psi = \frac{\hbar}{2}\sigma'_z\Psi = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar\frac{1}{2}\begin{pmatrix} +\Psi_1 \\ -\Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m_s\Psi$$

olduğundan, (77.4') tənliyi

$$E\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left(\tilde{H}_0 - \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}(\tilde{L}_z + 2\hbar m_s) \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

və ya

$$E\Psi_1 = \left(\tilde{H}_0 - \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}(L_z + \hbar) \right) \Psi_1, \quad (77.8)$$

$$E\Psi_2 = \left(\tilde{H}_0 - \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}(L_z - \hbar) \right) \Psi_2$$

sistemi şəklinə düşər, burada $m_s = \pm\frac{1}{2}$ -spin maqnit kvant ədədidir.

(77.8) sisteminə daxil olan \tilde{H}_0 , hərəkət miqdarı momenti kvadratının \tilde{L}^2 operatoru, mexaniki və spin momentlərinin z oxu üzrə proyeksiya operatorları \tilde{L}_z və \tilde{S}_z qarşılıqlı kommutasiya etdiyindən, onlar eyni məxsusi funksiyalara malikdir. Deməli, maqnit sahəsi olmadığı hala uyğun \tilde{H}_0 operatorunun məxsusi funksiyaları olan

$$\Psi_1 = \Psi_{nlm} S_{\alpha=\frac{1}{2}}(s_z) = \begin{pmatrix} \Psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (77.9)$$

$$\Psi_2 = \Psi_{nlm} S_{\alpha=-\frac{1}{2}}(s_z) = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_{nlm} \end{pmatrix}$$

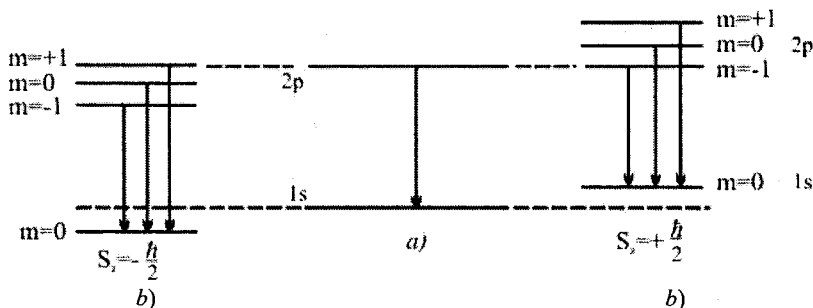
funksiyaları (77.8) tənliklərinin həlləri götürülə bilər, burada da Ψ_{nlm} funksiyası (77.5) ilə verilir. Lakin $\tilde{L}_z \Psi_{nlm} = \hbar m \Psi_{nlm}$ olduğundan onlar E_{nl}° -a yox.

$$E'_{nlm} = E_{nl}^{\circ} - \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \hbar(m+1), \quad (77.10)$$

$$E''_{nlm} = E_{nl}^{\circ} - \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \hbar(m-1) \quad (77.11)$$

məxsusi qiymətlərinə uyğun olar.

Buradan görünür ki, spinin nəzərə alınması atomun hər bir səviyyəsinin iki səviyyəyə parçalanmasına səbəb olur. Zeyeman effektinin xarakterini isə dəyişmiş, çünki, spin maqnit momentinin maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsiri spinin istiqamətinin dəyişməsinə gətirmir. Bu səbəbdən keçidlər spinin proyeksiyasının ya müsbət və ya da mənfi işarəsinə uyğun səviyyələr arasında baş verir. Məsələn, $n=1, l=0$ olan $1s$ səviyyəsi üçün $m=0$ olduğundan o, $E_{100} = E_{10}^{\circ} \pm \hbar O_L$ ($O_L = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}$ —Larmor tezliyidir) kimi iki səviyyəyə, $n=2, l=1, m=0, 1, -1$ olan $2p$ səviyyəsi isə $E_{210} = E_{20}^{\circ} \pm \hbar O_L$, $E'_{211} = E_{21}^{\circ} - 2\hbar O_L$, $E''_{211} = E_{21}^{\circ}$, $E'_{21-1} = E_{21}^{\circ}$ və $E''_{21-1} = E_{21}^{\circ} + 2\hbar O_L$ kimi altı səviyyəyə parçalanır. Lakin onlardan $m=1, s_z = -\hbar/2$ -yə uyğun E'_{211} və $m=-1, s_z = \hbar/2$ -yə uyğun E'_{21-1} səviyyələri bir-birinin üzərinə düşür. Beləliklə, $n=2, l=1$ -ə uyğun $2p$ səviyyəsi maqnit sahəsində beş müxtəlif səviyyəyə parçalanır (bax: şəkil 35), yəni onun cırlaşması qismən aradan qaldırılır.



Şəkil 35. Normal Zeyeman effektində $1s$ və $2p$ səviyyələrinin parçalanması (spin nəzərə alınmaqla): a) sahəsiz, b) sahədə.

(77.10) və ya (77.11)-dən keçidlərin tezliyi üçün

$$\omega_{n'l'm',nlm} = \frac{E_{n'l'm'} - E_{nlm}}{\hbar} = \frac{E_{n'l'}^o - E_{nl}^o}{\hbar} + O_L(m' - m) \quad (77.12)$$

$$\omega = \omega_o + O_L \Delta m \quad (77.13)$$

alınır, burada ω –sahə olan, ω_o –isə sahə olmayan haldakı keçid tezlikləridir.

Atomun dipol keçidləri üçün alınmış seçmə qaydalarına görə (bax: §42) $\Delta m = 0, \pm 1$ kimi yalnız üç müxtəlif qiymət alır. Buna uyğun olaraq baxılan atomların hər bir spektr xətti bircins maqnit sahəsində $\omega_1 = \omega_o$ ($\Delta m = 0$), $\omega_2 = \omega_o + O_L(\Delta m = 1)$, $\omega_3 = \omega_o - O_L(\Delta m = -1)$ tezliklərinə uyğun üç xəttə parçalanır (şəkil 35). Beləliklə, Şredinger, Pauli və Kleyn–Qordon–Fok nəzəriyyələri Zeyeman effekti üçün eyni nəticəyə gətirir.

Maqnit kvant ədədi dəyişməyən ($\Delta m = 0$) keçidlərə uyğun spektral xətt sahə istiqamətində polyarlaşdığından (şüalanmanın rəqsi z oxu boyunca baş verir), atom həmin istiqamətdə şüalanmır. Δm -in ± 1 dəyişməsinə uyğun xətlər isə sahəyə perpendikulyar olaraq dairəvi və ya xy müstəvisi tərəfdən baxdıqda xətti polyarlaşmış olur. Ona görə də müşahidə sahənin yayılma istiqamətində aparıldıqda iki xətt, ona perpendikulyar istiqamətdə aparıldıqda isə üç xətt müşahidə olunur.

Kvant nəzəriyyəsində alınan bu nəticə tamamilə klassik nəticənin üzərinə düşür.

Doğrudan da, klassik nəzəriyyədə Zeyeman effekti hadisəsi elektron orbitinin xarici maqnit sahəsində O_L Larmor tezliyi ilə presesiya etməsi nəticəsi kimi izah edilir. (77.13) düsturunda isə ω keçid tezliyi \hbar Plank sabitindən asılı deyil. $\hbar = 0$ olanda o dəyişmir. Buradan çıxır ki, klassik və kvant nəzəriyyələri eyni nəticəyə gətirməlidir. Bu təcrübədə tam təsdiq olunur.

Qeyd edək ki, normal Zeyeman effekti anomal Zeyeman effektinə (bax: §78) nisbətən daha seyrək müşahidə olunur. Əsasən a) atomun tam spin momenti sıfır; b) maqnit sahəsi güclü* olan iki halda maqnit sahəsinin atom təsiri normal Zeyeman effektinə gətirir. Bütün başqa hallarda isə bu təsir anomal Zeyeman effektinə səbəb olur. Bu axıncının nəzəriyyəsi isə yalnız Dirak nəzəriyyəsi əsasında qurula bilər, belə ki, anomal Zeyeman effekti elektronun (atomun) spinə malik olması nəticəsidir.

* «Güclü» və «zəif» maqnit sahəsi anlayışları nisbi mənə daşıyır. Bu anlayışlar §78-də dəqiqləşdiriləcəkdir.

§78. Anomal Zeyeman effekti

1. §77-də gördük ki, Şredinger, Pauli və hətta Kleyn–Qordon–Fok nəzəriyyələri atomun enerji səviyyələrinin xarici maqnit sahəsində yalnız üç səviyyəyə parçalanmasına gətirir, yəni onlar yalnız normal Zeyeman effektini izah edə bilər. Lakin maqnit sahəsinin atom sistemlərinin enerji spektrinə təsiri elektronun spinə malik olmasından və bunun nəticəsində meydana çıxan spin-orbital qarşılıqlı təsirin mövcudluğundan kəskin şəkildə asılıdır. Bu amillərin təsiri «zəif» sahədə daha kəskin özünü büruzə verir. Buna görə də, relyativistik və spin effektlərini özündə cəmləşdirən Dirak nəzəriyyəsi vasitəsilə Zeyeman effektinin tam nəzəriyyəsini qurmaq mümkün olmuşdur.

Zeyeman effektinin nəzəriyyəsinə keçməzdən əvvəl «güclü» və «zəif» sahə anlayışını dəqiqləşdirək.

Dirak nəzəriyyəsi enerji səviyyələrinin multiplet–incə quruluşunu izah etməyə imkan verir. n baş və l orbital kvant ədədlərinin verilmiş qiymətlərində atomun hər bir enerji səviyyəsi (s -səviyyəsindən başqa) köməkçi kvant ədədi j -nin qiymətləri ilə fərqlənən iki səviyyədən ibarət olur. Bu dubletin enerji fərqi

$$\Delta E_{jj} = E_{nj'} - E_{nj} \quad (78.1)$$

olur. Maqnit sahəsi isə, §77-də gördüyümüz kimi, atomun enerji səviyyələrinin əlavə parçalanmasına səbəb olur. Bu parçalanmada qonşu iki səviyyənin enerjiləri arasındakı fərq $\frac{\hbar e \mathcal{H}}{2\mu c}$ -yə bərabərdir.

Xarici maqnit sahəsində olan atom üçün

$$\frac{\hbar e \mathcal{H}}{2\mu c} \gg E_{nj'} - E_{nj} \quad (78.2)$$

şərti ödənilirsə, belə sahəyə «güclü»,

$$\frac{\hbar e \mathcal{H}}{2\mu c} \ll E_{nj'} - E_{nj} \quad (78.3)$$

şərti ödənildikdə isə «zəif» sahə deyilir. Qeyd edək ki, «güclü» və «zəif» sahə anlayışları nisbi anlayışlardır. Bir növ atom üçün «güclü» («zəif») sahə, digəri üçün «zəif» («güclü») ola bilər.

Güclü sahə halında Zeyeman effekti üçün Dirak nəzəriyyəsində alınan

nəticə §77-də alınan nəticənin üzərinə düşür. Ona görə də əvvəlcə bu effekt üçün mühüm olan «zəif» sahə halı üzərində dayanaq. Bu halda Dirak tənliyinin spin effektlərini nəzərə almağa imkan verən zəif-relyativistik yaxınlaşma ilə kifayətlənmək olar. Bu tənlik (74.18) və (74.19) əsasən

$$\left(E - e\varphi - \frac{\tilde{p}^2}{2\mu} \right) \Phi = (H^{rel} + H^{s.o.} + H^k + H^{maq}) \Phi, \quad (78.4)$$

burada

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = R_{nl} Y_{lm}^J. \quad (78.5)$$

Y_{lm}^J – (72.24) və ya (72.25) ilə verilmiş sferik spinor, H^{rel} , $H^{s.o.}$, H^k və H^{maq} ifadələri (74.22)–(74.25) ilə verilmiş operatorlardır.

Relyativistik elektronun Kulon sahəsindəki hərəkəti tədqiq edildikdə relyativistik, spin-orbital və kontakt qarşılıqlı təsirlərin enerjiləri, həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasında hesablanmış və onların cəmi üçün (75.16) ifadəsi alınmışdır:

$$E_{nj} = E^{rel} + E^{s.o.} + E^k = -R\hbar \frac{\alpha^2 Z^4}{n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right). \quad (78.6)$$

(78.4) tənliyindəki

$$\tilde{H}^{maq} = -\frac{e}{\mu c} \vec{A} \vec{p} + \frac{e\hbar}{2\mu c} \vec{\sigma} \vec{\mathcal{H}} \quad (78.7)$$

həddi isə atomun maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsir enerji operatorudur. Bu qarşılıqlı təsirin tam enerjiyə verdiyi əlavə də həmin yaxınlaşmada hesablanıla bilər:

$$E^{maq} = \int \Phi^+ \tilde{H}^{maq} \Phi (d\vec{r}). \quad (78.8)$$

Φ -dalğa funksiyaları sferik koordinat sistemində ifadə olunduğundan \tilde{H}^{maq} operatorunu da həmin sistemdə yazaq. Bunun üçün z oxunu maqnit sahəsi boyunca yönəldək. Onda $\mathcal{H}_z = \mathcal{H}$, $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0$ olar. Maqnit sahəsi

üçün \vec{A} vektor-potensialın (77.3') ifadəsindən istifadə etdikdə

$$\vec{\mathcal{H}}^{maq} = \frac{eH}{2\mu c} (\vec{L}_z + 2\vec{S}_z) \quad (78.9)$$

olur (bax: (77.3'')), burada $\vec{L}_z = x\vec{p}_y - y\vec{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ və $S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma'_z$ -dir.

(78.9)-u və Φ dalğa funksiyasının (78.5) ilə verilmiş ifadəsini (78.8)-də yazsaq,

$$E^{maq} = \frac{e}{2\mu c} \mathcal{H} \int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr \int Y_{lm}^{+j} (\vec{L}_z + \hbar \sigma'_z) Y_{lm}^j d\Omega \quad (78.10)$$

$\vec{L}_z + \hbar \sigma'_z$ operatorunun $Y_{lm}^{j=l \pm \frac{1}{2}}$ funksiyalarına təsiri

$$(\vec{L}_z + \hbar \sigma'_z) Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}} = \hbar \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} m Y_l^{m-1} \\ -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} (m-1) Y_l^m \end{pmatrix}$$

və

$$(\vec{L}_z + \hbar \sigma'_z) Y_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}} = \hbar \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} m Y_l^{m-1} \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} (m-1) Y_l^m \end{pmatrix}$$

hesablanandan sonra R_{nl} radial və Y_{lm}^j sferik spinor üçün

$$\int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr = 1; \int Y_{lm}^{+j} Y_{lm}^j d\Omega = 1$$

normalanma şərtləri ödənildiyini nəzərə alsaq, (78.10)-dan $j = l + \frac{1}{2}$

halında

$$E^{maq} = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} \frac{1}{2l+1} [m(l+m) + (m-1)(l-m+1)] = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{2(l+1)}{2l+1};$$

$j = l - \frac{1}{2}$ halında isə

$$E^{maq} = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} \frac{1}{2l+1} [m(l-m+1) + (m-1)(l+m)] = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} \left(m - \frac{1}{2}\right) \frac{2l}{2l+1}$$

olur. §72-də daxil edilən $m_j = m - \frac{1}{2}$ kvant ədədindən istifadə etsək, hər iki ifadəni

$$E_{jm}^{maq} = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \hbar g m_j = \hbar O_L g m_j \quad (78.11)$$

şəklində yazmaq olar, burada $O_L = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}$ -Larmor tezliyi

$$g = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}}. \quad (78.12)$$

Lande vuruğudur. Bir optik elektrona malik atomlar üçün Lande vuruğunun ümumi şəkli

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + l_s(l_s+1)}{2j(j+1)} \quad (78.13)$$

şəklindədir. Burada $l_s = \frac{1}{2}$ -spin kvant ədədidir ($S^2 = \hbar^2 l_s(l_s+1)$), g üçün (78.12) və (78.13) ifadələri isə tam ekvivalentdir.

Beləliklə, maqnit sahəsində bir optik elektronlu atomların enerji spektri

$$E_{n_l m_j} = E_{n_l}^o + E_{n_j} + E_{j m}^{maq} = E_{n_l} + \hbar g O_L m_j. \quad (78.14)$$

Burada maqnit qarşılıqlı təsir enerjisi üçün alınmış (78.11) ifadəsi ilə normal Zeyeman effektində alınmış uyğun (77.7,8) ifadələrinin müqayisəsindən görünür ki, (78.11)-ə əlavə olaraq Lande vuruğu daxil olur və m kvant ədədi əvəzində spinin nəzərə alınması nəticəsi olan m_j kvant ədədi durur.

(78.12) və ya (78.13) ifadələrindən atomun müxtəlif halları üçün g -nin qiyməti müxtəlif olur. Məsələn, $l = 0, j = \frac{1}{2}$ -yə uyğun $s_{1/2}$ halında $g = 2$;

$$p_{1/2} (l = 1, j = 1/2) \text{ halında } g = \frac{2}{3}; \quad p_{3/2} (l = 1, j = 3/2) \text{ halında } g = \frac{4}{3} \quad \text{və}$$

i. a. m_j kvant ədədinə gəldikdə o, j -nin verilmiş qiymətində $-j$ -dan $+j$ -ya qədər $2j+1$ müxtəlif qiymət alır. Relyativistik kvant nəzəriyyəsində hidrogen atomunun hər bir enerji səviyyəsinin enerjisi $E_{n_l j}$ yalnız üç kvant ədədindən asılıdır. Deməli, hər bir səviyyə m_j -ya və yaxud tam hərəkət miqdarı momentinin fəzada yönəlmə istiqamətlərinə görə $2j+1$ tərtibdən cırılmış olur (bax: §72). Maqnit sahəsi isə bu cırılmanı tam ortadan götürür.

Maqnit sahəsində parçalanmış enerji səviyyələri arasında mümkün olan keçidlərə uyğun şüalanma tezlikləri

$$\omega = \frac{E_{n_l' j'} - E_{n_l j}}{\hbar} + O_L (m_j g_j - m_{j'} g_{j'}) \quad (78.15)$$

yaxud

$$\omega = \omega_o + O_L (m_j g_j - m_{j'} g_{j'}) \quad (78.16)$$

ifadəsi ilə verilir, burada m_j və g_j -başlanğıc, $m_{j'}$, $g_{j'}$ isə son halın maqnit kvant ədədi və Lande vuruğu, ω_o - sahə olmadıqdakı şüalanma tezliyidir.

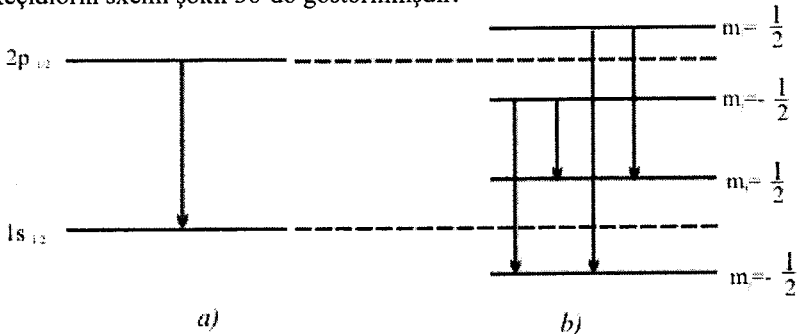
§48-də ən intensivli dipol şüalanması üçün seçmə qaydaları alınmışdı. Onlara görə iki səviyyə arasında keçidin baş verməsi üçün l, j, m_j kvant ədədləri

$$\Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1, \Delta m_j = 0, \pm 1$$

şərtlərini ödəməlidir. Normal Zeyeman effektində olduğu kimi, $\Delta m_j = 0$ şərti ödənilən keçidlərə uyğun şüalanma sahə istiqamətində xətti,

$\Delta m_j = \pm 1$ -ə uyğun şüalanma işə sahəyə perpendikulyar istiqamətdə dairəvi polyarlaşmış olur.

Zəif maqnit sahəsində $2p$ və $1s$ səviyyələri arasında baş verə biləcək keçidlərin sxemi şəkil 36-də göstərilmişdir.



Şəkil 36. Anomal Zeyeman effektində $1s_{1/2}$ və $2p_{1/2}$ səviyyələrinin parçalanması: a) sahəsiz, b) sahədə.

Sxemdən görünür ki, sahə olmadığı halda spektrdə iki xətt müşahidə olunmalıdır (şəkil 36,a). Belə atom sistemi sahəyə daxil edildikdə isə

$2p_{1/2}-1s_{1/2}$ keçidində bir xətt əvəzində $\omega_1 = \omega_0 + \frac{4}{3}O_L$, $\omega_2 = \omega_0 + \frac{2}{3}O_L$,

$\omega_3 = \omega_0 - \frac{2}{3}O_L$, $\omega_4 = \omega_0 - \frac{4}{3}O_L$ tezlikli dörd; $2p_{3/2}-1s_{1/2}$ keçidində isə

$\omega_1 = \omega'_0 + \frac{1}{3}O_L$, $\omega_2 = \omega'_0 + \frac{5}{3}O_L$, $\omega_3 = \omega'_0 + \frac{7}{3}O_L$, $\omega_4 = \omega'_0 - \frac{1}{3}O_L$,

$\omega_5 = \omega'_0 - \frac{5}{3}O_L$, $\omega_6 = \omega'_0 - \frac{7}{3}O_L$ tezlikli altı xətt müşahidə olunur (şəkil

36, b).

Bütün yuxarıda dediklərimiz hidrogen atomuna və bir optik elektrona malik atomlara aiddir.

Xarici təbəqədə birdən çox elektronu olan atomlar üçün isə iki halı bir-birindən fərqləndirmək lazımdır.

Birinci yaxınlaşmada fərz olunur ki, belə atomların spin-orbital qarşılıqlı təsir operatoru, bir elektronlu atomlarda olduğu kimi, $\vec{L}\vec{S}$ hasilii ilə mütənəsibdir. Burada \vec{L} və \vec{S} atomun tam orbital və tam spin momentləri operatorlarıdır.

a) Atomun elektronları arasındakı elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi

spin-orbital qarşılıqlı təsir enerjisindən kiçikdirsə, birincini nəzərə almaq olar. Bu halda spin ilə orbita arasındakı rabitə qırılır və $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ tam moment özünü bütöv bir kəmiyyət kimi aparır. \vec{J} operatoru $\vec{H}_o + A\vec{L}\vec{S}$ operatoru ilə kommutasiya etdiyindən, o hərəkət inteqralı olur və atomun halları L, J, M_J kvant ədədlər çoxluğu ilə təyin olunur. Baxılan halda atomun halları J kvant ədədi ilə fərqlənir.

Elektrostatik qarşılıqlı təsir nəzərə alındıqda j kvant ədədi ilə fərqlənən hallar parçalanır. Belə rabitəyə jj -rabitə deyilir.

b) Spin-orbital qarşılıqlı təsir enerjisi elektronlar arasındakı elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisindən kiçikdirsə, spin ilə orbit arasındakı rabitə qırılır. Bu halda \vec{L} tam orbital və \vec{S} tam spin momentləri bir-birindən asılı olmur və hər ikisi ayrılıqda hərəkət inteqralı olur. Spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda elektrostatik təsir L -in müxtəlif qiymətlərinə uyğun səviyyələrin parçalanmasına gətirir. Ona görə də atomun halları ya L, S, M_L, M_S və ya da L, S, J, M_J kvant ədədlər çoxluğu ilə təyin olunur. Elektronların ayrılıqda orbital momentlərinin cəmi olan tam orbital moment

\vec{L} -ə, ayrılıqda spin momentlərinin cəmi olan tam spin momenti \vec{S} -ə gətirildiyindən bu rabitəyə Ressel-Saunders rabitəsi və ya LS rabitə deyilir. Bu rabitədə atomun səviyyəsi $^{2s+1}X_J$ kimi işarə olunur. X hərfi L -in müxtəlif qiymətlərinə uyğun S, P, D, F, \dots və i.a. hərflərini göstərir.

Ressel-Saunders yaxınlaşmasında Lande vuruğu birelektronlu atomlarda olduğu kimi

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + L_s(L_s+1)}{2J(J+1)} \quad (78.17)$$

şəklində seçilir. Burada

$$J = |L - S|, (L - S + 1), \dots, (L + S - 1), (L + S)$$

qiymətlərini alır.

Bu bərabərlik bir optik elektrona malik atomlar üçün dəqiq, çox elektronlu atomlar üçün isə təxmini ödənilir.

§83-də görəcəyimiz kimi, ikielektronlu helium atomu tam spini $S=0$ -a uyğun sinqlet və $S=1$ -ə uyğun triplet hallarda ola bilər. Birinci qrup hallar $^1X_{J=L}$, ikinci qrup hallar isə 3X_J kimi göstərilir. $^1X_{J=L}$ hallarda olan parahelium üçün maqnit sahəsinin istənilən intensivliyində tam orbital momen-

tin fəzadakı müxtəlif yönü ilə təyin olunan yalnız normal Zeyeman effekti müşahidə olunur.

§79. Paşen–Bak effekti

Fərz edək ki, atom sisteminə (78.2) şərtinin ödənilməsinə təmin edən güclü maqnit sahə təsir edir. (78.2)-dən görünür ki, bu halda parçalanmış iki enerji səviyyəsi arasındakı məsafə j kvant ədədinin dəyişməsi hesabına yaranan məsafədən xeyli böyük olur. Digər tərəfdən maqnit sahəsi spinlə orbit arasındakı rabitəni qırır və spin maqnit momenti ilə orbital maqnit momenti maqnit sahəsi ətrafında bir-birindən asılı olmayaraq presesiya edir. Beləliklə, (78.4) tənliyində H^{maq} həddinə nisbətən j -ya görə parçalanmaya gətirən H^{rel} , $H^{s.o.}$ və H^k hədlərini nəzərə almamaq olar. Onda (78.4) tənliyi (78.9)-a əsasən

$$E\Phi = \left(\check{H}_o + \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} (\check{L}_z + 2\check{S}_z) \right) \Phi \quad (79.1)$$

şəklinə düşür. (79.1) tənliyi isə Pauli nəzəriyyəsi əsasında normal Zeyeman effektini təhlil etdiyimiz (77.4') tənliyi üzərinə düşür və hər bir spektr xəttinin üç xəttə parçalanmasına səbəb olur. Buna Paşen–Bak effekti deyilir və onun şərhini artıq §77-də verilmişdir.

§80. Lemb sürüşməsi

Elektromaqnit sahəsinin kvantlanması haşr olunmuş §50-də gördük ki, sahənin bütün mümkün olan enerji səviyyələrində zərrəciklərin (fotonların) sayı $N_{kk} = 0$ olarsa, sahənin vakuumu adlanan bu halın enerjisi sıfırdan fərqli qalır və kifayət qədər böyük qiymət alır. Bu böyük enerji sahənin sıfırıncı rəqslərinin, yaxud vakuum halında elektromaqnit sahəsinin flüktuasiyalarının enerjisi kimi başa düşülür. Vakuum halında sahənin flüktuasiyaları dedikdə enerjinin fəzanın hər hansı bir nöqtəsində baş verən flüktuasiyası hesabına fotonun yaranıb, digər nöqtəsində udulması başa düşülür. Fotonların belə buraxılıb udulması prosesində maddələrin atomundakı elektronlar da iştirak edə bilər və bu da sahənin vakuumu ilə elektronlar arasında qarşılıqlı təsirin meydana çıxmasına səbəb olur.

Beləliklə, atomun elektronu yalnız onun nüvəsi ilə yox, elektromaqnit sahəsinin sıfırıncı (vakuum) rəqsləri ilə də qarşılıqlı təsirdə olur və bu axırıncısı elektronun orbitdə «titrəməsinə» gətirir. Bunun nəticəsində elektronun radius-vektoru (koordinatları) flüktuasiyaya uğrayır və o, orbitin

yaxın ətrafındakı fəzada «yayılır», yəni baxılan anda elektron yalnız orbitin üzərindəki nöqtələrdən birində yox, onun yaxın ətrafındakı nöqtələrdə də müşahidə oluna bilər. Bu səbəbdən elektronun nüvə ilə qarşılıqlı təsiri zəifləyir və stasionar halların enerji səviyyələri yuxarıya doğru sürüşür. Bu sürüşməyə *Lemb sürüşməsi* deyilir.

Lemb sürüşməsinin tam nəzəriyyəsi kvant elektrodinamikasının köməyi ilə qurula bilər. Buna bizim imkanımız yoxdur, burada hadisənin mahiyyətini anlamağa imkan verən, onun Velton tərəfindən təklif olunmuş yarım klassik qeyri-relyativistik nəzəriyyəsinin şərhini ilə kifayətlənəcəyik.

Fərz edək ki, vakuumin sıfırıncı rəqslərinə uyğun elektromaqnit sahəsi \vec{E}_{vak} və \vec{H}_{vak} intensivlik vektorları ilə səciyyələnir. Bu sahənin elektrona təsiri nəticəsində onun \vec{r} radius-vektoru $\delta\vec{r}$ qədər artım alır. Bu hərəkətin Nyuton tənliyi

$$m\ddot{\delta\vec{r}} = e\vec{E}_{\text{vak}} + \frac{e}{c} \left[\dot{\delta\vec{r}} \vec{H}_{\text{vak}} \right] \quad (80.1)$$

olar, burada m – klassik elektron kütləsi, e – onun elektrik yüküdür. Maqnit sahəsinin təsiri elektrik sahəsinin təsirinə nisbətən $\frac{\dot{\delta\vec{r}}}{c} = \frac{\vec{v}}{c}$ tərtibində kiçik kəmiyyət olduğundan, onu nəzərə almamaq olar. Onda hərəkət tənliyi

$$m\ddot{\delta\vec{r}} = e\vec{E}_{\text{vak}} \quad (80.2)$$

olur.

Vakuum halının $\vec{E}_{\text{vak}}(\vec{r}, t)$ intensivlik vektorunu Furiye sırasına ayırıq:

$$\vec{E}_{\text{vak}} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \vec{E}_{\vec{k}, \lambda} e^{-i(\omega_{k\lambda}t - \vec{k}\vec{r})}, \quad (80.3)$$

burada \vec{k} – dalğa vektoru ($\omega = ck$), $\lambda = 1, 2$ – sahənin iki mümkün polyarlaşma istiqamətini göstərən vuruqdur. \vec{E}_{vak} -un fiziki mahiyyətə malik həqiqi hissəsini saxlayıb, birinci yaxınlaşmada onun koordinatlardan asılılığını nəzərə almasaq ($kr \ll 1$ qəbul etməklə)

$$\vec{E}_{\text{vak}} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \vec{E}_{\vec{k}, \lambda} \cos \omega_{k\lambda} t \quad (80.4)$$

olar. (80.4)-ü (80.2)-də yerinə yazandan sonra ondan t -yə görə integral götürüldükdə

$$\bar{\mathcal{E}} = -\frac{e}{m} \sum_{\vec{k}, \lambda} \bar{\mathcal{E}}_{\vec{k}, \lambda} \frac{\cos \omega_{k\lambda} t}{\omega_{k\lambda}^2} \quad (80.5)$$

olur. Baxılan halda elektronun \vec{r} radius-vektorunun dəyişməsi flüktativ (təsadüfi) xarakter daşdığına görə onun orta qiyməti $\overline{\delta \vec{r}} = 0$ olar. (80.5) ifadəsində bu şərt $\cos \omega t$ -nin zamana görə orta qiymətinin $\overline{\cos \omega t} = 0$ olması hesabına ödənilir. Onda adətən belə kəmiyyətlərin kvadratik orta qiyməti hesablanır:

$$\overline{(\delta \vec{r})^2} = \frac{e^2}{m^2} \sum_{\vec{k}\vec{k}', \lambda\lambda'} \bar{\mathcal{E}}_{\vec{k}\vec{k}', \lambda\lambda'} \overline{\frac{\cos \omega_{k'\lambda'} t \cos \omega_{k\lambda} t}{\omega_{k\lambda}^4}}.$$

Burada

$$\overline{\cos \omega_{k'\lambda'} t \cos \omega_{k\lambda} t} = \frac{1}{2} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}$$

olduğundan

$$\overline{(\delta \vec{r})^2} = \frac{e^2}{m^2} \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\mathcal{E}_{k\lambda}^2}{\omega_{k\lambda}^4} \quad (80.6)$$

alınır.

§50-də elektromaqnit sahəsinin vakuüm halının enerjisi üçün

$E_o = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar \omega_{k\lambda}}{2}$ qiyməti alınmışdı. Digər tərəfdən klassik elektrodinamikada

həmin enerji $\frac{1}{8\pi} \int \mathcal{E}_{\text{vak}}^2(\vec{r}, t) (d\vec{r})$ bərabərdir:

$$\frac{1}{8\pi} \int \mathcal{E}_{\text{vak}}^2(\vec{r}, t) (d\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar \omega_{k\lambda}}{2} \quad (80.7)$$

\mathcal{E}_{vak} -un (80.3) ilə verilmiş ifadəsi (80.7)-də yazılsa,

$$\frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \lambda, \lambda'} \vec{\mathcal{E}}_{\vec{k}'\lambda'} \vec{\mathcal{E}}_{\vec{k}\lambda} e^{-i(\omega_{\vec{k}'\lambda'} - \omega_{\vec{k}\lambda})t} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} (d\vec{r}) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar\omega_{\vec{k}\lambda}}{2}.$$

Burada

$$\frac{1}{L^3} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}} (d\vec{r}) = \delta_{\vec{k}'\vec{k}}$$

δ -simvolun xassəsindən istifadə edərək, \vec{k}' üzrə cəmi götürsək,

$$\frac{L^3}{8\pi} \sum_{\vec{k}, \lambda} \mathcal{E}_{\vec{k}\lambda}^2 = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar\omega_{\vec{k}\lambda}}{2}$$

və buradan $\mathcal{E}_{\vec{k}\lambda}^2$ üçün

$$\mathcal{E}_{\vec{k}\lambda}^2 = \frac{4\pi\hbar\omega_{\vec{k}\lambda}}{L^3} \quad (80.8)$$

alınır. $\mathcal{E}_{\vec{k}\lambda}^2$ -in bu ifadəsini (80.6)-da yazdıqda

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2 L^3} \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{1}{\omega_{\vec{k}\lambda}^3}. \quad (80.9)$$

Bu bərabərlikdə \vec{k} -ya görə cəmi

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\vec{k}} = 2 \frac{1}{8\pi^3} \int d\vec{k} = \frac{2}{8\pi^3} \int k^2 dk d\Omega = \frac{1}{4\pi^3 c^3} \int \omega^2 d\omega d\Omega = \frac{1}{\pi^2 c^3} \int \omega^2 d\omega$$

keçidindən istifadə edərək tezliklərə görə inteqralla əvəz etmək olar. Onda

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{2}{\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \int \frac{d\omega}{\omega}. \quad (80.10)$$

Göründüyü kimi axırıncı inteqral loqarifmik dağılır. Lakin elektronun hərəkətinin qeyri-relyativistik olduğunu nəzərə alaraq bu inteqralda yığılan (sonlu qalan) hissəni ayırd etmək olar. Hərəkətin qeyri-relyativistik olma-

sından çıxır ki, vakuüm rəqslərinin təsiri nəticəsində elektronun aldığı $\hbar\omega$ enerjisi elektronun mc^2 məxsusi enerjisindən kiçik olmalıdır:

$$\hbar\omega < \hbar\omega_{\max} = mc^2.$$

Deməli,

$$\omega < \omega_{\max} = \frac{mc^2}{\hbar} \quad (80.11)$$

(baxılan qeyri-relyativistik hərəkət üçün $m=m_0$ götürülmüşdür) şərti yuxarıdakı inteqralın yuxarı sərhədini təyin edər.

Elektronun vakuüm rəqsləri ilə qarşılıqlı təsiri onun enerji səviyyələrinin yuxarı sürüşməsinə gətirdiyindən, elektronun orbitdə titrəmə tezliyi, yəqin ki, onun atomdakı rabitə enerjisinə uyğun tezlikdən kiçik ola bilməz:

$$\omega > \omega_{\min} = \frac{|E|}{\hbar} = \frac{me^4 Z^2}{2n^2 \hbar^3}, \quad (80.12)$$

burada eZ -nüvənin yüküdür.

(80.10)-dakı inteqral ω_{\min} və ω_{\max} sərhədlərində götürülsə,

$$\int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{d\omega}{\omega} = \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}} = \ln \frac{2(\hbar c)^2 n^2}{Z^2 e^4} = \ln \frac{2n^2}{(Z\alpha)^2}$$

olar və onda

$$\overline{(\delta\mathcal{F})^2} = \frac{2}{\pi} \alpha \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \ln \frac{2n^2}{(Z\alpha)^2}, \quad (80.13)$$

burada $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ - incə quruluş sabitidir.

(80.13)-dən görünür ki, vakuüm rəqslərinin təsiri altında elektronun

«yayıma» oblastının ölçüləri r_{vak} , elektronun $r_k = \frac{e^2}{mc^2}$ klassik radiusu ilə

onun $\lambda = \frac{\hbar}{mc}$ Kompton dalğa uzunluğu arasına düşür:

$$r_{vak} = \sqrt{(\delta\vec{r})^2} \approx \sqrt{\alpha} \frac{\hbar}{mc} = \sqrt{\frac{e^2}{mc^2} \cdot \frac{\hbar}{mc}} = \sqrt{r_{kl} \Lambda}.$$

Burada yuxarıda kr hasilinin üzərinə qoyulan $kr \ll 1$ şərti doğrudan da ödənilir:

$$kr_{vak} = \frac{mc}{\hbar} r_{vak} \approx \sqrt{\alpha} \ll 1.$$

Elektronun orbitdə bu cür «yayılması» nəticəsində onun nüvə ilə qarşılıqlı təsiri dəyişir və $V = -e\varphi(r)$ əvəzinə

$$V + \delta V = -e\varphi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = -e \left[1 + \delta\vec{r}\vec{\nabla} + \frac{1}{2}(\delta\vec{r}\vec{\nabla})^2 + \dots \right] \varphi(r)$$

olur, φ - nüvənin Kulon sahəsinin potensialıdır. Bu ifadədən elektronun titrəməsi üzrə orta qiymət götürülsə, titrəmə flüktuasiya xarakterli olduğundan

$$\overline{\delta\vec{r}} = 0, \quad \overline{(\delta x)^2} = \overline{(\delta y)^2} = \overline{(\delta z)^2} = \frac{1}{3} \overline{(\delta r)^2}$$

alınar və elektronun vakuüm rəqsləri ilə qarşılıqlı təsir enerjisi

$$\delta V_{vak} = -\frac{e^2}{6} \overline{(\delta\vec{r})^2} \nabla^2 \varphi(r). \quad (80.14)$$

Nüvənin Kulon sahəsinin potensialı

$$\nabla^2 \varphi(r) = -4\pi Ze \delta(\vec{r}). \quad (80.15)$$

Puasson tənliyini ödədiyindən

$$\delta V_{vak} = \frac{2\pi Ze^3}{3} \overline{(\delta\vec{r})^2} \delta(\vec{r}) \quad (80.16)$$

olar. Beləliklə, elektronun vakuüm rəqsləri ilə qarşılıqlı təsir enerjisinin orta qiyməti (80.13) və (80.16)-dan

$$\delta E_{vak} = \int \Psi^*(r) \delta V_{vak} \Psi(\vec{r}) (d\vec{r}) = \frac{4}{3} Z e^2 \alpha \left(\frac{\hbar}{mc} \right) |\Psi(0)|^2 \ln \frac{2n^2}{(Z\alpha)^2} \quad (80.17)$$

kimi təyin olunur.

Elektronun enerji səviyyələrinə olan δE_{vak} əlavəsi *Lemb sürüşməsi* adlanır və atomun dalğa funksiyasının onun mərkəzindəki qiyməti ilə təyin olunur. $|\Psi_{nlm}(0)|^2$ kəmiyyəti yalnız $l=0$ -a uyğun s - halları üçün sıfırdan fərqlidir və bütün başqa $l=1,2,\dots$ hallar üçün isə sıfıra bərabərdir. Baxılan atom hidrogenəbənzər atom olduğunu qəbul etsək, §40-dan (bax: (40.40))

$$|\Psi_{nlm}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi n^3 a^3}$$

olar, burada n – baş kvant ədədi, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ – Borun birinci orbitinin radiusudur. Bunu (80.17)-də yazsaq, s - səviyyələrinin sürüşməsi

$$\delta E_{vak} = \frac{8}{3\pi} \alpha^3 \frac{Z^4}{n^3} R \hbar \ln \frac{2n^2}{(Z\alpha)^2} \quad (80.18)$$

ifadəsi alınır, burada $R = \frac{me^4}{2\hbar^3}$ – *Ridberq sabitidir*. (80.18) ifadəsi 1947-ci ildə Hans Bete tərəfindən alınmışdı.

Lemb sürüşməsinin hidrogenəbənzər atomların həyəcanlanmamış səviyyələrin enerjisinə nisbəti

$$\frac{\delta E_{vak}}{|E|} \approx \frac{\alpha^3 Z^4 R \hbar}{R \hbar Z^2} = \alpha^3 Z^2$$

tərtiblikdir. Digər tərəfdən δE_{vak} sürüşməsi atomun enerji səviyyələrinin incə quruluşuna uyğun parçalanmaya gətirən ΔE_{nj} sürüşməsindən α dəfə kiçikdir.

Hidrogen atomunun Dirak nəzəriyyəsində (bax:§75) $2p_{1/2}$ və $2s_{1/2}$ səviyyələrinin bir-birinin üzərinə düşdüyünü, yəni onların eyni enerjiyə malik olduğunu göstərmişdik. Yuxarıda gördük ki, $2p_{1/2}$ ($l=1, j=1/2$) səviyyəsi Lemb sürüşməsinə uğramır (onun üçün $\delta E_{vak}=0$ -dır), $2s_{1/2}$

($l = 0, j = 1/2$) səviyyəsi üçün isə δE_{vak} sıfırdan fərqli olduğundan o, $2p_{1/2}$ səviyyəsindən yuxarıda yerləşəcəkdir. Bu iddia 1947-ci ildə Lemb və Rezerford təcrübələrində təsdiq olunmuşdur.

(80.18)-dən $2s_{1/2}(n = 2, l = 0, j = 1/2)$ səviyyəsinin Lemb sürüşməsi üçün $\delta E_{vak}^{nəz} = 17,8R = 1040 \text{ MHS}$ qiyməti alınmışdı. Yuxarıdakı təcrübələrdə alınan qiymət isə $\delta E_{vak}^{təc} = 1057 \text{ MHS}$ olmuşdu (bax: şəkil 32). Müqayisədən görünür ki, nəzəri və təcrübi nəticələr bir-birinə xeyli yaxındır. Relyativistik kvant nəzəriyyəsində δE_{vak} -nin nəzəri və təcrübi qiymətləri arasındakı fərq isə 10^{-3} MHS təşkil edir.

IV HİSSƏ

ÇOXSAYLI ZƏRRƏCİKLƏRDƏN İBARƏT SİSTEMLƏR

X FƏSİL

EYNI ZƏRRƏCİKLƏRDƏN İBARƏT SİSTEMLƏR

§81. Eyni zərrəciklər üçün seçilməzlik prinsipi

Biz indiyə qədər yalnız bir zərrəcikdən ibarət kvant mexaniki sistemlərin müxtəlif sahələrdəki hərəkətini tədqiq etməklə məşğul olmuşduq. İndi də çoxlu zərrəciklərdən ibarət sistemlərin tədqiqinə keçək. Bu axırıncı sistemlər arasında eyni zərrəciklərdən təşkil olunmuş sistemlər xüsusi yer tutur. Eyni zərrəciklər dedikdə elə zərrəciklər başa düşülür ki, onların kütləsi m , yükü e , spini s_z və başqa xarakteristikaları eyni olsun. Eyni zərrəciklərdən ibarət sistemlərin kvant xassələri, müxtəlif növ zərrəciklərdən təşkil olunmuş sistemlərin xassələrindən kəskin fərqlənir. Məsələn, sistem proton, neytron, elektron və i.a. kimi müxtəlif zərrəciklərdən ibarətdirsə, sistemin tərkibində onları həm klassik və həm də kvant mexanikasında bir-birindən həmişə fərqləndirmək olur.

Sistem eyni zərrəciklərdən təşkil olunduqda isə məsələ mürəkkəbləşir. Klassik mexanikada, zərrəciklərin fiziki xarakteristikalarının eyni olmasına baxmayaraq, sistemdə onları həmişə birini digərindən fərqləndirmək olur. Doğrudan da, hər hansı bir anda zərrəcikləri nömrələyib trayektoriyaları boyu hərəkətini izləsək, istənilən sonrakı anda hər hansı nömrəli zərrəciyin fəzanın hansı nöqtəsində olacağını dəqiq demək olur. Başqa sözlə, klassik mexanikada zərrəcik öz fərdiliyini itirmir.

Kvant mexanikasında isə məsələ tamamilə başqadır. Kvant mexanikasında qeyri-müəyyənlik prinsipinə görə trayektoriya üzrə hərəkət mümkün deyildir. Müəyyən anda zərrəciyin vəziyyəti dəqiq məlumdursa, sonrakı anda onun vəziyyəti tamamilə qeyri-müəyyən qalır. Zərrəcikləri baxılan anda nömrələsək, sonrakı anda fəzanın verilmiş nöqtəsində hansı nömrəli zərrəciyin müşahidə olunacağı haqqında heç nə deyə bilmərik.

Beləliklə, kvant mexanikasında eyni zərrəciklər sistemi tərkibində zərrəcik, hərəkəti zamanı, öz fərdiliyini saxlamır və onlar bir-birindən qəti seçilmir. Bu iddia eyni zərrəciklər sistemi üçün *seçilməzlik prinsipi* adlanır. Bu prinsip eyni zərrəcikli sistemlərin tədqiqində əsas rol oynayır və mühüm fiziki nəticələrə gətirir.

Tutaq ki, sistem qarşılıqlı təsirdə olan eyni zərrəciklərdən təşkil olunmuşdur. Zərrəciklərin sürətlərinin yalnız işıq sürətindən kifayət qədər kiçik qiymətində sistemin klassik Hamilton funksiyası onu təşkil edən zərrəciklərin koordinat və impulslarının funksiyası şəklində göstərilə bilər. Sürətlər kiçik olduğundan zərrəciklər arasında qarşılıqlı təsirin daşınmasına sərf olunan müddətdə sistemdə baş verən dəyişikliklər o qədər cüzi olur ki, sistemin qarşılıqlı təsir enerjisi onun hərəkət tarixindən yox, zərrəciklərin koordinatlarının baxılan andakı qiymətindən asılı olur. Zərrəciklərin sürəti işıq sürəti tərtibində ($v \sim c$) olanda isə qarşılıqlı təsiri daşıyan elektromaqnit sahəsinin varlığını da nəzərə almaq lazım olur. Bu halda sistem sərbəstlik dərəcəsi sonsuz olan sistemə çevrilir.

Biz yalnız $v \ll c$ şərtini ödəyən sistemlərin öyrənilməsi ilə məşğul olacağıq. $v \sim c$ şərti ödənilən sistemlərin tədqiqi isə kvant mexanikası kursu çərçivəsindən kənar qalır və kvant elektrodinamikası kursunun əsas məzmununu təşkil edir.

Baxdığımız halda uyğunluq prinsipinə görə N eyni zərrəcikli sistemin Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(x_i, t) \right) + \sum_{i \neq j} U(x_i, x_j) + W \quad (81.1)$$

şəklində olar. Burada $x_i(x_i, y_i, z_i)$ – i -ci zərrəciyin koordinatları, $U(x_i, t)$ – onun xarici sahə ilə, $U(x_i, x_j)$ – zərrəciklərin bir-biri ilə qarşılıqlı təsir operatorları, W isə spin-spin və spin-orbital qarşılıqlı təsir operatorudur. W operatoru zərrəciklərin spin dəyişənlərindən $s_{1z}, s_{2z}, \dots, s_{Nz}$ və impuls operatorlarından asılıdır. Burada zərrəciklərin spinə malik olması faktı nəzərə alınacaq. Spin-spin və spin-orbital qarşılıqlı təsirlərə gəldikdə isə onlar yalnız böyük ($v \sim c$) sürətlərdə özlərini büruzə verir, qeyri-relyativistik sürətlərdə isə mühüm rol oynamır. Dirak nəzəriyyəsinə həsr olunmuş fəslin §74-də biz bu məsələyə toxunmuşuq.

§4-də qeyd etmişdik ki, N zərrəcikdən ibarət sistemin dalğa funksiyası zərrəciklərin koordinatlarından, onların spin dəyişənlərindən və zamandan asılıdır: $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N, s_{1z}, s_{2z}, \dots, s_{Nz}, t)$. Şərti olaraq zərrəciklərin fəza və spin dəyişənlərinin çoxluğunu, məsələn, $x_1, s_{1z} \rightarrow (1)$, $x_2, s_{2z} \rightarrow (2)$ və i.a. kimi işarə etsək, onda sistemin Şredinger tənliyi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(1,2,\dots,N,t) = \tilde{H}(1,2,\dots,N,t)\Psi(1,2,\dots,N,t) \quad (81.2)$$

olar.

Zərrəciklərin qarşılıqlı təsir operatoru onların arasındakı nisbi məsafənin mütləq qiymətindən asılı olduğundan sistemdə iki ixtiyari i və k zərrəciyin qarşılıqlı yerini dəyişdikdə \tilde{H} -in ifadəsinə daxil olan uyğun toplananların yeri dəyişmiş olur. Bu da \tilde{H} operatorunu dəyişmir. Ona görə $\Psi_1(1, 2, \dots, N, t)$ funksiyası (81.2) tənliyinin \tilde{H} -in müəyyən E məxsusi qiymətinə uyğun həllidirsə, ondan zərrəciklərin (koordinatlarının) yerdəyişməsi ilə fərqlənən bütün $\Psi_2(2, 1, \dots, N, t)$, $\Psi_3(1, 3, 2, \dots, N, t)$ kimi funksiyalar da (81.2) tənliyinin həmin E məxsusi qiymətinə uyğun həlləri olar. Belə funksiyaların sayı zərrəciklərin yerdəyişmələri sayı – $N!$ -a bərabərdir. Seçilməzlik prinsipinə görə iddia edə bilərik ki, istənilən iki zərrəciyin yerdəyişməsi nəticəsində alınan hal sistemin yeni halı olmur (klassik mexanikanın ziddinə) və bütün bu $N!$ sayda dalğa funksiyaları sistemin eyni bir halını təyin edir. Kvant mexanikasında bu vəziyyət *mübadilə cırlaşması* adlanır. Beləliklə, sistemin halı zərrəciklərdən hər birinin koordinatlarını eyni zamanda ölçməklə təyin olunarsa, onun halı yəqin ki, yalnız mübadilə cırlaşması dəqiqliyi ilə təyin oluna bilər, belə ki, bu funksiyalardan hansının sistemin ölçülən halına uyğun gəldiyini dəqiq demək mümkün deyildir.

Digər tərəfdən yuxarıdakı funksiyaların ixtiyari xətti kombinasiyası olar

$$\Psi(1,2,\dots,N,t) = \sum_k C_k \Psi_k(1,2,\dots,N,t) \quad (81.3)$$

funksiyası da sistemin mümkün olan hallarından birini xarakterizə edir. Lakin C_k -lərin seçilməsi ilə alınan bütün bu xətti kombinasiyalardan hansının sistemin baxılan halına uyğun gəldiyini də bilavasitə demək mümkün deyildir.

Bu suallara cavab almaq üçün aşağıdakı kimi hərəkət edək. Kvant mexanikasında hər bir əməliyyat müəyyən operator ilə aparılır. Zərrəciklərin yerdəyişmə əməliyyatını da operatorun köməyiylə aparmaq olar. İxtiyari iki i və k nömrəli zərrəciklərin yerdəyişmə operatorunu \tilde{P}_{ik} ilə işarə edək. Onda zərrəciklərin eynilik şərti riyazi olaraq \tilde{P}_{ik} ilə \tilde{H} operatorlarının kommutasiyası kimi ifadə olunur:

$$\tilde{P}_{ik} \tilde{H} - \tilde{H} \tilde{P}_{ik} = 0. \quad (81.4)$$

Buradan \check{P}_{ik} və \check{H} ümumi məxsusi funksiyalara malik olduğundan (81.2) tənliyinin həlli olan $\Psi(1, 2, \dots, N, t)$ funksiyası P_{ik} operatorunun da məxsusi funksiyası olar:

$$P_{ik}\Psi(1,2,\dots,N,t) = \lambda\Psi(1,2,\dots,i,k,\dots,N,t). \quad (81.5)$$

Burada $\lambda - \check{P}_{ik}$ -nin məxsusi qiymətidir. \check{P}_{ik} ermit olduğundan $\lambda -$ həqiqidir. Digər tərəfdən P_{ik} -nin tərifindən

$$\check{P}_{ik}\Psi(1,2,\dots,i,\dots,k,\dots,N,t) = \Psi(1,2,\dots,k,\dots,i,\dots,N,t) \quad (81.6)$$

olar. (81.5) və (81.6) tənliklərində bir də soldan \check{P}_{ik} ilə təsir etsək,

$$\check{P}_{ik}^2\Psi = \lambda\check{P}_{ik}\Psi = \lambda^2\Psi(1,2,\dots,i,\dots,k,\dots,N,t) \quad (81.5')$$

$$\check{P}_{ik}^2\Psi = P_{ik}\Psi(1,2,\dots,k,\dots,i,\dots,N,t) = \Psi(1,2,\dots,i,\dots,k,\dots,N,t) \quad (81.6')$$

alınar. (81.5') və (81.6')-in müqayisəsindən

$$\lambda^2 = 1, \lambda = \pm 1$$

alınır. Buradan çıxır ki, \check{P}_{ik} yerdəyişmə operatoru iki məxsusi qiymətə malikdir. $\lambda = 1$ məxsusi qiymətinə uyğun funksiya zərrəciklərin yerdəyişməsinə görə *simmetrik funksiya* adlanır və

$$\check{P}_{ik}\Psi^s = +1\Psi^s(1,2,\dots,i,\dots,k,\dots,N,t) \quad (81.7)$$

tənliyini ödəyir. $\lambda = -1$ məxsusi qiymətinə uyğun funksiya isə *antisimmetrik funksiya* adlanır və

$$\check{P}_{ik}\Psi^A = -1\Psi(1,2,\dots,i,\dots,k,\dots,N,t) \quad (81.8)$$

tənliyini ödəyir.

Buradan çıxır ki, eyni zərrəciklərdən ibarət sistemlər üçün (81.3) ilə verilən bütün mümkün olan (C_k -lərin seçilməsi ilə fərqlənən) xətti kombinasionalardan yalnız elələri seçilməlidir ki, onlar zərrəciklərin yerdəyişmə əməliyyatına görə ya simmetrik və ya da antisimmetrik olsun.

Deməli, eyni zərrəciklərdən ibarət sistemlərin halının dalğa funksiyasının təyinindəki yuxarıda qeyd olunan qeyri-müəyyənlik simmetriya postu-

latının daxil edilməsi ilə aradan qaldırılmış olur: N eyni zərrəcikdən təşkil olunmuş sistemin halları ya simmetrik və ya da antisimmetrik funksiyalarla təsvir olunur. Beləliklə, simmetriya prinsipi daxil edildikdə mübadilə cırlaşması tamamilə aradan qaldırılmış olur.

\tilde{P}_{ik} yerdəyişmə operatoru aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığından və sistemin \tilde{H} Hamilton operatoru ilə kommutasiya etdiyindən sistemin dalğa funksiyasının simmetriya xassəsi *hərəkət inteqralı* olur. Başqa sözlə, sistem hər hansı başlanğıc anda simmetrik (antisimmetrik) dalğa funksiyaları ilə təsvir olunan halda olarsa, sistemin bütün sonrakı halları da simmetrik (antisimmetrik) funksiyalar ilə təsvir olunur.

Deməli, eyni zərrəciklərdən təşkil olunmuş sistemlər yalnız iki müxtəlif təbiətli ola bilər. Bu sistemlərin təbiətləri elədir ki, onlardan bir qismi yalnız simmetrik dalğa funksiyaları, digər qismi isə yalnız antisimmetrik dalğa funksiyaları ilə təsvir olunur. Sistemin simmetriya xassəsi hərəkət inteqralı olduğundan bir simmetriya xarici təsir nəticəsində və ya sistemin evolyusiyası (halın zamana görə dəyişməsi) zamanı digər simmetriyaya keçə bilmir.

Sistemin halının simmetrik və ya antisimmetrik dalğa funksiyaları ilə təsviri məsələsi sistemi təşkil edən zərrəciklərin növündən asılıdır. Təcrübələr göstərir ki, spini yarım tam olan zərrəciklər sistemi antisimmetrik funksiyalarla təsvir olunur. Belə zərrəciklər *fermionlar* adlanır və onlar *Fermi-Dirak statistikasına* tabedir. Spini tam olan zərrəciklər sisteminin halları isə simmetrik funksiyalarla təsvir olunur. Belə zərrəciklər *bozonlar* adlanır və onlar *Boze-Eynşteyn statistikasına* tabe olur. Beləliklə, zərrəciklərin statistikasını onların spinlərinin qiyməti ilə təyin olunur.

Mürəkkəb zərrəciklərin və eyni müxtəlif zərrəciklərdən təşkil olunmuş sistemlərin dalğa funksiyası onların tərkibinə daxil olan elementar fermionların sayı ilə təyin olunur. Mürəkkəb zərrəciklər tək sayda elementar fermionlardan təşkil olunubsa, belə sistemlərin dalğa funksiyası iki mürəkkəb zərrəciyin yerdəyişməsinə görə antisimmetrik olmalıdır. Belə ki, iki belə zərrəciyin yerdəyişməsi tək sayda fermionların yerdəyişməsinə ekvivalent olduğundan, dalğa funksiyası işarəsini dəyişir. Buna oxşar olaraq, mürəkkəb zərrəciklər cüt sayda elementar fermionlardan təşkil olunmuş olarsa, belə sistemlərin halı simmetrik dalğa funksiyaları ilə təsvir olunur.

Sistem qismən tək sayda və qismən də cüt sayda elementar fermionlardan ibarət mürəkkəb zərrəciklərdən təşkil olunubsa, belə sistemin dalğa funksiyası birinci növ mürəkkəb zərrəciklərin yerdəyişməsinə görə antisimmetrik, ikinci növ mürəkkəb zərrəciklərin yerdəyişməsinə görə isə simmetrik olmalıdır.

N zərrəcikdən ibarət kvant mexaniki sistem üçün (81.2) tənliyinin ümumi şəkildə dəqiq həllərini tapmaq mümkün deyildir. Lakin bir çox məsələlərin həlli üçün (81.2) tənliyinin zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı

təsir nəzərə alınmayan hala uyğun həllərini tapmaq lazım gəlir. Belə həllərə (81.2) tənliyinin sıfırıncı yaxınlaşması deyilir.

Beləliklə, eyni zərrəciklər sistemində ayrılıqda götürülmüş zərrəciyin Hamilton operatorunu

$$\tilde{H}(x_i) = \frac{\tilde{p}_i^2}{2m} + U(x_i, t) = \tilde{H}(i) \quad (81.9)$$

kimi işarə etsək, baxılan yaxınlaşmada sistemin Hamilton operatoru onların additiv cəmi olar:

$$\tilde{H}(1, 2, \dots, N) = \tilde{H}(1) + \tilde{H}(2) + \dots + \tilde{H}(N). \quad (81.10)$$

(81.9)-da $\tilde{U}(x_i, t)$ – i -ci zərrəciyin xarici sahədəki potensial enerji operatorudur.

\tilde{H} operatorunun aşkar şəkildə zamandan asılı olmadığını fərz etsək, (81.2) tənliyinin stasionar halları

$$\Psi(1, 2, \dots, N, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \Psi(1, 2, \dots, N)$$

və (81.2) tənliyi

$$[(\tilde{H}(1) + \tilde{H}(2) + \dots + \tilde{H}(N))\Psi(1, 2, \dots, N) = E\Psi(1, 2, \dots, N) \quad (81.11)$$

şəklinə düşər, burada E -sistemin tam enerjisidir.

(81.9) operatorunun məxsusi funksiyalarını $\Psi_{n_i}(i)$ ilə işarə etsək,

$$\tilde{H}(i)\Psi_{n_i}(i) = E_{n_i}\Psi_{n_i}(i). \quad (81.12)$$

Asanlıqla göstərmək olar ki, (81.11) tənliyinin həllini

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \Psi_{n_1}(1)\Psi_{n_2}(2)\dots\Psi_{n_N}(N) \quad (81.13)$$

şəklində axtarmaq olar və sistemin tam enerjisi onu təşkil edən zərrəciklərin tam enerjilərinin additiv cəminə bərabər olar:

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N},$$

burada n_i -lə zərrəciyin kvant halını təyin edən kvant ədədləri çoxluğu işarə olunmuşdur.

Seçilməzlik prinsipinə görə (81.13) ifadəsində istənilən iki zərrəciyin (koordinatlarının) yerdəyişməsi nəticəsində alınan funksiyalar da (81.11) tənliyinin həmin E məxsusi qiymətinə uyğun həlləri olduğundan, bozonlardan ibarət sistem üçün baxılan hala uyğun (81.13) həllər çoxluğundan yalnız zərrəciklərin yerdəyişməsinə görə simmetrik dalğa funksiyası seçilir. Belə funksiya (81.13) növlü həllərin aşağıdakı cəmi şəklində yazılır:

$$\Psi^s = \Psi_1(1,2,\dots,N) + \Psi_2(2,1,\dots,N) + \Psi_3(1,3,2,\dots,N) + \dots \quad (81.14)$$

və ya

$$\Psi^s = \sum_k \Psi_k = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum_{n_1 n_2 \dots} \Psi_{n_1}(1) \Psi_{n_2}(2) \dots \Psi_{n_N}(N), \quad (81.15)$$

burada cəm n_1, n_2, \dots, n_N -indekslərinin bütün mümkün olan müxtəlif yerdəyişmələri üzrə götürülür, N_i -lər göstərir ki, bu indekslərdən necəsi E_i halına gətirir (*Boze-Eynşteyn* statistikasına görə sistemin baxılan E_{n_i} halında zərrəciklərin sayı istənilən ola bilər). (81.15) ilə verilmiş Ψ -nin modulunun kvadratından sistemdəki bütün zərrəciklərin koordinatları üzrə inteqral alındıqda cəmin hər həddinin modulunun kvadratından başqa yerdə qalan hədlərinin inteqralı sıfıra bərabər olur. $\Psi_{n_i}(i)$ funksiyaları ortonormalanmış

funksiyalar olduğundan (81.15) cəmindəki hədlərin sayı $\frac{N!}{N_1! N_2! \dots}$ bəra-

bərdir, buradan da (81.15) ifadəsindəki normalayıcı vuruq ortaya çıxır.

Fermionlardan təşkil olunmuş sistemlərin hallarının təsviri üçün isə (81.13) həllər çoxluğundan antisimmetrik funksiya seçilir. Belə funksiya (81.13) növlü həllərin antisimmetrik kombinasiyası kimi verilir. Asanlıqla göstərmək olar ki, antisimmetrik funksiya Ψ^A (81.13) hasilinə daxil olan $\Psi_{n_i}(i)$ funksiyalarından düzəlmiş aşağıdakı determinant (*Sleter determinantı*) şəklində yazıla bilər:

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{n_1}(1) \Psi_{n_1}(2) \dots \Psi_{n_1}(N) \\ \Psi_{n_2}(1) \Psi_{n_2}(2) \dots \Psi_{n_2}(N) \\ \dots \dots \dots \dots \dots \\ \Psi_{n_N}(1) \Psi_{n_N}(2) \dots \Psi_{n_N}(N) \end{vmatrix} \quad (81.16)$$

Doğrudan da, (81.16)-da iki ixtiyari zərrəciyin koordinatlarının yerdəyişməsi determinantın iki sütununun yerdəyişməsinə gətirir. Bunun nəticəsində determinant işarəsini dəyişir, yəni (81.16) ilə verilmiş $\Psi^A(1, 2, \dots, N)$ funksiyası zərrəciklərin yerdəyişməsinə görə antisimmetrik olur.

İndi də fərz edək ki, iki (və ya ikidən çox) fermion eyni bir haldadır, yəni məsələn, $n_1 = n_2$ -dir. Bu zaman determinantın iki sətiri (və ya sütunu) bir-birinin eyni olduğundan determinant sıfıra bərabər olur. Buradan çıxır ki, baxılan halı iki və ikidən çox fermion tuta bilməz. Başqa sözlə, sistemin verilmiş Ψ_{n_i} halında ya bir fermion olar, yaxud da həmin hal boş qalar. Bu axırıncı iddia isə *Pauli prinsipinin* ifasıdır. Beləliklə, Pauli prinsipi, seçilməzlik prinsipinin qarşılıqlı təsirdə olmayan fermionlardan ibarət sistemlər üçün söylənməmiş xüsusi halıdır.

Eyni zərrəcikli sistemdə zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir nəzərə alındıqda sistemin $\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \sum_{i \neq j} U(x_i, x_j)$ Hamilton operatorunun simmetriyası dəyişmədiyindən sistemin dəqiq dalğa funksiyası superpozisiya prinsipinə əsasən, \tilde{H}_0 -in məxsusi funksiyası olan (81.15) simmetrik və ya (81.16) antisimmetrik funksiyaların superpozisiyası şəklində göstərilə bilər:

$$\Psi = \sum C_i(t) \Psi_i^s,$$

$$\Psi = \sum_k C_k(t) \Psi_k^A,$$

burada $C_i(t)$ və $C_k(t)$ – sistemin i -ci simmetrik və k -cı antisimmetrik hallarının ehtimal amplitudlarıdır. Zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir sistemin bir haldan başqa hala keçməsinə səbəb ola bilər. Lakin halın simmetriyasının yuxarıda qeyd olunan saxlanma qanununa əsasən, istənilən təsir nəticəsində sistemin keçdiyi yeni halın simmetriyası başlanğıc halının simmetriyası üzərinə düşməlidir. Beləliklə, sistemin dalğa funksiyalarının simmetriyası nə zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsirin təbiətindən və nə də xarici sahələrin olub olmamasından asılı olmur, o yalnız sistemi təşkil edən eyni zərrəciklərin təbiəti ilə müəyyən olunur.

Qeyri-relyativistik ($v \ll c$) halda spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsirlərə uyğun enerjilər, zərrəciklərin elektrik qarşılıqlı təsir enerjisinə nisbətən nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçik olur. Elektrik qarşılıqlı təsirdə olan zərrəciklərin Hamilton operatoruna spin operatoru daxil olmur və o, spin dəyişəninə təsir etmir. Buna görə də sistemin dalğa funksiyasını yalnız zərrəciklərin koordinatlarından və yalnız spin dəyişənlərindən asılı funksiyaların hasilini şəklində göstərmək olar:

$$\Psi(1, 2, \dots, N) = \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \chi(s_{1z}, s_{2z}, \dots, s_{Nz}) \quad (81.18)$$

(81.2) Şredinger tənliyi yalnız koordinatlardan asılı Ψ funksiyasını təyin etməyə imkan verir, spin funksiyası χ isə ixtiyari qalır.

Zərrəciklərin elektrik qarşılıqlı təsiri onların spinindən asılı olmur. Buna baxmayaraq eyni zərrəciklər sisteminin enerjisi, secilməzlik prinsipi nəticəsində, onun tam spinindən asılı olur (bax: §83).

Fermionlardan ibarət sistemlər üçün (81.18) dalğa funksiyası zərrəciklərin koordinat və spin dəyişənlərinin yerdəyişməsinə görə antisimmetrik olduğundan, bu yerdəyişmələrə görə koordinatlardan asılı $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ funksiyası simmetrik olduqda, spin funksiyası mütləq antisimmetrik və əksinə olmalıdır:

$$\Psi^A = \Psi^s \chi^A \text{ və ya } \Psi^A = \Psi^A \chi^s. \quad (81.19)$$

Zərrəciklərin spini nəzərə alındıqda spin funksiyalarının ayrıca hesablanması tələb olunur. Onda sistemin (81.2) Şredinger tənliyinə spin funksiyalarının ödədiyi tənliklər də əlavə olunur.

§61-də göstərdik ki, spin operatorunun kvadratı \tilde{S}^2 , onun ixtiyari secilmiş istiqamətdəki (məsələn, z istiqamətində) \tilde{S}_z proyeksiyası operatoru və \tilde{H} Hamilton operatoru bir-biri ilə qarşılıqlı kommutasiya edir, yəni onlar ümumi məxsusi funksiyalara malikdir:

$$\begin{aligned} \tilde{S}^2 \chi(s_{1z}, \dots, s_{Nz}) &= \lambda^2 \chi(s_{1z}, \dots, s_{Nz}), \\ \tilde{S}_z \chi(s_{1z}, \dots, s_{Nz}) &= \lambda_z \chi(s_{1z}, \dots, s_{Nz}). \end{aligned} \quad (81.20)$$

Burada $\tilde{S} = \sum_i \tilde{S}^{(i)}$, $\tilde{S}^{(i)} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}^{(i)}$ $-i$ -ci zərrəciyin spin operatoru,

$\tilde{S}_z = \sum_i S_z^{(i)}$, $S_z^{(i)} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z^{(i)}$ – həmin zərrəciyin spininin z oxu istiqamətində

dəki proyeksiyası operatoru, $\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – Pauli matrisələridir.

Gələcək 82–83 §-larda iki eyni zərrəcikdən ibarət sistemlərin tədqiqi üzərində ətraflı dayanacağıq. Ona görə də yuxarıda dediklərimizi belə sistemlər üçün daha əyani şəkildə şərh edək.

§82. İki eyni fermiondan ibarət sistemin dalğa funksiyası

Spini 1/2 olan iki eyni zərrəcikdən ibarət sistemə baxaq. Onun qeyri-relyativistik halda Şredinger tənliyi

$$[E - \check{H}_1 - \check{H}_2 - V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + W(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \check{p}_1, \check{p}_2, s_{1z}, s_{2z})] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z}) = 0 \quad (82.1)$$

olar. Burada E -sistemin tam enerjisi, $\check{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(\vec{r}_i)$ ayrılıqda götürülmüş zərrəciyin (81.9) ilə verilmiş Hamilton operatoru, $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – zərrəciklər arasındakı elektrik qarşılıqlı təsir operatoru, W –spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsir operatorudur. Spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadığı hallarda (82.1) tənliyinin həllini

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z}) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(s_{1z}, s_{2z}) \quad (82.2)$$

kimi göstərmək olar. Fermionlar sistemi üçün $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z})$ funksiyası antisimmetrik olmalıdır. Onda $\chi(s_{1z}, s_{2z})$ funksiyası simmetrik (antisimmetrik) olduqda $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ –antisimmetrik (simmetrik) götürülməlidir. Baxılan yaxınlaşmada (82.2) və (82.1)-dən koordinatlardan asılı $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ funksiyası

$$[E - \check{H}_1 - \check{H}_2 - V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (82.3)$$

tənliyinin həlli olar. Lakin (82.3) tənliyi dəqiq həll olunmur.

(82.3) tənliyini təxmini metodlardan biri olan həyəcanlanma metodu ilə həll etmək istəsək, həyəcanlanmamış sistemin $\check{H}_0 = \check{H}_1 + \check{H}_2$ Hamilton operatorunun məxsusi funksiyalar spektri (sıfırıncı yaxınlaşma) məlum olmalıdır. Bu spektr

$$\check{H}_0 \Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_0 \Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (82.4)$$

tənliyinin həllindən tapılır.

Bir-birindən asılı olmayaraq hərəkət edən elektronlardan ibarət sistemin hal funksiyası (sıfırıncı yaxınlaşma) onlardan birini n_1 , ikincisini isə n_2 halında təsvir edən dalğa funksiyalarının hasilinə bərabər olmalıdır:

$$\Psi_1^0 = \Psi_{n_1}^0(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}^0(\vec{r}_2). \quad (82.5)$$

Bunu (82.4) tənliyində yerinə yazaraq asanlıqla göstərmək olar ki, bu məxsusi funksiya sistemin tam enerjisinin

$$E_{n_1 n_2}^0 = E_{n_1}^0 + E_{n_2}^0 \quad (82.6)$$

məxsusi qiymətinə uyğundur. Secilməzlik prinsipinə görə elektronların yerdəyişmə əməliyyatı zamanı $\tilde{H}_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ operatoru invariant qaldığından, (82.4) tənliyinin ikinci

$$\Psi_{II}^0 = \Psi_{n_1}^0(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}^0(\vec{r}_1) \quad (82.7)$$

həlli də \tilde{H}_0 -in (82.6) məxsusi qiymətinə aiddir.

Sistemin enerjisinin $E_{n_1 n_2}^0$ məxsusi qiymətinə Ψ_I^0 və Ψ_{II}^0 kimi iki funksiya uyğun gəldiyindən, sistemin $E_{n_1 n_2}^0$ halı əlavə olaraq (təsədüfi cırılşmadan əlavə) iki qat cırılşmış olur. Bu cırılşma tam mənası ilə elektronların secilməzlik prinsipi hesabına ortaya çıxdığından o, *mübadilə cırılşması* adlanır.

Superpozisiya prinsipinə görə sistemin (82.5) və (82.7) funksiyaları ilə təsvir olunan halların hər hansı birində olma ehtimalı

$$\Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_1\Psi_I^0 + C_2\Psi_{II}^0 \quad (82.8)$$

funksiyası ilə təyin olunur. Burada C_1 və C_2 yalnız

$$\int \Psi^{+0}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = 1$$

normalanma şərti ilə əlaqədə olan ixtiyari sabitlərdir.

Eyni zərrəciklərdən ibarət sistemlərin kvant nəzəriyyəsinə əsasən $\Psi^0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ funksiyası zərrəciklərin yerdəyişmə əməliyyatına görə ya simmetrik ($C_1=C_2=C_0$),

$$\Psi^s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_0(\Psi_I^0 + \Psi_{II}^0) = C_0[\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2) + \Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1)], \quad (82.9)$$

ya da antisimmetrik funksiya olmalıdır

$$\Psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_0(\Psi_I^0 - \Psi_{II}^0) = C_0[\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2) - \Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1)], \quad (82.10)$$

burada n_1 və n_2 ilə uyğun halı təyin edən kvant ədədləri çoxluğu işarə olunur.

İndi də iki zərrəcikli sistemin spin funksiyalarını tapaq. Spin-orbital qar-

şılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda spin ilə orbital hərəkət miqdarı momentləri hər biri ayrılıqda saxlanılır və iki zərrəcikli sistemin spin funksiyası (81.20) tənliklərinin həlli olmalıdır. Burada

$$\begin{aligned}\tilde{S}^2 &= (\tilde{S}_1 + \tilde{S}_2)^2 = \tilde{S}_1^2 + \tilde{S}_2^2 + 2\tilde{S}_1\tilde{S}_2, \\ \tilde{S}_z &= \tilde{S}_{1z} + \tilde{S}_{2z}\end{aligned}\quad (82.11)$$

$S^{*(i)} = \frac{\hbar}{2}\sigma_1^{(i)}$, ($i=1,2$) - i -ci zərrəciyin spin operatoru, σ_x , σ_y , σ_z Pauli matrisələridir. (82.11)-də \tilde{S}_1 və \tilde{S}_{1z} operatorları yalnız s_{1z} ; \tilde{S}_2 , \tilde{S}_{2z} operatorları isə yalnız s_{2z} dəyişəninə təsir edir.

s_z dəyişənləri spinin mümkün iki müxtəlif proyeksiyasına uyğun olaraq

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2} \text{ qiymətlərini alır.}$$

Spin hərəkət miqdarı momenti təbiətinə malik olduğundan (81.20)-də \tilde{S}^2 və \tilde{S}_z operatorlarının məxsusi qiymətləri

$$\lambda^2 = \hbar^2 S(S+1), \quad \lambda_z = \hbar S_z \quad (82.12)$$

bərabər olur, burada S və S_z sistemin tam spininin və onun proyeksiyasının qiymətlərini təyin edən spin kvant ədədləridir. Momentlərin (bax: §73) toplanma qaydasına görə iki zərrəcikli sistemin tam spini $S=1$ və ya $S=0$ olar, onun proyeksiyası isə uyğun olaraq $S_z = -1, 0, 1$ və $S_z=0$ qiymətlərini alır. Beləliklə, iki zərrəcikli sistem dörd müxtəlif halda ola bilər. Bu halların spin funksiyalarını tapaq.

$$\tilde{S} \quad \text{və} \quad \tilde{S}_z \text{-in yuxarıdakı ifadələrini və} \quad S^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4}$$

olduğunu nəzərə alsaq, (82.11)-ə görə (81.20) tənlikləri

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(3 + \vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)\chi &= S(S+1)\chi, \\ \frac{1}{2}(\sigma_{1z} + \sigma_{2z})\chi &= S_z\chi\end{aligned}\quad (82.13)$$

şəklində yazmaq olar.

Spin-spin qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda (82.13) sisteminin həlli

$$\chi(s_{1z}, s_{2z}) = \chi_\alpha(s_{1z})\chi_\beta(s_{2z}) \quad (82.14)$$

şəklində axtarıla bilər, burada $\alpha = \pm$, $\beta = \pm$ işarələri qəbul olunmuşdur.

$\chi_+(s_z)$ – spinin proyeksiyası müsbət $\left(s_z = \frac{\hbar}{2}\right)$, $\chi_-(s_z)$ – spinin proyeksiyası

mənfi $\left(s_z = -\frac{\hbar}{2}\right)$ olan halın spin funksiyasıdır. Onların ifadəsi (61.25) ilə

verilmişdir. σ_x , σ_y , σ_z Pauli matrisalarının bu funksiyalara təsiri

$$\begin{aligned} \sigma_x \chi_\pm(s_z) &= \chi_\mp(s_z), \\ \sigma_y \chi_\pm(s_z) &= \pm i \chi_\mp(s_z), \\ \sigma_z \chi_\pm(s_z) &= \pm \chi_\pm(s_z) \end{aligned} \quad (82.15)$$

kimi təyin olunur.

İki fermionlu sistemin (82.14) spin funksiyası aşağıdakı dörd müxtəlif şəkildə ola bilər.

a) hər iki zərrəciyin spinlərinin proyeksiyaları müsbətdir

$$\chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z}), \quad (82.16)$$

b) mənfidir

$$\chi_-(s_{1z})\chi_-(s_{2z}), \quad (82.17)$$

v) «birinci» zərrəciyin spin proyeksiyası müsbət, «ikinci»ninki isə mənfidir

$$\chi_+(s_{1z})\chi_-(s_{2z}) \quad (82.18)$$

q) əskinə

$$\chi_-(s_{1z})\chi_+(s_{2z}). \quad (82.19)$$

Bundan qabaqkı paragrafda göstərdik ki, sistemin spin funksiyaları spin dəyişənlərinin yerdəyişməsinə görə ya simmetrik və ya da antisimmetrik olmalıdır. (82.16) və (82.17) funksiyaları bu tələbi ödəyir, onlar simmetrik funksiyalardır. (82.18) və (82.19) funksiyaları isə belə yerdəyişməyə görə nə simmetrik və nə də antisimmetrikdir. Ona görə onların da simmetriya tələbini ödəyən kombinasiyalarını götürmək lazımdır. Belə kombinasiyalardan biri simmetrik, digəri isə antisimmetrik funksiyaya gətirir. Beləliklə,

iki zərrəcikli sistem üç simmetrik

$$\begin{aligned}\chi_1 &= \chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z}), S=1, S_z=1 \\ \chi_2 &= \chi_-(s_{1z})\chi_-(s_{2z}), S=1, S_z=-1 \\ \chi_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(s_{1z})\chi_-(s_{2z}) + \chi_+(s_{2z})\chi_-(s_{1z})), S=1, S_z=0\end{aligned}\quad (82.20)$$

və bir antisimmetrik

$$\chi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(s_{1z})\chi_-(s_{2z}) - \chi_+(s_{2z})\chi_-(s_{1z})), S=0, S_z=0 \quad (82.21)$$

spin funksiyaları ilə təsvir olunur, burada $\frac{1}{\sqrt{2}}$ vuruğu χ_3 və χ_4 funksiyalarının normalanma şərtini ödəmələri üçün daxil edilmişdir.

Pauli matrisalarının χ_{\pm} -spin funksiyalarına (82.15) təsir qanunundan istifadə edərək göstərmək olar ki, (82.20) və (82.21) funksiyaları \tilde{S}^2 və \tilde{S}_z operatorlarının məxsusi funksiyalarıdır. Doğrudan da, məsələn χ_1 -i (82.13)-də yazsaq,

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(\sigma_{1z} + \sigma_{2z})\chi_1 &= \frac{1}{2}\{\chi_+(s_{2z})\sigma_{1z}\chi_+(s_{1z}) + \chi_+(s_{1z})\sigma_{2z}\chi_+(s_{2z})\} = \\ &= \chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z}) = S_z\chi_1 = \chi_1\end{aligned}$$

buradan $S_z=1$ olar.

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}(3 + \vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)\chi_1 &= \frac{1}{2}\{3\chi_1 + \sigma_{1x}\chi_+(s_{1z})\sigma_{2x}\chi_+(s_{2z}) + \\ &+ \sigma_{1y}\chi_+(s_{1z})\sigma_{2y}\chi_+(s_{2z}) + \sigma_{1z}\chi_+(s_{1z})\sigma_{2z}\chi_+(s_{2z})\} = \\ &= \frac{1}{2}\{3\chi_1 + \chi_2 + i^2\chi_2 + \chi_1\} = 2\chi_1 = S(S+1)\chi_1\end{aligned}$$

alınar. Buradan görünür ki, $\chi_1 = \chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z})$ funksiyası \tilde{S}^2 və \tilde{S}_z operatorlarının $S=1$ və $S_z=1$ məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyadır. Bu halda sistemin spini vahidə bərabər olub (zərrəciklərin spinləri birbirinə paralel), z oxuna paralel yönəlmişdir. Eynilə bunun kimi göstərmək olar ki, χ_2 və χ_3 funksiyaları da həmin operatorların $S=1, S_z=-1$ və $S=1,$

$S_z=0$ məxsusi qiymətlərinə uyğun məxsusi funksiyalarıdır:

$$\begin{aligned}\tilde{S}^2 \chi_{2,3} &= 2\hbar^2 \chi_{2,3} = \hbar^2 S(S+1) \chi_{2,3} \\ \tilde{S}_z \chi_2 &= -\hbar \chi_2, \quad \tilde{S}_z \chi_3 = 0,\end{aligned}\tag{82.22}$$

yəni χ_2 və χ_3 -ə uyğun hallarda sistemin tam spini vahidə bərabər olub, χ_2 halında z oxunun əksinə, χ_3 halında isə z oxuna perpendikulyar yönəlir.

χ_4 funksiyasına gəldikdə isə o,

$$\tilde{S}^2 \chi_4 = 0, \quad S_z \chi_4 = 0\tag{82.23}$$

tənliliklərini ödəyir. Bu halda sistemin tam spini və onun z oxuna proyeksiyası sıfıra bərabər olur ($S=0, S_z=0$), başqa sözlə, zərrəciklərin spinləri bir-birinə antiparalel yönəlmiş olur.

§83. Helium atomunun qeyri-relyativistik kvant nəzəriyyəsi

§81–82-də göstərdik ki, iki eynizərrəcikli kvant sistemlərdə seçilməzlik prinsipi və zərrəciklərin spin xassələri mühüm rol oynayır. Seçilməzlik prinsipi mübadilə cırlaşmasına, onunla əlaqədar və klassik analoqu olmayan mübadilə enerjisinin (zərrəciklər arasında əlavə qarşılıqlı təsirin) meydana çıxmasına (bax: 83.15), belə sistemlərin ya yalnız simmetrik və ya da yalnız antisimmetrik hallara malik olmasına gətirir. Spinin varlığı isə sistemin enerjisini tam spinin qiymətindən asılı edir. Bütün bunlar nə klassik nəzəriyyədə və nə də Bor nəzəriyyəsində olmadığından, əlbətdə onların köməyi ilə helium atomunun və ya başqa çoxelektronlu atomların nəzəriyyəsini qurmaq mümkün olmazdı.

Çox sayda eyni zərrəciklərdən ibarət sistemlərin kvant nəzəriyyəsinin mahiyyətini və onun xüsusiyyətlərini aydın görmək üçün helium və helium oxşar (Li^+ , Be^{++} və i.a.) atomların kvant nəzəriyyəsi ilə tanış olaq.

Çoxelektronlu atomların relyativistik kvant nəzəriyyəsini qurmaq məsələsini həll etmək prinsiplial mümkün olsa da, o, olduqca mürəkkəb riyazi çətinliklərə gətirir və bu kursun çərçivəsindən kənarında durur. Ona görə burada çoxelektronlu atomların qeyri-relyativistik kvant nəzəriyyəsinin şərhini kifayətlənəcəyik, belə ki, bu yaxınlaşma keyfiyyətə eynizərrəcikli sistemlərin kvant nəzəriyyəsinin bütün xüsusiyyətlərini özündə əks etdirir.

Çoxelektronlu atomlardan ən sadəsi helium atomudur. Onun nüvəsi iki protondan ($Z=2$) və iki neytrondan ibarətdir ($A=4$). Nüvənin ətrafında iki elektron hərəkət edir (şəkil 37). Nüvəyə vahid bir zərrəcik kimi baxsaq,

helium atomu üç cisim problemi olur. Üç cisim problemi nəinki kvant mexanikasında, hətta klassik mexanikada belə öz tam həllini tapmamışdır. Ona görə burada bir neçə yaxınlaşmadan istifadə olunur. Fərz olunur ki, nüvə elektronlara görə süku-nətdədir (koordinat başlanğıcı nüvədə yerləşir), nöqtəvidir və ətrafında sferik simmetrik elektrik sahəsi yaradır. Bu fərziyyələr çərçivəsində helium atomu sferik simmetrik elektrik sahəsində hərəkət edən ikielektronlu kvant sistemlə əvəz olunur.

Belə sistemin Şredinger tənliyi (82.1) ilə verilir.

$$(E - H_1 - H_2 - V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - W(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{s}_1, \vec{s}_2))\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z}) = 0 \quad (83.1)$$

Hər istənilən çoxelektronlu atomda spin-orbital qarşılıqlı təsir, elektronlar arasındakı Kulon qarşılıqlı təsirdən həmişə kifayət qədər kiçik olmur. Ona görə baxılan atom üçün (83.1) tənliyi həll olunanda spin-orbital qarşılıqlı təsirin nəzərə alınmamasının nə dərəcədə qanunu olması məsələsi əvvəlcədən dəqiqləşdirilməlidir.

İkielektronlu sistemin tam momentini tapmaq üçün, yəqin ki, elektronların \vec{L}_1 və \vec{L}_2 orbital, \vec{S}_1 və \vec{S}_2 spin momentlərini toplamaq lazımdır. Klasik fizikada onların toplanma ardıcılığının mənası yoxdur. Kvant mexanikasında isə bu məsələ böyük əhəmiyyətə malikdir.

Bu dörd moment iki yolla toplanı bilər. Birinci dəfə iki orbital və iki spin momentlərini toplayıb

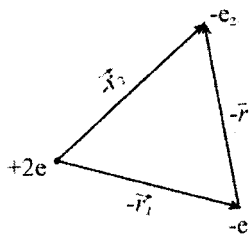
$$\begin{aligned} \vec{L} &= \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \\ \vec{S} &= \vec{S}_1 + \vec{S}_2, \end{aligned}$$

tam momenti onların cəmi kimi tapmaq olar:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (83.2)$$

Bu halda sistemin tam momenti, onun tam orbital momenti ilə tam spin momentinin additiv cəminə bərabər olur. Bu yalnız o zaman doğru olur ki, spin-orbital qarşılıqlı təsir elektronların nüvə ilə qarşılıqlı təsirindən kifayət qədər zəif olsun. Bu zaman sistemin orbital və spin momentləri ayrılıqda saxlanılır. Spin ilə orbit arasındakı belə rabitəyə *Ressel-Saunders* rabitəsi deyilir.

İkinci dəfə, əvvəlcə hər zərrəcik üçün orbital və spin momentlərini toplayıb



Şəkil 37. Helium atomunda qarşılıqlı təsir sxemi.

$$\vec{J}_1 = \vec{L}_1 + \vec{S}_1, \quad \vec{J}_2 = \vec{L}_2 + \vec{S}_2,$$

tam momenti onların cəmi kimi tapmaq olar.

$$\vec{J}_1 = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (83.3)$$

Belə rabitə (*jj*) *rabitə* adlanır. Bu halda spin-orbital rabitə güclü (Kulon qarşılıqlı təsir tərtibində) olur və sistemin orbital və spin momentləri yox, tam momenti saxlanır.

Birinci və ikinci yolla toplanan vektorlar arasındakı bucaqlar müxtəlif olduğundan, bu iki yolla tapılmış sistemin tam momentləri, ümumiyyətlə, bir-birinə bərabər olmur.

Atomda bu rabitələrdən hansının mövcud olması məsələsi iki elektron arasındakı Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi ilə spin-orbital qarşılıqlı təsir enerjisinin nisbi qiymətlərindən asılıdır. Baxılan atomda elektronların Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi $K \sim Z^2 R \hbar$ (bax: (75.1)) spin-orbital qarşılıqlı təsir enerjisi isə (75.10)-dan $E^{s.o.} \sim Z^4 R \hbar \alpha^2$ olduğundan Z -in kiçik qiymətlərində (yünlül atomlar) Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi $E^{s.o.}$ -dan xeyli böyük olur. Z -in böyük qiymətlərində isə, əksinə $E^{s.o.}$ –spin orbital qarşılıqlı təsiri Kulon qarşılıqlı təsire nisbətən daha mühüm rol oynayır.

Helium atomunda ($Z=2$), yəqin ki, *Ressel-Saunders* rabitəsi mövcuddur. Onun üçün (83.1) tənliyini həll etdikdə spin-orbital qarşılıqlı təsiri nəzərə almasaq, helium atomunun enerjisi, spinin orbital momentinə görə hansı istiqamətdə yönəlmiş olduğundan asılı olmayacaq və bu halda tənliyin həlli (82.2) ifadəsi, yəni koordinat və spin funksiyalarının hasili şəklində axtarıla bilər. Sıfırıncı yaxınlaşmada fəza koordinatlarından asılı funksiya (82.4), spin funksiyaları isə (82.11) tənliklərini ödəyir və axırıncılar üçün (82.20) və (82.21) ifadələri qüvvədə qalır.

Beləliklə, *Ressel-Saunders* rabitəsi mövcud olduqda, orbital və spin momentləri ayrılıqda toplandığından (83.1) tənliyinin həllini yalnız fəza koordinatlarından və yalnız spin dəyişənlərindən asılı olan funksiyaların

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z}) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) X(s_{1z}, s_{2z})$$

hasili şəklində axtarmaq olar. Bunu (83.1)-də yerinə yazsaq, $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ üçün

$$(\tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2))\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (83.1')$$

tənliyi alınır. Bu tənlik isə dəqiq həll olunmur. Helium atomu üçün onu əvvəlcə həyəcanlanma nəzəriyyəsinin köməyiylə həll edək.

İki elektron arasındakı $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ Kulon qarşılıqlı təsir enerjisini həyəcan-

lanma enerjisi qəbul edək. Bu enerji zərrəciklərin tam enerjisindən kifayət qədər kiçik olmasa da, bu yolla alınan nəzəri nəticələr kvant sistemin bütün xüsusiyyətlərini keyfiyyətcə özündə əks etdirir, kəmiyyətcə isə təcrübədən alınan uyğun nəticələrdən 15–20% fərqlənir.

Həyəcanlanma nəzəriyyəsinə əvvəlcə həyəcanlanmamış sistemin, yəni $V=0$ hala uyğun sıfırıncı yaxınlaşmada Şredinger tənliyinin həlləri məlum olmalıdır. Bu yaxınlaşmada (83.1') tənliyi (82.4) tənliyinin üzərinə düşdüyündən onun xüsusi həlləri (82.5) və (82.7) ilə verilmiş $\Psi_I^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ və $\Psi_{II}^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ funksiyalarının üzərinə düşür. Hər iki həll sistemin enerjisinin (82.6) ilə verilmiş

$$E^o = E_{n_1, n_2}^o = E_{n_1}^o + E_{n_2}^o$$

eyni bir məxsusi qiymətinə aiddir. Buradan çıxır ki, helium atomunun kvant hallarının mübadilə cırlaşma tərtibi ikiyə bərabərdir.

Helium atomunda elektronlardan birinin digərindən asılı olmayan hərəkəti Ze yüklü nöqtəvi zərrəciyin yaratdığı mərkəzi sahədəki hərəkəti kimi qəbul edilə bildiyindən, (82.5) və (82.7)-yə daxil olan $\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)$ və $\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)$ funksiyaları hidrogenəbənzər atomların dalğa funksiyası üzərinə düşür (bax: §40) və baxılan yaxınlaşmada helium atomunun enerjisi

$$E_{n_1, n_2}^o = -RhZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (83.4)$$

olar. Burada $n_1(n_1, l_1, m_1)$ və $n_2(n_2, l_2, m_2)$ – elektronların uyğun hallarının kvant ədədləridir.

Beləliklə, sıfırıncı yaxınlaşmada (83.1') tənliyinin ümumi həlli (82.8) ilə verilir:

$$\Psi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_1 \Psi_I^o + C_2 \Psi_{II}^o. \quad (83.5)$$

Helium atomu halında C_1 və C_2 əmsalları arasındakı əlaqəni və C_0 əmsalını tapmaq üçün (83.1') tənliyinə, yuxarıda dediyimiz kimi, həyəcanlanma metodunu tətbiq edək.

Sistemin hallarının cırlaşmış olduğu hala uyğun stasionar həyəcanlanma metoduna görə (83.5)-ə daxil olan C_1 və C_2 əmsalları

$$(E_{n_1, n_2}^o - E + V_{\alpha\alpha})C_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} V_{\alpha\beta} C_\beta = 0 \quad (83.6)$$

tənliyini ödəməlidir.

Helium atomunun kvant halları iki tərtibli mübadilə cırışmasına malik olduğundan burada α, β indeksləri 1, 2 qiymətlərini alır və (83.6) tənliyi C_1 və C_2 əmsallarına görə iki tənlikli bircins cəbri sistemə çevrilir:

$$\begin{aligned} (E_{n_1 n_2}^o - E + V_{11})C_1 + V_{12}C_2 &= 0, \\ (E_{n_1 n_2}^o - E + V_{22})C_2 + V_{21}C_1 &= 0 \end{aligned} \quad (83.7)$$

Burada

$$V_{\alpha\beta} = \int \Psi_{\alpha}^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi_{\beta}^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \quad (83.8)$$

həyəcanlanma enerji operatorunun matrisa elementləri, $\Psi_{\alpha}^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ isə $\alpha, \beta = I, II$ qiymətlərinə uyğun (82.5) və (82.7) ilə verilmiş Ψ_I^o və Ψ_{II}^o funksiyalardır.

(83.7) sisteminin qeyri-trivial (sıfırdan fərqli) həllərinin mövcud olması üçün C_1 və C_2 -nin əmsallarından düzəlmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır:

$$\begin{vmatrix} V_{11} - \varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (83.9)$$

burada

$$\varepsilon = E - E_{n_1 n_2}^o \quad (83.10)$$

əvəzi götürülmüşdür.

Ψ_I^o və Ψ_{II}^o funksiyalarını (82.5) və (82.7)-dən (83.8)-də yazsaq,

$$V_{11} = \int \Psi_I^o \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_I^o (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2 \int \frac{1}{r_{12}} \Psi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_1}(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \Psi_{n_2}(\vec{r}_2) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \quad (83.11)$$

$$V_{22} = \int \Psi_{II}^o \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_{II}^o (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2 \int \frac{1}{r_{12}} \Psi_{n_1}^*(\vec{r}_2) \Psi_{n_1}(\vec{r}_2) \Psi_{n_2}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_1) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)$$

və eləcə də

$$V_{12} = \int \Psi_I^o \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_{II}^o (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2 \int \frac{1}{r_{12}} \Psi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \Psi_{n_1}(\vec{r}_2) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \quad (83.12)$$

$$V_{21} = \int \Psi_{II}^* \frac{e^2}{r_{12}} \Psi_I^o(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2 \int \frac{1}{r_{12}} \Psi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \Psi_{n_1}(\vec{r}_2) \Psi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)$$

alınar.

$\vec{r}_1(x_1, y_1, z_1)$ və $\vec{r}_2(x_2, y_2, z_2)$ dəyişənlərinin inteqrallama oblastı eyni olduğundan (83.11) və (83.12)-də onları qarşılıqlı əvəz etdikdə inteqrallamanın nəticəsi dəyişməz, yəni

$$V_{11} = V_{22} \text{ və } V_{12} = V_{21} \quad (83.13)$$

olar.

(83.11) və (83.12) ifadələrinin fiziki mahiyyətini başa düşmək üçün

$$\rho_{n_1 n_1}(\vec{r}_1) = \Psi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_1}(\vec{r}_1), \quad \rho_{n_2 n_2}(\vec{r}_2) = \Psi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \Psi_{n_2}(\vec{r}_2) \quad (83.14)$$

$$\rho_{n_1 n_2}(\vec{r}_1) = \Psi_{n_1}^*(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_1), \quad \rho_{n_2 n_1}(\vec{r}_2) = \Psi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \Psi_{n_1}(\vec{r}_2)$$

işarələrini daxil edək. Burada $\rho_{n_1 n_1}(\vec{r}_1)$ və $\rho_{n_2 n_2}(\vec{r}_2)$ uyğun olaraq $\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)$ və $\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)$ hallarında olan elektronların fəzada paylanma ehtimal sıxlıqlarını, $\rho_{n_1 n_2}(\vec{r}_1)$ və $\rho_{n_2 n_1}(\vec{r}_2)$ isə qismən Ψ_{n_1} və qismən də Ψ_{n_2} və əksinə hallarda olan elektronların fəzada paylanma ehtimal sıxlıqlarını ifadə edir. Bu axırıncılar *mübadilə sıxlıqları* adlanır.

(83.14)-ə əsasən (83.10) və (83.11) ifadələrini

$$K = V_{11} = V_{22} = e^2 \int \frac{1}{r_{12}} \rho_{n_1 n_1}(\vec{r}_1) \rho_{n_2 n_2}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \quad (83.15)$$

$$A = V_{12} = V_{21} = e^2 \int \frac{1}{r_{12}} \rho_{n_1 n_2}(\vec{r}_1) \rho_{n_2 n_1}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)$$

kimi yazmaq olar. (83.15)-ə daxil olan K inteqralı, əyani olaraq, fəzada $\rho_{n_1 n_1}^e = e \rho_{n_1 n_1}$ və $\rho_{n_2 n_2}^e = e \rho_{n_2 n_2}$ sıxlıqları ilə paylanmış iki elektrik yükü arasındakı Kulon qarşılıqlı təsir enerjisini ifadə edir. Buradakı A inteqralını isə belə əyani şəkildə mənalandırmaq mümkün deyildir. Formal şəkildə isə ona, yükləri $e \rho_{n_1 n_2}$ və $e \rho_{n_2 n_1}$ sıxlıqları ilə paylanmış iki elektrik yükünün qarşılıqlı təsir enerjisi kimi baxmaq olar. Bu enerji elektronların ətalət mərkəzlərinin koordinatlarının yerdəyişməsi (mübadiləsi) nəticəsində meydana çıxdığından ona *mübadilə enerjisi* deyilir.

Qeyd edək ki, mübadilə enerjisinin klassik analoqu yoxdur. Onun mövcud olması kvant mexanikasının ən əsas və yeni nəticələrindən biridir. Digər tərəfdən mübadilə enerjisinə hec də zərrəciklər arasındakı yalnız Kulon qarşılıqlı təsirin nəticəsi kimi baxmaq olmaz.

Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi yerində istənilən başqa bir təbiətli klassik $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ qarşılıqlı təsir enerjisi durmuş olsaydı da mübadilə enerjisi meydana çıxardı. Beləliklə, mübadilə enerjisi kvant mexanikasının əsas prinsiplərindən biri olan seçilməzlik prinsipindən bilavasitə çıxan nəticədir, ona görə də, o yalnız kvant təbiətlidir.

(83.15) əvəzləri əsasında (83.9) determinantı

$$\begin{vmatrix} K - \varepsilon & A \\ A & K - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (83.9')$$

şəklində yazaq. Onda

$$(K - \varepsilon)^2 - A^2 = 0; \quad \varepsilon = K \pm A \quad (83.16)$$

olar. Elektronların qarşılıqlı təsirinin helium atomunun enerjisinə verdiyi əlavə üçün $\varepsilon = \varepsilon_1 = K + A$ və $\varepsilon = \varepsilon_2 = K - A$ kimi iki qiymət alınır. ε -nin bu qiymətlərinə uyğun C_1 və C_2 əmsalları arasındakı əlaqəni tapmaq üçün (83.7) tənliklərini

$$\begin{aligned} (K - \varepsilon)C_1 + AC_2 &= 0 \\ (K - \varepsilon)C_2 + AC_1 &= 0 \end{aligned} \quad (83.7')$$

kimi yazaq. (83.7') sistemində ε -nin əvəzində onun ε_1 və ε_2 köklərini yazsaq, $\varepsilon = \varepsilon_1$ -də $C_1 = C_2 = C_o$, $\varepsilon = \varepsilon_2$ isə $C_1 = -C_2 = C_o$ olar. Bunlara uyğun olaraq birinci halda (83.5) və (83.10)-dan

$$\Psi^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_o(\Psi_I^o + \Psi_{II}^o), \quad E^S = E_{n_1 n_2}^o + \varepsilon_1 \quad (83.17)$$

ikinci halda isə

$$\Psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C_o(\Psi_I^o - \Psi_{II}^o), \quad E^A = E_{n_1 n_2}^o + \varepsilon_2 \quad (83.18)$$

olar. C_o əmsalını tapmaq üçün Ψ^S və Ψ^A funksiyalarının normalanma şərtindən istifadə olunur:

$$\int \Psi^{*S} \Psi^S (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = \int \Psi^{*A} \Psi^A (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = 1$$

buradan $2C_o^2 = 1$, və $C_o = \frac{1}{\sqrt{2}}$ olur. Beləliklə

$$\Psi^S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n_1}(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_2) + \Psi_{n_1}(\vec{r}_2) \Psi_{n_2}(\vec{r}_1)), \quad (83.19)$$

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n_1}(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_2) - \Psi_{n_1}(\vec{r}_2) \Psi_{n_2}(\vec{r}_1)).$$

Seçilməzlik prinsipindən alınır ki, eyni fermionlardan təşkil olunmuş sistemin halları zərrəciklərin və spin koordinatlarının yerdəyişməsinə görə antisimmetrik funksiya ilə təsvir olunmalıdır, yəni $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z})$ funksiyası üçün

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z}) &= \chi \Psi = -\chi(s_{2z}, s_{1z}) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\chi(s_{1z}, s_{2z}) \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \\ &= -\Psi(s_{2z}, s_{1z}, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \end{aligned}$$

bərabərliyi ödənməlidir.

Helium atomu iki fermionlu (nüvənin tərkibi nəzərə alınmadıqda) sistem olduğundan onun mümkün kvant hallarını təsvir edən ümumi funksiya \vec{r}_1, \vec{r}_2 və s_{1z}, s_{2z} dəyişənlərinin yerdəyişməsinə görə antisimmetrik olmalıdır.

Bu iki halda mümkündür: a) elektronların ətalət mərkəzinin koordinatlarından asılı funksiya simmetrik, spin funksiyası isə antisimmetrik:

$$\Psi_1^A = \Psi^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi^A(s_{1z}, s_{2z}), \quad E^S = E_{n_1 n_2}^o + K + A \quad (83.20)$$

b) koordinatlardan asılı funksiya antisimmetrik, spin funksiyası isə simmetrik:

$$\Psi_2^A = \Psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi^S(s_{1z}, s_{2z}), \quad E^A = E_{n_1 n_2}^o + K - A \quad (83.21)$$

Bundan qabaqkı paragrafda göstərmişdik ki, (82.20) antisimmetrik spin funksiyası $\chi_4 = \chi^A$ iki fermionlu sistemin tam spininin və onun z oxu boyunca proyeksiyasının sıfır bərabər olduğu hala uyğundur. Deməli, helium atomunun Ψ_1^A funksiyası ilə təsvir olunan hallarda elektronların spinləri

antiparalel yönəlmiş olur. Belə hallara malik helium atomu *parahelium* adlanır.

Eynilə bunun kimi, (82.21) simmetrik spin funksiyaları iki fermionlu sistemin spininin vahidə bərabər olan hala uyğundur. Yəqin ki, helium atomunun Ψ_2^A ilə təsvir olunan hallarında elektronların spinləri paralel olub, tam spin vahidə bərabərdir: $S=1$; $\chi^S = \chi_{1-\theta}$ uyğun halda tam spinin z oxu üzrə proyeksiyası müsbət vahid ($S_z=1$); $\chi^S = \chi_2$ halında mənfi vahid ($S_z=-1$) və $\chi^S = \chi_3$ halında isə sıfır ($S_z=0$) bərabərdir. Axırıncı halda atomun spini z oxuna perpendikulyar yönəlmiş olur. Belə hallara malik helium atomu *ortohelium* adlanır.

Parahelium halında fəza koordinatlarından asılı simmetrik funksiya yeganə bir χ_4 spin funksiyasına vurulur. Atomun $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ tam momentinə uyğun J kvant ədədi, momentlərin toplanma qaydasına görə (§73) $J=L+S$, $J=L+S-1, \dots, J=L-S$ qiymətlərini aldığından, $S=0$ olanda $J=L$ kimi yeganə bir qiymət alır. Ona görə də spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsirlər nəzərə alındıqda belə (83.17) ilə verilmiş E^s səviyyəsi parçalanmır. Helium atomunun belə halları *singlet hallar* adlanır və xarici maqnit sahəsinin intensivliyinin istənilən qiymətində parahelium üçün normal Zeyeman effekti (bax: §77) müşahidə olunur.

Ortoheliumun hallarında isə atomun spini $S=1$ olduğundan J kvant ədədi $J=L+1, L, L-1$ kimi üç qiymət alır. L -in verilmiş qiymətində ortoheliumun səviyyəsi cırlaşmış olur. Spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsirlər nəzərə alındıqda bu cırlaşma ümumiyyətlə qismən (relyativistik effektlər nəzərə alınmadıqda) ortadan götürülür və ortoheliumun E^A səviyyəsi üç səviyyəyə parçalanır. Helium atomunun belə halları *triplet hallar* adlanır.

Lakin qeyd edək ki, belə parçalanma elə ortohallarda baş verir ki, onlarda atom orbital momentə malik olsun. Ortoheliumun elektronları $(n_1s)^1 (n_2s)^1$ kimi hallarda olanda atom orbital momentə malik olmur. Atomda müəyyən (fiksə edilmiş) istiqamət olmadığından spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsirlər belə halların parçalanmasına gətirmir. $(1s)^1 (2p)^1$ və bunun kimi orbital momentə malik bütün başqa hallarda atomda müəyyən istiqamət meydana çıxır və onun spin momentinin bu istiqamətdəki proyeksiyasının müxtəlif qiymətlərinə (L -in verilmiş qiymətində) enerjinin də müxtəlif qiymətləri uyğun gəlir və baxılan səviyyə parçalanır. Ortoheliumun $(n_1s)^1 (n_2s)^1$ hallara malik olmasına baxmayaraq, zəif maqnit sahəsində ortohelium üçün anomal Zeyeman effekti müşahidə olunur (bax: §78).

Beləliklə, yuxarıda dediklərimizdən belə çıxır ki, elektronların qarşılıqlı təsiri nəticəsində helium atomunun enerjisində olan düzəliş, spinin qiymət və istiqamətindən asılı olur. Spinin qiymətindən və onun orbital momentə nəzərən yönündən asılı olaraq atom ya *singlet* (parahelium) və ya da *triplet* (ortohelium) hallara malik olur.

Müxtəlif hallar üçün aparılan hesablamalar K və A inteqrallarının həmişə müsbət olduğunu göstərir. Zərrəciklərin Kulon qarşılıqlı təsiri nəticəsində enerjiyə olan ε_1 və ε_2 düzəlişləri isə yalnız A -nın qabağındakı işarə ilə fərqlənir. Enerjinin (83.20) və (83.21)-də verilmiş ifadələrindən görünür ki, elektronların (n, l, m) kvant ədədləri ilə təyin olunan eyni bir halında para- və ortoheliumun enerjiləri müxtəlifdir. Bu $(1s)^1 (2p)^1$ halı üçün aparılmış hesablamalardan daha aydın görünür.

Doğrudan da, ortoheliumun $\Psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ koordinat funksiyası $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ -də sıfıra bərabər olur. Deməli, elektronlar ortoheliumda paraheliumundakına nisbətən bir-birindən daha uzaq məsafədə yerləşir. Bu isə elektronlar arasındakı dəf qüvvəsinin zəifləməsinə, yəni enerjinin azalmasına səbəb olur. Deməli, spinləri paralel olan elektronlar arasında meydana çıxan qarşılıqlı təsir spinləri antiparalel olan haldakına nisbətən zəifdir. Bu da yəqin ki, seçilməzlik prinsipindən çıxan əsas nəticələrdən biridir.

Qeyd edək ki, hər iki növ helium qapalı sistem təşkil edir, yəni onlar biri digərinə keçə bilmir.

§81-də isbat etmişdik ki, eyni zərrəciklərdən təşkil olunmuş sistemin Hamilton operatoru zərrəciklərin ətalət mərkəzinin koordinatlarının yerdəyişməsinə görə simmetrik qaldıqda, başlanğıc anda sistem simmetrik (antisimmetrik) funksiya ilə təsvir olunarsa, istənilən sonrakı anda da o, simmetrik (antisimmetrik) funksiya ilə təsvir olunacaqdır.

Baxılan halda spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsirlər nəzərə alınmır.

Helium atomunun \tilde{H} Hamilton operatoru nəinki xarici sahə olmadıqda, hətta xarici şüalanma (elektromaqnit) sahəsi olduqda belə simmetriklilik şərtini saxlayır, çünki xarici şüalanma sahəsi elektronlara eyni şəkildə təsir edir.

Doğrudan da, şüalanma sahəsinin elektronun yükü ilə qarşılıqlı təsir enerjisi $E^e = ea\mathcal{E}$ bərabərdir (burada a —atomun ölçüsü, e —elektrik yükü, \mathcal{E} —şüalanma sahəsinin elektrik vektorudur). Həmin sahənin elektronun spin

maqnit momenti ilə təsir enerjisi isə $E^m = -\mu\mathcal{H} = \frac{e\hbar}{2mc}\mathcal{H}$ -dir. Şüalanma

sahəsi üçün $|\mathcal{E}| = |\mathcal{H}|$ olduğundan

$$\frac{E^m}{E^e} \sim \frac{\hbar}{2mca}$$

olar (m —elektronun kütləsi, c —ışıq sürətidir). Atomda elektronun impulsunun tərtibi $p = m\nu = \hbar k \sim \frac{\hbar\omega}{c} \sim \frac{2\pi\hbar}{\lambda c}$, λ —atomda elektronun de-Broyl dal-

ğasının uzunluğudur. λ atomun ölçüsü tərtibində ($\lambda \sim a$) olduğundan $mv \sim \frac{\hbar}{a}$

və buradan $v \sim \frac{\hbar}{ma}$ elektronun atomdakı sürəti olur. Bunu yuxarıda nəzərə alsaq,

$$\frac{E^m}{E^e} \sim \frac{v}{c} \sim \frac{1}{100}.$$

Şüalanma sahəsinin spin maqnit momenti ilə qarşılıqlı təsiri, onun elektrik yükü ilə olan qarşılıqlı təsirindən təxminən yüz dəfə kiçik olması göstərir ki, şüalanma sahəsinin spinin istiqamətini dəyişə bilməsi ehtimalı olduqca kiçikdir. Deməli, şüalanma sahəsinin təsiri ilə ortoheliumu parahe-liuma və əksinə çevirmək, demək olar ki, mümkün deyildir.

İndi də helium atomunun əsas halının orto- və parahallar qrupunun hansına aid olduğunu müəyyən edək. Bunun üçün fərz edək ki, elektronların hər ikisi eyni bir $n_1 = n_2$ halındadır. $\Psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ koordinat funksiyası

$$\Psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\Psi^A(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (83.22)$$

şərtini ödədiyinə görə $\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r}$ nəticəsində $\Psi^A = 0$ olur. Başqa sözlə, Ψ^A üçün $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ nöqtəsi düyün nöqtəsidir. Bildiyimiz kimi, kvant mexaniki sistemin əsas halının dalğa funksiyası düyün nöqtəsinə malik deyildir. Deməli, heliumun əsas halı ortohallar qrupuna yox, parahallar qrupuna aiddir. Parahallarda elektronların spinləri antiparalel olduğundan elektronlar (n, l, m) kvant ədədləri eyni olan halda ola bilər (onların halı dördüncü $m_s = \pm \frac{1}{2}$ kvant ədədi ilə fərqlənir).

(n, l, m) hallarından ən kiçik enerjiyə malik olan hal (1,0,0), yaxud 1s halıdır. Deməli, heliumun əsas halı (1s)¹ (1s)¹ halı olmalıdır. Yəqin ki, bu hal $\Psi_{11}^S = \Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{1s}(\vec{r}_2)$ funksiyası ilə təsvir olunur.

Ortoheliumun hər iki elektronu helium atomunun (1s)¹ (1s)¹ əsas halında ola bilmir (onların bütün dörd n, l, m, m_s kvant ədədləri eynidir). Ona görə də ortoheliumun bütün halları həyəcanlanmış hallar olur. Onlardan minimum enerjiyə malik olanı (1,0,0) və (2,0,0) uyğun və $\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{2}} \times (\Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{2s}(\vec{r}_2) - \Psi_{1s}(\vec{r}_2)\Psi_{2s}(\vec{r}_1))$ funksiyası ilə təsvir olunan (1s)¹ (2s)¹ halıdır. Helium atomu uzun müddət bu halda qala bilər, belə ki, yuxarıda

qeyd etdiyimiz kimi, atomun bu haldan $(1s)^1(1s)^1$ əsas halına keçməsi üçün elektronlardan birinin spini istiqamətini dəyişməlidir, belə keçidin ehtimalı isə xarici təsirsiz olduqca cüzdür. Buna görə helium atomunun orto hallarda yaşama müddəti kifayət qədər böyükdür və onlar *metastabil hallar* adlanır. Beləliklə, *sinqlet* və *triplet* hallarda olan helium atomlarına iki müxtəlif növ qaz kimi baxmaq olar.

Sinqlet hallarda olan helium atomları spin maqnit momentinə malik olmadığına görə onlar *diamaqnit qaz*, triplet hallarda olan atomlar spin maqnit momentinə malik olduğuna görə isə – *paramaqnit qaz* əmələ gətirir.

Lakin xarici təsir vasitəsilə, məsələn, helium qazını kifayət qədər böyük enerjili elektronlar dəstəsi ilə bombardman etdikdə, yəqin ki, paraheliumu orthoheliuma və əksinə çevirmək olar. Bu halda düşən elektronlardan biri heliumun iki elektronu ilə eyni üç fermionlu sistem təşkil edir. Belə sistemə seçilməzlik prinsipini tətbiq etsək, düşən elektron spini onun spininin əksinə yönəlmiş atomun elektronlarından birini vurub çıxararaq, atomda onun yerini tuta bilər və bu da paraheliumun orthoheliuma və əksinə çevilməsinə gətirər.

§84. Helium atomunun əsas hali

Helium atomunun hər iki elektronu onun $(1s)^1(1s)^1$ əsas halında olarsa, (82.5) və (82.7) ilə verilmiş Ψ_I^o və Ψ_{II}^o funksiyaları bir-birinin üzərinə düşür və bu hal $\Psi^S = \Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{1s}(\vec{r}_2)$ simmetrik funksiya ilə təsvir olunur. İki fermionlu sistemin antisimmetrik $\Psi^A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, s_{1z}, s_{2z})$ funksiyasını almaq üçün $\Psi^S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ -i (82.21) ilə verilmiş antisimmetrik $\chi_4(s_{1z}, s_{2z})$ – spin funksiyasına vurmaq lazımdır. χ_4 isə sistemin tam spini sıfıra bərabər olan parahala uyğundur. $(1s)^1(1s)^1$ haldan fərqli digər hallarda elektronlar olmadığından (83.15)-ə daxil olan $\rho_{n_1 n_2}$ və $\rho_{n_2 n_1}$ ehtimal sıxlıqları sıfıra bərabər olur, mübadilə enerjisi ortaya çıxmır və helium atomunun əsas halının enerjisi (83.20) və ya (83.21)-dən

$$E^S = E^A = E_{1s}^o + E_{1s}^o + K \quad (84.1)$$

ifadəsi ilə təyin olunur.

Elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda elektronların hər birinin ayrılıqda hərəkətinə hidrogenəbənzər atomdakı hərəkəti kimi baxmaq olar və onun $1s$ halının enerjisi (75.1)-ə əsasən

$$E_{1S}^o = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} = -\frac{Z^2e^2}{2a}, \quad (84.2)$$

dalğa funksiyası isə (40.40)-dan

$$\Psi_{1S}^o(\vec{r}) = \left(\frac{4Z}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a}} Y_{00}(\theta, \varphi) = R_{10}(r)Y_{00} \quad (84.3)$$

olar, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ – Borun birinci orbitinin radiusudur.

İki elektron arasındakı Kulon qarşılıqlı təsir enerjisinə gəldikdə isə, o, (83.15)-dən

$$K = e^2 \int |\Psi_{1S}(r_1)|^2 |\Psi_{1S}(\vec{r}_2)|^2 \frac{(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)}{r_{12}} \quad (84.4)$$

kimi təyin olunur. (84.4) inteqralları hesablamak üçün $\frac{1}{r_{12}}$ -ni sferik funksiyalar üzrə sıraya ayırıq.

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \begin{cases} \frac{4\pi}{r_1} \sum_{l,m} \frac{1}{2l+1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2), & r_1 \gg r_2 \\ \frac{4\pi}{r_2} \sum_{l,m} \frac{1}{2l+1} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2), & r_2 \gg r_1 \end{cases} \quad (84.5)$$

burada θ_1, φ_1 və θ_2, φ_2 – uyğun olaraq \vec{r}_1 və \vec{r}_2 vektorlarının polyar bucaqlarıdır. (84.3) və (84.5) ifadələrini (84.4)-də yerinə yazıb, bucaqlar üzrə inteqrallar alsaq, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ funksiyalarının orto-normallama şərtindən $l=0, m=0$ -a uyğun hədlərdən başqa sıranın bütün hədləri sıfıra bərabər olar. Onda (84.4)

$$K = \frac{4e^2}{\pi} \left(\frac{Z}{a}\right)^6 \int_0^\infty e^{-\frac{2Zr_1}{a}} \left[\frac{1}{r_1} \int_0^\eta e^{-\frac{2Zr_2}{a}} r_2^2 dr_2 + \int_\eta^\infty e^{-\frac{2Zr_2}{a}} r_2^2 dr_2 \right] r_1^2 dr_1 \quad (84.6)$$

şəklə düşər.

Bu inteqralları hissə-hissə açaraq, elektronların Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi üçün

$$K = \frac{5 Ze^2}{8 a} \quad (84.7)$$

qiymətini alaraq. (84.2) və (84.7)-ni (84.1)-də yerinə yazanda, həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasında helium atomunun əsas halının enerjisi üçün

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{a} + \frac{5 Ze^2}{8 a} = -\frac{Ze^2}{a} \left(Z - \frac{5}{8} \right) \quad (84.8)$$

qiyməti alınır.

İndi də helium atomunun ionizasiya enerjisini, yəni atomun birinci orbitindən ($1s$ halından) elektronu qoparıb çıxarmaq üçün lazım olan enerjini tapaq. Bir dəfə ionizasiya olunmuş helium atomu hidrogenəbənzər atoma çevrilir, hidrogenəbənzər atomda əsas halda olan elektronun nüvə ilə rəbitə enerjisi E_{1s}^o -a (bax (84.2)) bərabərdir. Helium atomunun əsas halının E enerjisi isə (84.8) ilə verilir. İonizasiya enerjisi I atoma kənarından verildiyindən o müsbət və onun qiyməti E_{1s}^o ilə E -nin fərqiə bərabər olmalıdır:

$$I = E_{1s}^o - E = \frac{Ze^2}{2a} \left(Z - \frac{5}{8} \right). \quad (84.9)$$

Helium atomunda $Z=2$ olduğundan onun ionizasiya enerjisi üçün nəzəri alınmış

$$I^{nəz} = 0,75 \frac{e^2}{a} \quad (84.10)$$

qiyməti, təcrübədə yaxşı məlum olan

$$I^{təc} = 0,9 \frac{e^2}{a} \quad (84.11)$$

qiymətindən xeyli fərqlənir. Bunun səbəbi K həyəcanlanma enerjisinin E_{1s}^o enerjisindən kifayət qədər kiçik olmamasıdır $\left(\frac{K}{E_{1s}^o} \approx \frac{1}{3} \right)$. Buna görə də həyəcanlanma nəzəriyyəsinin baxılan hala tətbiqi kobud xarakter daşıyır.

Həyəcanlanma nəzəriyyəsinin metoduna nisbətən daha dəqiq metodlar həyəcanlanmamış halın tənliyində elektronların qarşılıqlı təsirini nəzərə almağa imkan verir və bu tənlik elə seçilir ki, onda sıfırıncı yaxınlaşmada dəyişənlərə ayırmaq əməliyyatını aparmaq mümkün olsun.

Belə metodlardan biri *Ritsin variasiya* metodudur (bax: §36). Variasiya metodu vasitəsilə alınan nəticələr o zaman daha dəqiq olur ki, qarşılıqlı təsir nəticəsində ortaya çıxan əlavə enerji sıfırıncı yaxınlaşmaya uyğun enerji tərtibində olsun. Helium atomunda (83.15) ilə verilmiş K qarşılıqlı təsir enerjisi (82.6) ilə verilmiş E^0 enerjisi tərtibindədir. Ona görə də həyəcanlanma nəzəriyyəsi təcrübəyə uyğun nəticəyə gətirə bilmir.

İndi də variasiya metodu vasitəsilə helium atomunun əsas halının enerjisini və onun dalğa funksiyasını tapaq. Yuxarıda qeyd etdik ki, helium atomunun əsas halında hər iki elektron $(1s)^1 (1s)^1$ halında olur. Sıfırıncı yaxınlaşmada elektronların ayrılıqda hərəkəti hidrogenəbənzər atomlardakı hərəkəti xatırlatdığından, əsas halın dalğa funksiyası $\Psi_{1s}(\vec{r}_1)$ və $\Psi_{1s}(\vec{r}_2)$ hidrogen atomunun dalğa funksiyalarının hasili şəklində götürülə bilər. Bu hasilə α variasiya parametrini daxil edib, normalandırılmış sınaq funksiyasını (82.3) funksiyasına əsasən

$$\Psi(\alpha) = \Psi_{1s}(\vec{r}_1)\Psi_{1s}(\vec{r}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)} \quad (84.12)$$

şəklində seçmək və $J(\alpha)$ funksionalını

$$J(\alpha) = \int \Psi^* \tilde{H} \Psi (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \quad (84.13)$$

inteqralından hesablamaq olar.

İki fermionlu sistemin Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \tilde{H}_1(\vec{r}_1) + H_2(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (84.14)$$

və

$$\tilde{H}_i = \frac{p_i^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_i} \quad (i=1,2), \quad V = \frac{e^2}{r_{12}} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

olduğundan $J(\alpha)$ funksionalı

$$J(\alpha) = \int \Psi^*(\vec{r}_1) \tilde{H}_1 \Psi(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1) + \int \Psi^*(\vec{r}_2) \tilde{H}_2 \Psi(\vec{r}_2)(d\vec{r}_2) +$$

$$+ e^2 \int |\Psi(\vec{r}_1)|^2 |\Psi(\vec{r}_2)|^2 \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (84.15)$$

şəklinə düşər. (84.15)-nin birinci həddində $\Psi(\vec{r}_2)$ və ikinci həddində isə $\Psi(\vec{r}_1)$ funksiyaları üçün normalanma şərtinin ödənilməsi nəzərə alınmışdır. Birinci və ikinci inteqrallar §36-da hesablanmış, axırıncı inteqralın qiyməti isə (84.7) ilə verilmişdir. Beləliklə, $J(\alpha)$ üçün

$$J(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{\mu} - 2\alpha Ze^2 + \frac{5}{8} \alpha e^2 \quad (84.16)$$

ifadəsi alınır.

α parametrisinin sistemin enerjisinin minimumuna uyğun qiyməti $\frac{dJ(\alpha)}{d\alpha} = 0$ ekstremallıq şərtindən tapılır:

$$\alpha_o = \frac{\mu e^2}{\hbar^2} \left(Z - \frac{5}{16} \right) = \frac{1}{a} \left(Z - \frac{5}{16} \right) \quad (84.17)$$

və buradan helium atomunda elektron sisteminin minimum enerjisi

$$E^{min} = J(\alpha_o) = -\frac{e^2}{a} \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 \quad (84.18)$$

və uyğun dalğa funksiyası

$$\Psi = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z^*}{a} \right)^3 e^{-\frac{Z^*(r_1+r_2)}{a}} \quad (84.19)$$

olur, burada

$$eZ^* = e \left(Z - \frac{5}{16} \right) \quad (84.20)$$

nüvənin effektiv yükü adlanır.

E^{min} ilə həyəcanlanma nəzəriyyəsinə heliumun əsas halının E enerjisi üçün (84.8) qiyməti arasındakı fərqin meydana çıxmasına səbəb, yəqin ki,

elektronlardan birinin digərinə təsiri nəticəsində nüvənin müsbət yükünün ekranlaşdırılması olar.

Variasiya metodunda I ionizasiya enerjisi üçün, (84.9)-ya oxşar olaraq, (84.2) və (84.18)-dən

$$I = E_{1s} - E^{\min} = \frac{e^2}{2a} \left(Z^2 - \frac{5}{4}Z + \frac{25}{128} \right) \quad (84.21)$$

qiyməti alınır. (84.21)-dən helium atomunun ($Z=2$) ionizasiya enerjisinin nəzəri qiyməti

$$I \approx 0,85 \frac{e^2}{a} \quad (84.22)$$

olar. Bu qiymət (84.11) ilə verilmiş təcrübi qiymətə xeyli yaxındır.

§85. Helium atomunun həyəcanlanmış halları

Neytral helium atomunun elektronlardan birinin $1s$ halında, ikincisinin isə ixtiyari (n, l) həyəcanlanmış halda olduğunu fərz edək. Digər tərəfdən qəbul edək ki, $1s$ halında olan elektron nüvənin bir yükünü tam ekranlaşdırır. Beləliklə, sıfırıncı yaxınlaşmada $1s$ elektronu nüvənin $+2e$ yükü sahəsində, (n, l) halında olan elektron isə nüvənin bir $+e$ yükü sahəsində hərəkət edəcəkdir. Onda $1s$ halındakı elektron üçün

$$\check{H}_1 \Psi_{1s}(\vec{r}_1) = E_{1s} \Psi_{1s}(\vec{r}_1), \quad \check{H}_1 = \frac{\check{p}_1^2}{2\mu} - \frac{2e^2}{r_1} \quad (85.1)$$

(n, l) halındakı elektron üçün isə

$$\check{H}_2 \Psi_{nlm}(\vec{r}_2) = E_n \Psi_{nlm}(\vec{r}_2), \quad \check{H}_2 = \frac{\check{p}_2^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r_2} \quad (85.2)$$

tənlikləri ödənilər, hər iki tənlik hidrogenəbənzər atomların tənlikləri olduğundan, onların həlləri §40-a görə

$$\begin{aligned} \Psi_{1s} &= R_{10}(r_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \\ \Psi_{nlm} &= R_{nl}(r_2) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) \end{aligned} \quad (85.3)$$

olar. Belə helium atomunun

$$\left(\frac{\tilde{p}_1^2}{2\mu} - \frac{2e^2}{r_1} + \frac{\tilde{p}_2^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (85.4)$$

tənliyinin sıfırncı yaxınlaşmada həlli olan Ψ funksiyası (85.3)-dəki iki funksiyanın simmetrikləşdirilmiş hasilinə bərabər olar:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{1s}(r_1) \Psi_{nlm}(r_2) + \eta \Psi_{1s}(\vec{r}_2) \Psi_{nlm}(\vec{r}_1)) \quad (85.5)$$

Parahelium üçün $\eta=1$, ortahelium üçün isə $\eta=-1$ -dir. Ψ_{1s} və Ψ_{nlm} funksiyaları vahidə normallaşdırılmışdır:

$$\int \Psi_{1s}^* \Psi_{1s}(d\vec{r}_1) = 1; \int \Psi_{nlm}^* \Psi_{nlm}(d\vec{r}_2) = 1. \quad (85.6)$$

$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ funksiyasının (85.4) tənliyini nisbətən yaxşı ödəməsi üçün E enerjisi lazımi şəkildə təyin olunmalıdır. Bunun üçün (85.4) tənliyini soldan $\frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{1s}^+(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^+(\vec{r}_2)$ funksiyasına vurub, zərrəciklərin fəzaları üzrə inteqrallayaq, (85.6) münasibətlərini nəzərə alsaq,

$$E = \int \Psi_{1s}^+(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^+(\vec{r}_2) (\tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 - \frac{e^2}{r_2} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) (d\vec{r}_1 d\vec{r}_2) \quad (85.7)$$

burada $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{e^2}{r_{12}} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ elektronlar, $-\frac{e^2}{r_2}$ isə ekranlaşdırılmış nüvə ilə ikinci elektron arasındakı qarşılıqlı təsir enerjisidir.

Burada Ψ onun (85.5) ifadəsi ilə əvəz ediləndən sonra alınan inteqrallar (85.1), (85.2) tənlikləri və (85.6) şərtləri əsasında qiymətləndirilə bilər:

$$\int \Psi_{1s}^+(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^+(r_2) \tilde{H}_1 \Psi_{1s} \Psi_{nlm}(\vec{r}_2) (d\vec{r}_1) (d\vec{r}_2) = \int \Psi_{1s}^+ \tilde{H}_1 \Psi_{1s}(d\vec{r}_1) = E_{1s} \quad (85.8a)$$

$$\int \Psi_{1s}^+(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^+(r_2) \tilde{H}_2 \Psi_{nlm}(\vec{r}_2) \Psi_{1s}(\vec{r}_1) (d\vec{r}_1) (d\vec{r}_2) = \int \Psi_{nlm}^+(\vec{r}_2) \tilde{H}_2 \Psi_{nlm}(\vec{r}_2) (d\vec{r}_2) = E_n \quad (85.8b)$$

$$\int \Psi_{1S}^*(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^*(r_2) \frac{e^2}{r_2} \Psi_{1S}(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}(\vec{r}_2) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = \int \Psi_{nlm}^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_2} \Psi_{nlm}(\vec{r}_2) = \bar{E}^{not}, \quad (85.8v)$$

$$\int \Psi_{1S}^+ \Psi_{nlm}^+(r_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi_{1S}(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}(\vec{r}_2) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = K \quad (85.8q)$$

$$\begin{aligned} \int \Psi_{1S}^*(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^*(\vec{r}_2) \tilde{H}_1 \Psi_{1S}(\vec{r}_2) \Psi_{nlm}(\vec{r}_1) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = \\ = \int \Psi_{1S}^+(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^+(\vec{r}_2) \tilde{H}_2 \Psi_{1S}(\vec{r}_2) \Psi_{nlm}(\vec{r}_1) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = 0, \end{aligned} \quad (85.8d)$$

$$\int \Psi_{1S}^+(\vec{r}_1) \Psi_{nlm}^+(r_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi_{1S}(\vec{r}_2) \Psi_{nlm}(\vec{r}_1) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = A. \quad (85.8e)$$

Burada K -elektronlar arasındakı Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi, A isə mübadilə enerjisidir. Bir elektronlu hallar üçün virial teoremi (bax: §18)

$$\bar{E}^{not} = 2E_n \quad (85.9)$$

münasibətinə gətirdiyindən sistemin tam enerjisi üçün

$$E = E_{1S} + 3E_n + K + \eta A \quad (85.10)$$

ifadəsi alınır.

(85.1) və (85.2) tənlikləri hidrogenəbənzər atomların tənlikləridir. (85.1)-də nüvə yükü $eZ=2e-y_0$, (85.2)-də isə $eZ=e-y_0$ bərabərdir. Belə atomların enerji səviyyələrinin $E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}$ ifadəsindən E_{1S} və (85.8b)-dəki E_n üçün uyğun olaraq

$$E_{1S} = -\frac{4me^4}{2\hbar^2} = -\frac{2e^2}{a} \quad (85.11)$$

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{e^2}{2n^2 a}$$

qiymətləri alınır. E_{1S} və E_n -in qiymətlərini E -nin (85.10) ifadəsində yerinə yazsaq,

$$E = -\frac{2e^2}{a} - \frac{3e^2}{2\hbar^2 a} + K + \eta A \quad (85.12)$$

alarıq. Bura daxil olan K və A inteqrallarını hesablamaq üçün $\frac{1}{r_{12}}$ -nin (84.5) ilə verilmiş sırasından istifadə edək.

K -nın (85.8q) ifadəsində bucaqlar üzrə götürülmüş inteqrallar l' və m' -in yalnız $l' = 0$, $m' = 0$ qiymətlərində sıfırdan fərqli qalır. Sıranın buna uyğun həddi

$$K = 4\pi \int_0^{\infty} |R_{l'}(r_1)|^2 r_1^2 dr_1 \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} r_2^2 |R_{m'}(r_2)|^2 dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} r_2 |R_{m'}(r_2)|^2 dr_2 \right) \quad (85.13)$$

Eyni şəkildə A -ya daxil olan bucaqlara görə inteqrallar isə yalnız $l \neq l'$ və $m' = m$ qiymətlərində sıfırdan fərqli qalır və cəmin buna uyğun həddi üçün

$$A = \frac{4\pi}{2l+1} \int_0^{\infty} r_1^2 dr_1 R_{l_0}(r_1) R_{m'}(r_2) \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} r_2^2 \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^l R_{l_0}(r_2) R_{m'}(r_2) dr_2 + \right. \\ \left. + \int_{r_1}^{\infty} r_2 \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^l R_{l_0}(r_2) R_{m'}(r_2) dr_2 \right) \quad (85.14)$$

ifadəsi alınır.

Helium atomunun birinci həyəcanlanma səviyyəsi $n=2$ və $l=0$ -a uyğun $2s$ və ya $(1s)^1(2s)^1$ səviyyəsidir, ikinci həyəcanlanma səviyyəsi isə $(1s)^1(2p)^1$ -dir. n və l kvant ədədlərinin qiyməti böyüdükcə, birelektronlu funksiyaların bir-birini örtmə oblastı kicilir və baxılan yaxınlaşma daha dəqiq nəticələrə gətirir.

Helium atomunun $(1s)^1(2s)^1$ səviyyəsində birelektronlu funksiyaların bir-birini örtmə oblastı hiss olunacaq dərəcədə böyük olduğundan təcrübəyə yaxın nəticələrin alınması üçün hesablamalarda onu nəzərə almaq lazım gəlir*. Lakin hesablamalar həcmcə kifayət qədər böyük olduğundan biz onun üzərində dayanmayacağıq.

Misal olaraq $(1s)^1(2p)^1$ həyəcanlanmış halının enerjisini hesablayaq. Bu halda funksiyaların bir-birini örtmə oblastı $(1s)^1(2s)^1$ -dəkinə nisbətən nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçik olur. Bu xüsusi halda istifadə etdiyimiz

* Məsələn, 3.Флюгге: «Задачи по квантовой механике», том. 2, стр. 81.

metod nisbətən yaxşı nəticələrə gətirərsə, daha yüksək həyəcanlanmış hallar üçün də onun yararlılığına zəmin vermək olar. Bizi maraqlandıran halda normalanmış radial funksiyalar

$$R_{10}(r) = \left(\frac{8}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{2r}{a}}, \quad (85.15)$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{6a}\right)^{3/2} \frac{r}{2a} e^{-\frac{r}{2a}}.$$

R_{10} və R_{21} -in bu qiymətlərini (85.13) və (85.14) inteqrallarında yerinə yazıb, hissə-hissə inteqrallasaq,

$$K = 0,25 \frac{e^2}{a}; \quad A = 0,004 \frac{e^2}{a} \quad (85.16)$$

qiymətlərini alırıq. K və A -nı (85.12)-də yerinə yazdıqda baxılan halın enerjisi

$$E = (-2,126 + \eta \ 0,004) \frac{e^2}{a}. \quad (85.17)$$

Buradan $(1s)^1(2p)^1$ halında olan para- və ortoheliumun enerjiləri üçün

$$E_{par}^{noz} = -2,122 \frac{e^2}{a}; \quad E_{op}^{noz} = -2,130 \frac{e^2}{a} \quad (85.18)$$

qiymətləri alınır. Bu həyəcanlanmış halların enerjilərinin təcrübi qiymətləri isə uyğun olaraq,

$$E_{par}^{tac} = -2,124 \frac{e^2}{a}; \quad E_{op}^{tac} = -2,133 \frac{e^2}{a}. \quad (85.19)$$

$(1s)^1(2p)^1$ həyəcanlanmış haldakı atomun $2p$ halında olan elektronunu qoparmaq üçün lazım gələn ionizasiya enerjisi He^+ ionunun əsas halının E_{1s} enerjisi ilə E enerjisinin fərqinə bərabərdir:

$$I = E_{1s} - E = (0,126 - \eta 0,004) \frac{e^2}{a} \quad (85.20)$$

yaxud

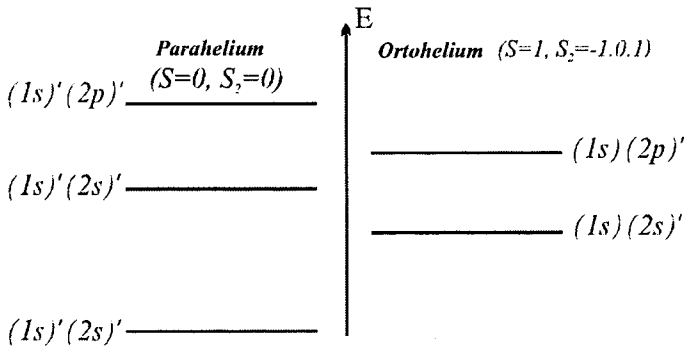
$$I_{par}^{n\acute{a}z} = 0,122 \frac{e^2}{a}, \quad I_{or}^{n\acute{a}z} = 0,130 \frac{e^2}{a}. \quad (85.21)$$

Uyğun təcrübi qiymətlər isə

$$I_{par}^{t\acute{a}c} = 0,124 \frac{e^2}{a}, \quad I_{op}^{t\acute{a}c} = 0,133 \frac{e^2}{a}. \quad (85.22)$$

E_{par} ilə E_{or} enerjilərinin müqayisəsi göstərir ki, simmetrik funksiya ilə təsvir olunan paraheliumun enerji səviyyələri antisimmetrik funksiya ilə təsvir olunan ortoheliumun enerji səviyyələrindən yuxarıda yerləşir. Bu, elektronların bir-birini dəf etməsi hesabına meydana çıxan mübadilə enerjisinin müsbət olması ilə izah olunur.

$(1s)^1(2p)^1$ halında olan para- və ortohelium atomları enerjilərinin və eləcə də uyğun ionizasiya enerjilərinin nəzəri və təcrübi qiymətləri bir-birinə xeyli yaxındır, yəni həyəcanlanma nəzəriyyəsi hətta belə dərin yerləşmiş səviyyələr halında təcrübəyə kifayət qədər yaxın qiymətə gətirir (şəkil 38).



Şəkil 38. Helium atomunun ən aşağı enerji səviyyələrinin yerləşmə sxemi.

Beləliklə, qeyri-relyativistik halda helium atomunun Hamilton operatorunun spin dəyişənlərindən asılı olmamasına baxmayaraq, elektronlar

arasındaki elektrik qarşılıqlı təsir onun enerji səviyyələrinin spinin qiymətindən asılılığına gətirir. Bu asılılıq hec də spinlə əlaqədar olan maqnit qarşılıqlı təsirin nəticəsi deyildir. O, bilavasitə atomun koordinat dalğa funksiyasının spin halları (qiyməti) ilə təyin olunan simmetriya (simmetrik və ya antisimmetrik) xassəsindən asılıdır. Bu axırıncı isə enerjinin qiymətini təyin edir.

§86. Xartri-Fok metodu. Özünə uzlaşan sahə metodu

§40-da gördük ki, yalnız bir elektrona malik atom üçün Şredinger tənliyini dəqiq həll etmək olur. İki elektronlu helium atomunun Şredinger tənliyini həll etmək üçün isə artıq təxmini həll metodlarından birinə – həyəcanlanma metoduna müraciət etməli olduq. Mürəkkəb atomlara uyğun tənliyin həlli isə bizi daha təkmillə təxmini metodlardan istifadə etməyə vadar edir. Onlardan ən mühümü Xartrin təklif etdiyi və Fokun təkmilləşdirdiyi *özünə uzlaşan sahə metodudur* (метод самосогласованного поля).

Bu metodun əsasını çoxelektronlu atomda hər bir elektrona yalnız ona məxsusi fərdi bir funksiya aiddir və ya atomun hər bir elektronu nüvə və digər elektronların yaratdığı ekvivalent sahədə hərəkət edir iddiası (ideyası) təşkil edir.

Xartri metodunda birinci yaxınlaşma olaraq fərz olunur ki, çoxelektronlu sistemdə elektronlar bir-birindən asılı olmayaraq hərəkət edir və Z elektronlu atomun ümumi dalğa funksiyası elektronların dalğa funksiyalarının hasilinə bərabərdir:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_Z) = \Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2)\dots\Psi_Z(\vec{r}_Z). \quad (86.1)$$

Elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsir isə bu funksiyaların ödədiyi tənliklərdə öz əksini tapır. Beləliklə, atomun ümumi dalğa funksiyasının tapılması $\Psi_i(\vec{r}_i)$ funksiyalarının hesablanmasına gətirilir. Ona görə də ilk növbədə $\Psi_i(\vec{r}_i)$ funksiyalarının ödədiyi tənliyin tapılması üzərində dayanacaq.

Spin- orbital və spin- spin (maqnit) qarşılıqlı təsirlər nəzərə alınmadıqda, nüvə ilə bağlı koordinat sistemində atomun Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \sum_i \tilde{H}_i + \sum_{i \neq k} V_{ik}(\vec{r}_{ik}) \quad (86.2)$$

şəklində olur. Burada

$$\tilde{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\vec{r}_i); \quad i, k=1, 2, \dots, Z \quad (86.3)$$

Ze yükünə malik nüvənin sahəsində hərəkət edən i -ci elektronun Hamilton operatoru, $U(\vec{r}_i)$ -nüvə ilə baxılan elektron, $V_{ik} = \frac{e^2}{r_{ik}}$ isə iki elektron arasındakı qarşılıqlı təsir operatorlarıdır. (86.2) - dəki ikinci həddə cəm $i \neq k$ şərti altında aparılır.

$\Psi_i(\vec{r}_i)$ funksiyalarının ödəyə biləcəyi tənliyi ilk dəfə Xartri təklif etmişdir. Xartri, atomun daxilində elektronların yaratdığı ümumi orta sahədəki hərəkətə dair fiziki mülahizələr əsasında buna müvəffəq olmuşdu. Fok həmin tənliyi variasiya prinsipindən istifadə edərək çıxarmışdır. Biz burada ikinci yoldan istifadə edəcəyik.

Atomun əsas halının enerjisini hesablamaq üçün, §36-da gördüyümüz kimi, variasiya metodundan istifadə etmək əlverişlidir. Bu halda atomun dalğa funksiyası

$$\delta J = \delta \int \Psi^+ \tilde{H} \Psi (d\vec{r}) \quad (86.4)$$

bərabərliyindən təyin olunur. Bu zaman fərz olunur ki, dalğa funksiyası

$$\int \Psi^+ \Psi (d\vec{r}) = 1 \quad (86.5)$$

şərtini ödəyir.

Variasiya metodunun əsas şərtlərindən biri sınaq funksiyasının seçilməsi problemi. Çoxelektronlu atomlar halında sınaq funksiyası (86.1) ifadəsi şəklində seçildikdə eynizərrəcikli sistemin dalğa funksiyasının zərrəciklərin (fəza və spin koordinatlarının) yerdəyişməsinə görə ya simmetrik (bozonlar) və ya da antisimmetrik (fermionlar) olması tələbi ödənilmir. Başqa sözlə, zərrəciklərin hərəkətində dalğa funksiyasının simmetriyası ilə əlaqədar olan təsir öz əksini tapmır. Gördüyümüz kimi (bax: §83–85), bu təsir mübadilə enerjisinin ortaya çıxmasına gətirir.

Funksiyanın düzgün simmetriyasını nəzərə almaqla Xartri metodu Fok tərəfindən təkmilləşdirilmiş və variasiya prinsipinin göməyilə Xartrin $\Psi_i(\vec{r}_i)$ funksiyaları üçün yazdığı tənliyi ala bilmişdi.

Biz əvvəlcə sınaq funksiyası üçün (86.1) ifadəsini saxlayıb, $\Psi_i(\vec{r}_i)$ -nin ödədiyi tənliyi çıxaracağıq. Ondan sonra isə Ψ -funksiyanın simmetriyası ilə əlaqədar məsələ üzərində dayanacağıq.

(86.1) ilə verilmiş funksiyanı

$$J = \int \Psi^+ \tilde{H} \Psi (d\vec{r}_1) \dots (d\vec{r}_Z) \quad (86.6)$$

inteqralında yazıb, (86.2)-dəki \tilde{H}_i operatorunun i -ci elektronun, V_{ik} operatorunun isə i və k elektronlarının kooordinatlarına təsir etdiyini və elektronların $\Psi_k(\vec{r}_k)$ funksiyaları üçün

$$\int \Psi_k^+ \Psi_k (d\vec{r}_k) = 1 \quad (86.7)$$

normalanma şərtinin ödədiyini qəbul etsək,

$$J = \sum_i \int \Psi_i^+ \tilde{H}_i \Psi_i (d\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \int \Psi_k^+ \Psi_i^+ V_{ki} \Psi_k \Psi_i (d\vec{r}_i) (d\vec{r}_k) \quad (86.8)$$

olar. Ψ_i funksiyasının ödədiyi tənliyi almaq üçün (86.7) və (86.8) ifadələrindən Ψ_i^+ -yə görə variasiya alıb

$$\delta J = \sum_i \int \delta \Psi_i^+ \left\{ \tilde{H}_i + \sum_k \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) \right\} \Psi_i(\vec{r}_i) (d\vec{r}_i) = 0, \quad (86.9)$$

$$\int \delta \Psi_i^+ \Psi_i (d\vec{r}_i) = 0 \quad (86.10)$$

sistemindəki hər bir bərabərliyi E_i Laqranj vuruğuna vurandan sonra (86.9)-dan (86.10)-u çıxsaq,

$$\delta J = \sum_i \int \delta \Psi_i^+ \left\{ \tilde{H}_i + \sum_k \int \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) - E_i \right\} \Psi_i (d\vec{r}_i) = 0 \quad (86.11)$$

alınar. $\delta \Psi_i^+$ variasiyaları ixtiyari olduğundan, (86.11) bərabərliyi

$$\left\{ \tilde{H}_i + \sum_k \int \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) - E_i \right\} \Psi_i(\vec{r}_i) = 0 \quad (86.12)$$

şerti daxilində ödənilər.

$\Psi_i(\vec{r}_i)$ birelektronlu funksiyaların və uyğun stasionar halların E_i enerjisinin hesablanması üçün alınmış (86.12) sistemi qeyri-xətti inteqral-dife-

rensial sistemdir.

(86.12) tənliklər sistemi elektronların yaratdığı orta sahə haqqındakı fiziki mülahizələr əsasında Xartri tərəfindən ilk dəfə təklif olunmuş sistemdir. Bu sistemi həll etmək üçün o, ardıcıl yaxınlaşma metodunu tətbiq etmişdi. i -ci elektronun atomun digər elektronları ilə qarşılıqlı təsir enerjisini xarakterizə edən

$$V_i(\vec{r}_i) = \sum_k' \int \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k(d\vec{r}_k) \quad (86.13)$$

cəmini hesablamaq üçün Xartri sıfırıncı yaxınlaşma olaraq $\Psi_k(\vec{r}_k)$ funksiyaları əvəzində hidrogen atomunun $\Psi_k^0 = \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ funksiyalarını götürür:

$$V_i^0(\vec{r}_i) = \sum_k' \int \Psi_k^{0+} \tilde{V}_{ki} \Psi_k^0(d\vec{r}_k).$$

Buradan hesablanan $V_i^0(\vec{r}_i)$ potensial enerji funksiyasını (86.12)-də yerinə yazaraq alınan

$$(\tilde{H}_i + V_i^0(\vec{r}_i) - E_i)\Psi_i^1(\vec{r}_i) = 0$$

tənliklər sistemindən birinci yaxınlaşmada $\Psi_i^1(\vec{r}_i)$ dalğa funksiyası hesablanır. Belə tapılmış Ψ_i^1 -dalğa funksiyaları vasitəsilə yenidən

$$V_i^1(\vec{r}_i) = \sum_k' \int \Psi_k^{1+} V_{ki} \Psi_k^1(d\vec{r}_k)$$

potensial enerji funksiyası tapılır və onu yenidən (86.12)-də yazmaqla

$$(\tilde{H}_i + V_i^1(\vec{r}_i) - E_i)\Psi_i^{(2)} = 0$$

sistemindən ikinci yaxınlaşmada $\Psi_i^{(2)}$ funksiyası tapılır.

Bu ardıcılıq toplanırsa, onu o vaxta qədər davam etdirirlər ki, bu şəkildə axırıncı dəfə hesablanmış

$$V_i^a(\vec{r}_i) = \sum_k' \int \Psi_k^{a+} V_{ki} \Psi_k^a(d\vec{r}_k) \quad (86.14)$$

potensial enerji funksiyasını

$$(\tilde{H}_i + V_i^a(\vec{r}_i) - E_i)\Psi_i = 0 \quad (86.15)$$

sistemində yazdıqdan sonra sistemin həllindən alınan $\Psi_i(\vec{r}_i)$ dalğa funksiyaları bundan qabaqkı halda $V_i(\vec{r}_i)$ -nin hesablanması üçün istifadə olunan dalğa funksiyalarının üzərinə düşsün, yəni $\Psi_i(\vec{r}_i)$ -nin axırıncıdan əvvəlki qiyməti təkrar olunmuş olsun. Bu şəkildə alınan (86.14) potensial funksiya *özünə uzlaşan sahə* adlanır.

Qarşılıqlı təsirdə olan Z sayda zərrəciklər sistemi üçün yazılmış (86.12) Xartri–Fok tənliklər sistemi üç ölçülü fəzada verilmiş ən çoxu Z tənlikdən ibarətdir. Hər bir funksiya yalnız üç x, y, z koordinatdan asılıdır. Z zərrəcikli sistemin Şredinger tənliyi isə $3N$ ölçülü fəzada verilir. Burada dalğa funksiyası $3N$ dəyişəndən asılıdır. Bu mənada deyirlər ki, Xartri–Fok metodu çoxzərrəcikli məsələ birzərrəcikli məsələyə gətirilir. Bu zaman atomun halı təxminən birelektronlu halların toplusu kimi təyin olunur. Bu yaxınlaşma atomun ümumi funksiyasının (86.1) hasili şəklində götürülməsi ilə əlaqədardır. Əslində atomun dalğa funksiyasını (86.1) hasili şəklində götürmək doğru deyil, çünki bu, tam qarşılıqlı təsiri yox, yalnız onun əsas hissəsini – Kulon qarşılıqlı təsiri nəzərə almağa imkan verir. Funksiyanın simmetriyası ilə əlaqədar olan mübadilə qarşılıqlı təsir isə kənarda qalır.

Xartri–Fok metodunun praktik tətbiqlərində əlavə bir yaxınlaşmadan da istifadə olunur. $V_i(\vec{r}_i)$ potensial funksiyasında \vec{r}_i radius-vektorun istiqamətləri üzrə orta qiymət götürülür:

$$V_i(|\vec{r}_i|) = \frac{1}{4\pi} \int V_i(\vec{r}_i) d\Omega_i$$

Belə potensial funksiya sferik simmetriyaya malik olur, bu isə öz növbəsində $\Psi_i(\vec{r}_i)$ dalğa funksiyalarını $\Psi_i(\vec{r}_i) = R_i(r_i)Y_i(\theta_i, \varphi_i)$ kimi yalnız radius-vektorun mütləq qiymətindən və yalnız bucaqlardan asılı olan funksiyaların hasili kimi götürməyə imkan verir.

(86.12) sistemində E_i ayrıca götürülmüş elektronun enerjisini təyin edir. E_i -ni tapmaq üçün (86.12) tənliyini soldan Ψ_i^+ funksiyasına vurub, $(d\vec{r}_i)$ üzrə inteqrallamaq lazımdır:

$$E_i = \int \Psi_i^+ \tilde{H}_i \Psi_i(d\vec{r}_i) + \sum_k' \int \Psi_i^+ \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_i \Psi_k(d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k). \quad (86.16)$$

Atomun tam enerjisi isə (86.8)-dən

$$E = \sum_i \int \Psi_i^+ \tilde{H}_i \Psi_i (d\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \int \Psi_i^+ \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_i \Psi_k (d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k). \quad (86.17)$$

(86.17) ilə (86.16)-nın müqayisəsindən çıxır ki, atomun E tam enerjisi bir zərrəcikli halların enerji cəminə bərabər deyil. $\sum E_i$ cəmində elektrostatik qarşılıqlı təsir iki dəfə nəzərə alındığından

$$E = \sum_i E_i - \frac{1}{2} \sum_{i,k} \int \Psi_i^+ \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_i \Psi_k (d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k) \quad (86.18)$$

olur.

Yuxarıda qeyd etdik ki, Xartri metodunda sınaq funksiyası zərrəciklərin fərdi dalğa funksiyalarının hasili şəklində seçilir. Eyni zərrəciklərdən ibarət sistemin funksiyalarına xas olan simmetriya hesabına zərrəciklərin hərəkətlərində meydana çıxan əlaqə nəzərə alınmır. Belə əlaqəni nəzərə almağa imkan verən özünə uzlaşan sahəni Xartri metoduna Fok daxil etmişdi. Bunun üçün o, eyni fermionlardan ibarət sistemdə zərrəciklərin yerdəyişməsinə görə antisimmetrik olan dalğa funksiyasını sınaq funksiyası kimi götürmüşdü.

Fok, sınaq funksiyanı fəza və spin dəyişənlərindən asılı olan $\Psi_i(x_i, s_i)$ kimi fərdi funksiyalardan təşkil olunmuş antisimmetrik funksiya kimi seçir.

(x_i, s_i) çoxluğunu şərti olaraq (i) kimi işarə etsək, normalanmış sınaq funksiyası:

$$\Psi(1, 2, \dots, Z) = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(1) \Psi_1(2) \dots \Psi_1(Z) \\ \Psi_2(1) \Psi_2(2) \dots \Psi_2(Z) \\ \dots \dots \dots \dots \\ \Psi_z(1) \Psi_z(2) \dots \Psi_z(Z) \end{vmatrix} \quad (86.19)$$

$\Psi_i(i)$ funksiyaları həm fəza koordinatlarına və həm də spin dəyişənlərinə nəzərə alınmayan orta-normalanma şərtini ödəyir.

Atomda elektron sisteminin halını xarakterizə edən (86.19) funksiyası (86.1)-dən fərqli olaraq, baxılan elektronun müəyyən halda yox, mümkün hallardan birində (fərqi yoxdur hansında) olduğunu təsvir edir. Yuxarıda olduğu kimi, burada da fərz olunur ki, hər bir elektron ayrılıqda sferik sim-

metrik özünə uzlaşan sahədə hərəkət edir, ona görə də hər bir elektronun halı (n, l, m, m_s) kvant ədədləri çoxluğu ilə təyin olunur.

Bu metodla atomun enerji səviyyələrini və uyğun dalğa funksiyalarını hesablamaq olduqca mürəkkəb bir məsələdir. Yalnız hesablama maşınlarının köməyi ilə ədədi nəticələrə gəlmək olur.

Spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda elektronun dalğa funksiyasını yalnız koordinatlardan və yalnız spin dəyişənindən asılı funksiyaların hasili şəklində götürülə bilər.

$$\Psi_i(x_i, s_i) = \Psi_i(x_i)S_\alpha(s_i)$$

Koordinat funksiyasının simmetriyası isə sistemin tam spininin qiymətindən asılıdır və bu simmetriya elektronların hərəkətləri arasındakı əlaqəni (korelyasiyanı) təyin edir. Ona görə də sistemin tam spininin müxtəlif qiymətlərinə Fok metodunda müxtəlif özünə uzlaşan sahə uyğun gəlir. Bütün bu dediklərimizi artıq kvant nəzəriyyəsi ilə tanış olduğumuz helium atomu misalında nümayiş etdirək.

Helium atomu iki elektronlu sistem olduğundan onun ümumi funksiyası

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \Psi_i(1)\Psi_i(2) \\ \Psi_k(1)\Psi_k(2) \end{vmatrix} \quad (86.20)$$

şəklindədir, burada i, k elektronların halının indeksidir və onların hər biri n, l, m, m_s kvant ədədlər çoxluğunu ifadə edir. Elektronların spinlərinin nisbi istiqamətlərinə görə helium atomu parahelium (tam spini $S=0$), ortohelium (tam spini $S=1$) hallarında ola bilər. Parahelium halında koordinat funksiyası simmetrik

$$\Psi^S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_i(1')\Psi_k(2') + \Psi_i(2')\Psi_k(1')), \quad (86.21)$$

ortohelium halında isə antisimmetrik

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_i(1')\Psi_k(2') - \Psi_i(2')\Psi_k(1')) \quad (86.22)$$

olur, burada $1'$ və $2'$ ilə x_1, y_1, z_1 və x_2, y_2, z_2 yalnız fəza koordinatları işarə olunmuşdur.

Helium atomunun \tilde{H} Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + V_{12}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|). \quad (86.23)$$

\tilde{H}_1 –birinci elektronun, \tilde{H}_2 isə ikinci elektronun koordinatlarına təsir edir.

$$V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}$$

isə iki elektron arasındakı qarşılıqlı təsir operatorudur.

Əvvəlcə helium atomunun para halını təsvir edən tənliyi tapaq. Sadəlik üçün fərz edək ki, Ψ_i və Ψ_k funksiyaları iki müxtəlif halın funksiyalarıdır, yəni onlar üçün

$$\int \Psi_\alpha^+ \Psi_\beta (dr) = \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, 2 \quad (86.24)$$

orta-normalanma şərti ödənilir.

Yuxarıda olduğu kimi, axtarılan tənlük

$$J = \int \Psi^{+S} \tilde{H} \Psi^S (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)$$

inteqralın variyasiyasından (86.24) ifadəsini E_i -yə vurulmuş variyasiyasını çıxmaqla alınan

$$\delta(J - E_i \int \Psi_i^+ \Psi_i (d\vec{r}_1) - E_k \int \Psi_k^+ \Psi_k (d\vec{r}_2)) = 0 \quad (86.25)$$

bərabərliyindən tapılır.

(86.25)-dən Ψ_i^+ və Ψ_k^+ funksiyalarına görə variyasiya götürsək,

$$\begin{aligned} & \delta(J - E_i \int \Psi_i^+ \Psi_i (d\vec{r}_1) - E_k \int \Psi_k^+ \Psi_k (d\vec{r}_2)) = \\ & = \int \delta \Psi_i^+ (1) \{ \tilde{H}_1 \Psi_i (1) (d\vec{r}_1) + \int \Psi_k^+ (2) V_{12} \Psi_k (2) \Psi_i (1) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) + \\ & \quad + \int \Psi_k^+ (2) V_{12} \Psi_i (2) \Psi_k (1) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) - E_i \int \Psi_i (1) (d\vec{r}_1) \} + \\ & + \int \delta \Psi_k^+ (2) \cdot \{ \tilde{H}_2 \Psi_k (2) (d\vec{r}_2) + \int \Psi_i^+ (1) V_{12} \Psi_i (1) \Psi_k (2) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) + \\ & \quad + \int \Psi_i^+ (1) V_{12} \Psi_k (1) \Psi_i (2) (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) - E_k \int \Psi_k (2) (d\vec{r}_2) \} = 0 \end{aligned}$$

alınar. $\delta \Psi_i^+ (1)$ və $\delta \Psi_k^+ (2)$ variyasiyaları ixtiyari seçilə bildiyindən bu bə-

rabərliyin ödənilməsi üçün

$$\begin{aligned}(\tilde{H}_1 + V_{kk} - E_i)\Psi_i(1) + V_{ki}\Psi_k(1) &= 0, \\(\tilde{H}_2 + V_{ii} - E_k)\Psi_k(2) + V_{ik}\Psi_i(2) &= 0\end{aligned}\quad (86.26)$$

sistemi ödənilməlidir. Burada

$$V_{ii} = V_{kk} = \int \Psi_k^+ V_{12} \Psi_k(d\vec{r}).$$

Ψ_k halında olan elektronun i halında olan elektronla təmiz Kulon qarşılıqlı təsir enerjisini,

$$V_{ik} = V_{ki} = \int \Psi_k^+ V_{12} \Psi_i(d\vec{r})$$

isə elektronların mübadilə enerjisini göstərir. Əlbəttə, mübadilə enerjisinin ortaya çıxması funksiyanın simmetriya xassəsi ilə əlaqədardır və elektronların hərəkətləri arasındakı əlaqəni (korrelyasiyanı) xarakterizə edir.

Eyni işləri ortohelium ($S=1$) üçün də görmək olar. Onun koordinat funksiyası antisimmetrikdir:

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_i(1)\Psi_k(2) - \Psi_i(2)\Psi_k(1)). \quad (86.27)$$

(86.24) şərti daxilində

$$J = \int \Psi^{+A} \tilde{H} \Psi^A(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)$$

ifadəsindən $\Psi_i^+(1)$ və $\Psi_k^+(2)$ funksiyalarına görə variasiya götürsək,

$$\begin{aligned}(\tilde{H}_1 + V_{kk} - E_i)\Psi_i(1) - V_{ki}\Psi_k(1) &= 0 \\(\tilde{H}_2 + V_{ii} - E_k)\Psi_k(2) - V_{ik}\Psi_i(2) &= 0\end{aligned}\quad (86.28)$$

sistemi alınar.

(86.26) və (86.28) sistemləri mübadilə enerjisinin işarəsi ilə fərqlənir. Onlar, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, qeyri-xətti integro-diferensial tənliklər sistemidir, yalnız ədədi hesablama metodları ilə həll oluna bilər.

Funksiyaların simmetriyası hesabına ortaya çıxan mübadilə enerjisini

nəzərə almasaq, hər iki sistem Xartrin təklif etdiyi (86.12) tənliklər sisteminin üzərinə düşür, yəni orto və para hallar bir-birindən fərqlənir.

Xartri-Fok özünə uzlaşan sahə metodu mürəkkəb atomların stasionar enerji səviyyələrini və uyğun dalğa funksiyalarını hesablamaq üçün geniş tətbiq olunur.

Atomun dalğa funksiyasının elektronların dalğa funksiyalarının hasilində götürülməsi məsələnin həllini xeyli asanlaşdırır. Lakin mürəkkəb atomların enerji səviyyələri üçün Xartri-Fok metodu ilə alınan nəticələrin təcrübə ilə müqayisəsi göstərir ki, hesablamalarda buraxılan xəta 5–10% tərtibindədir.

§87. Mübadilə enerjisi

Həyəcanlanma nəzəriyyəsinə görə birinci yaxınlaşmada enerjiyə əlavə həyəcanlanma enerjisinin baxılan haldakı orta qiymətinə bərabərdir. Helium atomunda həyəcanlanma enerjisi onun iki elektronu arasındakı Kulon qarşılıqlı təsir enerjisidir. Eyni zərrəciklər sistemində baxılan halın enerjisi sistemin tam spininin qiymətindən asılıdır. İfadələri (83.19) ilə verilmiş Ψ^{oS} və Ψ^{oA} funksiyalarına uyğun tam spinin qiymətilə fərqlənən hallarda həyəcanlanma enerjisinin orta qiyməti

$$\begin{aligned} \overline{\frac{e^2}{r_{12}}} = \int \Psi^{+oS,A} \frac{e^2}{r_{12}} \Psi^{oS,A} (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{r_{12}} (|\Psi_I|^2 + |\Psi_{II}|^2 \pm \Psi_I \Psi_{II}^+ \pm \\ \pm \Psi_I^+ \Psi_{II})(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \end{aligned} \quad (87.1)$$

kimi təyin edilir. Burada (82.5), (82.7), (83.11) və (83.12)-yə görə birinci iki inteqral elektronlar arasındakı Kulon qarşılıqlı təsir enerjisini, axırıncı ikisi isə mübadilə enerjisini ifadə edir. Onda

$$\overline{\frac{e^2}{r_{12}}} = K \pm A$$

olur və o, ümumi nəzəriyyədə alınmış (83.16)-nın üzərinə düşür.

Eyni zərrəciklər sistemində baxılan halın enerjisinin tam spininin qiymətindən asılılığı zərrəciklər arasında Kulon qarşılıqlı təsirdən əlavə başqa bir qarşılıqlı təsirin də meydana çıxmasına gətirir. Bu qarşılıqlı təsir mübadilə qarşılıqlı təsir adlanır. Yuxarıda deyildiyi kimi, mübadilə qarşılıqlı təsir təmiz kvant təbiətlidir. Doğrudan da, qeyri-relyativistik halda spin effektləri ortadan çıxır, spinin müxtəlif qiymətlərinə uyğun hallar arasındakı fərq silinir və onların enerjiləri bir-birindən fərqlənir.

Mübadilə enerjisinin mahiyyətini daha yaxşı başa düşmək üçün helium atomunun hallarının zamandan asılılığı ilə maraqlanaq. Helium atomunun halları stasionar hallar olduğundan Ψ^{oS} və Ψ^{oA} funksiyalarının zamandan asılılığı

$$\begin{aligned}\Psi^{oS}(r_1, r_2, t) &= \Psi^{oS}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+K+A)t} \\ \Psi^{oA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \Psi^{oA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+K-A)t}\end{aligned}\quad (87.2)$$

olur.

$$\omega = \frac{E+K}{\hbar}, \quad \delta = \frac{A}{\hbar}\quad (87.3)$$

əvəzlərini qəbul etsək, (83.17) və (83.18)-ə əsasən

$$\begin{aligned}\Psi^{oS}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_I^o + \Psi_{II}^o)e^{-i\omega t - i\delta t} \\ \Psi^{oA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_I^o - \Psi_{II}^o)e^{-i\omega t + i\delta t}\end{aligned}\quad (87.4)$$

Ψ^{oS} və Ψ^{oA} stasionar halları əvəzində onların superpozisiyası ilə verilən

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi^{oS} + \Psi^{oA})\quad (87.5)$$

halına baxaq. Sistemin bu halı stasionar hal olmur, çünki Ψ^{oS} və Ψ^{oA} -nı (87.4)-dəki ifadələri ilə əvəz etdikdən sonra Ψ funksiyası Ψ_I^o və Ψ_{II}^o funksiyalarının superpozisiyasına gətirildikdə superpozisiya əmsalları zamandan asılı olur və halın stasionarlıq şərti pozulur (bax: (87.6)). Digər tərəfdən (87.5)-dəki simmetrik və antisimmetrik halların superpozisiyası yalnız zərrəciklərin spinləri nəzərə alınmadıqda mümkündür, çünki bu zaman biz onların arasındakı fiziki fərqi göstərə bilmirik. Spinlər nəzərə alındıqda simmetrik hal atomun tam spininin sıfır, antisimmetrik hal isə vahid qiymətinə uyğun gəlir. Onların birinin digərinə keçmə ehtimalı isə, demək olar ki, sıfıra yaxındır. Deməli, (87.5) münasibəti əslində formal xarakter daşıyır, buna baxmayaraq o, mübadilə enerjisinin fiziki mahiyyətinin aşkar edilməsində müəyyən rol oynayır.

Ψ^{oS} və Ψ^{oA} funksiyalarının (87.4) ifadələrini (87.5)-də yazıb, alınan

ifadəni Ψ_I^o və Ψ_{II}^o funksiyalarına nəzərən qruplaşdıraraq:

$$\Psi = C_1(t)\Psi_I^o + C_2(t)\Psi_{II}^o = C_1(t)\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(r_2) + C_2(t)\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1) \quad (87.6)$$

alınar. Burada

$$C_1(t) = e^{-i\alpha t} \cos \delta t, \quad C_2(t) = ie^{-i\alpha t} \sin \omega t. \quad (87.7)$$

Superpozisiyaya daxil olan əmsalların statistik mənasına görə $|C_1|^2$ zərəcəklərin Ψ_I^o halında, $|C_2|^2$ isə onların Ψ_{II}^o halında olma ehtimalıdır. (87.6) və (87.7) münasibətlərindən çıxır ki, $t=0$ anında

$$|C_1(0)|^2 = 1, \quad |C_2(0)|^2 = 0.$$

olduğundan, birinci elektron $\Psi_{n_1}^o(\vec{r}_1)$ halında, ikinci elektron isə $\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)$ halında olursa,

$$t = \tau = \frac{\pi}{2\delta} = \frac{\hbar\pi}{A} \quad (87.8)$$

müddətindən sonra

$$C_1\left(\frac{\pi}{2\delta}\right) = 0, \quad C_2\left(\frac{\pi}{2\delta}\right) = 1$$

olur və birinci elektron $\Psi_{n_2}^o(\vec{r}_1)$, ikinci elektron isə $\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)$ halında yerləşir, yəni τ -ya bərabər zaman fasiləsində elektronların mübadiləsi başa çatmış olur və τ mübadilə müddəti adlanır. (87.8)-dən görünür ki, mübadilə müddəti τ mübadilə enerjisi A ilə tərs mütənasibdir: $A \rightarrow 0$ yaxınlaşanda $\tau \rightarrow \infty$ yaxınlaşır.

Qeyd edək ki, mübadilə enerjisi o zaman mühüm rol oynayır ki, zərəcəklərin $\Psi_{n_1}^o$ və $\Psi_{n_2}^o$ dalğa funksiyaları eyni dəyişmə oblastına malik olsun, yəni hər ikisi fəzanın müəyyən bir oblastında eyni zamanda sıfırdan fərqli qalsın. Həmin funksiyalar fəzanın müxtəlif oblastlarında sıfırdan fərqli qaldıqda isə mübadilə enerjisi sıfıra bərabər olur. Deməli, mübadilə enerjisinin qiyməti zərəcəklərin baxılan hallarının nə dərəcədə bir-birinə

yaxın və ya uzaq yerləşməsindən, yaxud onlara uyğun dalğa funksiyaların bir-birini nə dərəcədə örtüb örtməməsindən asılıdır. (87.8)-dən çıxır ki, mübadilə enerjisi böyük olduqca elektronların mübadilə müddəti kiçik və əksinə olur. Məsələn, $1s$ və $2s$ hallarında olan elektronların mübadilə müddəti $\tau \sim 10^{-15}$ san-dir, lakin $1s$ və deyək ki, $5s$ hallarında olan elektronlar üçün baxılan hallar bir-birindən xeyli uzaqda yerləşdiyindən onların mübadilə müddəti ay və illə ölçülə bilər.

Elektronların “mübadiləsi” dedikdə onu hərfi mənada başa düşmək lazım deyil, çünki həqiqi mənada mübadilə ola bilsin ki, heç baş verməsin. Burada mübadilə sözü virtual mənada başa düşülməlidir. Çünki eyni zərəciklərin seçilməzlik prinsipinə görə baxılan sistemdə elektronları heç vəchlə bir-birindən fərqləndirmək mümkün deyildir və mübadilənin baş verib vermədiyini haqqında heç bir müsbət hökm verə bilmərik. Ona görə də virtual mübadilə dedikdə yalnız sistemin başlanğıc və son hallarının fiziki mənanaya malik olduğunu başa düşək lazımdır.

§88. Mürəkkəb atomların elektron quruluşu

Rezerfordun təcrübələrində müəyyən olundu ki, atom onun mərkəzində yerləşən müsbət yüklü nüvədən və ətrafında fırlanan mənfii yüklü elektronlardan ibarətdir.

İvanenko və Rezerfordun fikrincə nüvə, kütləsi $M_p = 938,3 \text{ MeV}$ olan müsbət yüklü protonlardan və kütləsi $M_n = 939,5 \text{ MeV}$ olan, elektrik yükünə malik olmayan neytronlardan təşkil olunmuşdur.

Sonralar müəyyən olundu ki, nüvədə protonların sayı kimyəvi elementin Mendeleev cədvəlindəki Z sıra nömrəsinə, proton və neytronların ümumi sayı isə elementin A atom ədədinə bərabərdir. Onda neytronların sayı $N = A - Z$ olar. Atom neytral (yüksüz) sistem olduğundan onun tərkibindəki elektronların sayı da Z -ə bərabərdir.

Qeyri-relyativistik nəzəriyyədə atomun stasionar halları, nüvənin statik Kulon sahəsində hərəkət edən və bir-birilə elektrik qarşılıqlı təsirdə olan elektron sistemi üçün yazılmış Şredinger tənliyi ilə təyin olunur.

Nüvədən və onun statik sahəsində hərəkət edən elektronlardan təşkil olunmuş çoxelektronlu qapalı sistem üçün, hidrogen atomuna oxşar olaraq, enerjinin, onun hərəkət miqdarı momentinin və onun müəyyən istiqamətdəki proyeksiyasının saxlanmalı olduğunu fərz edərək, saxlanan kəmiyyətlərin qiymətini təyin edən kvant ədədləri daxil etmək olar. Bu kvant ədədləri, yəqin ki, bütöv qapalı sistemi xarakterizə etməlidir, belə ki, mürəkkəb atomlarda ayrı-ayrı elektronların enerjisi, hərəkət miqdarı momenti və onun proyeksiyası əslində saxlanmır.

Beləliklə, mürəkkəb atom kimi qapalı sistemin hallarını təyin etmək məsələsi olduqca mürəkkəb bir problemdir. Lakin §86-da gördük ki, Xartri-Fok metodu atomun hər bir elektronunun hərəkətini nüvənin və qalan

elektronların yaratdığı özünə uzlaşan sahədə qeyri-asılı zərrəciyin hərəkəti kimi təsvir etməyə, yəni elektronlar sisteminin dalğa funksiyasını ayrı-ayrı elektronların dalğa funksiyaları hasilinə bərabər götürməyə imkan verir.

Özünə uzlaşan sahədəki hərəkət mərkəzi sahədəki hərəkəti xatırladığından, nəinki bütövlükdə atomun, hətta onu təşkil edən elektronların hər birinin enerjisi, hərəkət miqdarı (orbital) momenti, onun seçilmiş istiqamətdəki proyeksiyası saxlanmalıdır. Bu kəmiyyətlərin qiymətini, hidrogen atomunda olduğu kimi n , l , m kvant ədədləri ilə təyin etmək və onlar üçün əvvəlki adları saxlamaq olar: n -baş, l -orbital, m -maqnit kvant ədədi.

Elektronun spin məxsusi momentinə malik olduğunu nəzərə alsaq, tam təsvir üçün, spinin müəyyən istiqamətdəki proyeksiyasını xarakterizə edən m_s spin kvant ədədi də onlara əlavə edilə bilər.

Özünə uzlaşan sahə tam Kulon sahəsi olmadığından, spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda belə, elektronun E_{nl} enerjisi n və l kvant ədədlərindən asılı olur (bax: §89).

Sferik simmetrik sahədə seçilmiş istiqamət olmadığından onun enerjisi m və m_s kvant ədədlərindən asılı olmur və hər bir E_{nl} səviyyəsi m və m_s -ə görə cırılmış olur.

Özünə uzlaşan sahə yaxınlaşması bir çox təcrübi faktları kifayət qədər dəqiq izah etməyə imkan verir. Buna bir optik elektronlu atomlarda elektronun hərəkətini misal göstərmək olar (bax: §89). Bu yaxınlaşmada iddia olunur ki, Li, Na, K, Rb və i.a. kimi bir optik elektronlu elementlərin (qələvi metalların) xarici elektronu təsirsiz qazların elektron örtüyünü xatırladan daxili örtükdə yerləşən elektronların və nüvənin yaratdığı özünə uzlaşan sahədə hərəkət edir. Özünə uzlaşan sahə təxmini sferik simmetrik sahə olduğundan, qələvi metalların bir çox xassələri hidrogenin xassələrinə oxşar olmalıdır. Məsələn, qələvi metalların spektrində spektr xətlərinin düzülüşü hidrogen spektrindəki kimi olub, dublet quruluşa malikdir. Onlar birvalentlidir və i.a. Beləliklə, bu yaxınlaşma vasitəsi ilə bu və bir sıra başqa təcrübi faktlar kifayət qədər dəqiq izah olunur.

Özünə uzlaşan sahə yaxınlaşmasında mürəkkəb atomun halını xarakterizə etmək üçün onun hər bir elektronunun halı təyin olunmalıdır. Hidrogen atomunda olduğu kimi, burada da n -baş kvant ədədi eyni olan hallar çoxluğu *təbəqə* adlanır. $n=1$ -də K , $n=2$ -də L , $n=3$ -də M , $n=4$ -də N təbəqə və i.a. Təbəqə l orbital kvant ədədinin qiyməti ilə təyin olunan *örtüklərdən* təşkil olunur. l -in qiyməti eyni olan hallar çoxluğu *örtük* adlanır: $l=0$ -da s - örtüyü, $l=1$ -də p , $l=2$ -də d , $l=3$ -də f , $l=4$ -də g örtüyü və i.a.

n baş kvant ədədinin verilmiş qiymətində l ədədi $0, 1, 2, \dots, n-1$ kimi müxtəlif qiymət aldığından (n, l) halı $n\chi(\chi=s, p, d, f, g, \dots)$ kimi göstərilir. Məsələn, $n=1$ olduqda $l=0$ -a uyğun örtük $1s$ (K təbəqə); $n=2$ olduqda (L təbəqə) $l=0$ və $l=1$ -ə uyğun örtüklər $2s$ və $2p$ kimi işarə olunur və i.a. (n, l) halda bir neçə elektron olarsa, bu hal $n\chi^k$ kimi göstərilir (k - örtükdəki elektronların sayını göstərir), başqa sözlə, l -ə uyğun hərfin solunda n baş

kvant ədədinin uyğun qiyməti, χ örtüyündəki elektronların sayı isə onun üstü kimi yazılır.

Baxılan atomun hər örtüyündəki elektronların sayı göstərilməklə bütün təbəqə, ona daxil olan örtüklər toplusu ilə birlikdə *elektron konfigurasiyası* adlanır. Başqa sözlə, elektron konfigurasiyası dedikdə eyni (n, l) kvant ədədlərinə malik elektronlar çoxluğu başa düşülür. Məsələn, oksigen atomunun əsas halı və yaxud onun elektron konfigurasiyası $1s^2 2s^2 2p^4$ -dür.

χ örtüyündə yerləşə biləcək elektronların maksimum sayı aşağıdakı kimi təyin olunur: l -in verilmiş qiymətində m maqnit kvant ədədi $-l$ -dən $+l$ -ə kimi $2l+1$ sayda müxtəlif qiymət alır. Mütləq qiyməti $\frac{\hbar}{2}$ -yə bərabər

spin momentini isə seçilmiş istiqamətdə $+\frac{\hbar}{2}$ və $-\frac{\hbar}{2}$ kimi ikicə proyeksiyaya

malikdir. Beləliklə, χ -örtüyünü təşkil edən kvant halların sayı $2(2l+1)$ bərabər olur. Pauli prinsipinə görə isə baxılan fermionlar sistemində n, l, m, m_s dörd kvant ədədi eyni olan iki fermion ola bilməz. Deməli, χ -örtüyündə yerləşə biləcək elektronların maksimum sayı da $2(2l+1)$ olar. $l=0$ -a uyğun s -örtüyündə 2, $l=1$ -ə uyğun p -örtüyündə 6, $l=2$ -yə uyğun d örtüyündə 10 elektron və i.a. ola bilər.

Eynilə bunun kimi, verilmiş təbəqədə yerləşə biləcək elektronların maksimum sayını da tapmaq olar. Verilmiş n -də l kvant ədədi 0, 1, ..., $n-1$ qiymətlərini aldığından n təbəqədəki elektronların maksimum sayı yəqin ki, örtüklər üzrə cəm aparılmaqla təyin olunur:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2(1+3+5+\dots+2n-1) = 2n^2.$$

Buradan görünür ki, K -təbəqədə ($n=1$) maksimum 2, L -təbəqədə ($n=2$)-8, M - təbəqəsində ($n=3$)-18, N - təbəqəsində ($n=4$)-32 elektron və i.a. ola bilər.

Mürəkkəb atomun halını tam təyin etmək üçün bütün bu məlumatlar kifayət deyildir. Bunlardan başqa, baxılan atomda elektronların orbital və spin momentlərinin nə cür toplandığını və atomun bütövlükdə özünün orbital, spin və tam momentlərinin nəyə bərabər olduğunu bilmək lazımdır.

Elektronların orbital və spin momentləri iki müxtəlif yolla toplana bilər. Baxılan atomda spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınmayacaq dərəcədə zəifdirsə (bu adətən yüngül və nisbətən ağır atomlarda müşahidə olunur), atomda elektronların \vec{l} orbital və \vec{s} spin momentləri bir-birindən asılı olmayaraq vektoru toplanır və atomun \vec{L} tam mexaniki və \vec{s} tam spin momentlərini əmələ gətirir:

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^Z \vec{l}_i; \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^Z \vec{s}_i.$$

Bu halda atomun spin və orbital momentləri ayrılıqda saxlanır. Belə rabitə *normal* və ya *Ressel-Saunders* rabitə adlanır. Bu rabitədə elektronun halı dörd: n -baş, l -orbital, m -maqnit, m_s -spin kvant ədədləri ilə təyin olunur.

Spin orbital qarşılıqlı təsir güclü olan atomlarda (bu adətən ağır atomlarda müşahidə olunur) əvvəlcə hər bir elektronun \vec{S} spin və \vec{l} orbital momentləri toplanaraq elektronun \vec{j} tam momentini əmələ gətirir, sonra axırıncılar vektoru toplanmaqla atomun \vec{J} tam momentini yaradır:

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{S}_i, \quad \vec{J} = \sum_{i=1}^Z \vec{j}_i.$$

Bu halda atomun tam momenti saxlanır, spin və orbital momentləri isə ayrılıqda saxlanmır. Atomda elektronun halı n -baş, l -orbital, j -daxili (köməkçi) və tam momentin proyeksiyasını təyin edən m_j kvant ədədləri ilə təyin olunur. Əvvəldə olduğu kimi j -nin verilmiş qiymətində $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ kimi $2j+1$ müxtəlif qiymət alır.

Deməli, mürəkkəb atomun halını təyin etmək üçün onun hər bir elektronu haqqındakı yuxarıda göstərilən məlumatlardan başqa, onun \vec{L} hərəkət miqdarı və \vec{S} spin momentləri və ya da \vec{J} tam momenti məlum olmalıdır.

Sferik simmetrik sahədə seçilmiş istiqamət olmadığından birinci növ atomlarda (*Ressel-Saunders* rabitədə) L və S -in müəyyən qiymətinə uyğun olan stasionar hal \vec{L} və \vec{S} vektorlarının fəzada mümkün müxtəlif yönəlmə istiqamətlərinə görə cırlaşmış olur. \vec{L} vektoru $2L+1$, \vec{S} vektoru isə $2S+1$ sayda müxtəlif istiqamətdə yönələ bildiyindən halın L -ə görə cırlaşma tərtibi $2L+1$, S -ə görə cırlaşma tərtibi $2S+1$ -ə bərabərdir. Ümumi cırlaşma tərtibi isə $(2L+1)(2S+1)$ olur.

Relyativistik effektlər, yəni spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınacaq dərəcədə böyük olan ikinci növ atomlarda orbital və spin momentlərinin L və S kimi müəyyən qiymətinə uyğun enerji səviyyəsi \vec{J} -tam momentin müxtəlif qiymətlərinə uyğun səviyyələrə parçalanır. Bu parçalanma səviyyənin *incə quruluşu* və yaxud *multipletliyi* adlanır. L və S -in müəyyən qiymətlərində J kəmiyyəti $L+S$ -dən $|L-S|$ -ə qədər müxtəlif qiymətlər aldığından baxılan səviyyə $L>S$ olduqda $2S+1$, $L<S$ olduqda isə $2L+1$ səviyyəyə parçalanır.

§83-də gördük ki, eyni zərrəciklər sisteminin stasionar halının koordinat (və ya spin) funksiyası zərrəciklərin yerdəyişmə əməliyyatına görə müxtəlif simmetriyaya malikdir. Yerdəyişmə simmetriyasının müəyyən növünə isə sistemin tam spininin müəyyən qiyməti uyğundur. Beləliklə, atomun stasionar halının multipletliyi (məsələn, sinqletlik və ya tripletlik) onun S tam spin momentinin qiyməti ilə təyin olunur.

J -nin hər bir qiymətinə uyğun səviyyə \bar{J} tam momenti vektorunun fəzadakı mümkün istiqamətlərinin sayı qədər cırlaşmış olur. Cırlaşma tərtibi $2J+1$ -ə bərabərdir. Asanlıqla göstərmək olar ki, $2J+1$ cırlaşma tərtibi $(2L+1)(2S+1)$ -ə bərabərdir. Belə sistemi xarici maqnit sahəsinə saldıqda səviyyənin cırlaşması ya tam, ya da qismən ortadan götürülür (anomal Zeyman effekti).

Mürəkkəb atomun enerji səviyyələri, bir zərrəcikli sistemlərin enerji hallarına oxşar olaraq, $L=0$ halı S , $L=1$ halı P , $L=2$ halı D , $L=3$ halı F və i.a. kimi işarə olunur. Atomun tam spininin və tam momentin qiymətləri ilə fərqlənən halları təsvir etmək üçün hərəkət miqdarı momentinin qiymətinə uyğun hərfin sağında aşağıda J -nin uyğun qiyməti, solunda yuxarıda isə

$2S+1$ ədədi yazılır. Məsələn, $L=0$, $S=\frac{1}{2}$ -də $J=\frac{1}{2}$ olur. Bu hal ${}^2S_{1/2}$;

$L=1$, $S=\frac{1}{2}$ -də $J=\frac{1}{2}$ və $J=\frac{3}{2}$ olduğundan, uyğun hallar ${}^2P_{1/2}$ və ${}^2P_{3/2}$

kimi yazılır.

Beləliklə, atomun halını tam təyin etmək üçün ayrı-ayrı elektronun (n, l) halını və atomun bütövlükdə L, S və J kəmiyyətlərini bilmək lazımdır.

Məsələn, helium atomunun iki elektronundan biri $n_l=1, l=0, s=\frac{1}{2}$, yəni $1s$

halında, ikincisi isə $n_l=2, l=1, s=\frac{1}{2}$ ilə verilən $2p$ halında olarsa, onun

bütövlükdə halını təyin etmək üçün $L=l_1+l_2, S=s_1+s_2$ və J kəmiyyətləri tapılmalıdır. Verilmiş L və S -də $J=L+S, L+S-1, \dots, L-S$ qiymətlərini aldığından, baxılan hal üçün $L=1, S=1$ və $J=2, 1, 0$ olur. Beləliklə, helium atomunun uyğun halları $1s2p^3P_2, 1s2p^3P_1$ və $1s2p^3P_0$ olur.

Çox vaxt elektronların n, l kvant ədədləri verildikdə atomun mümkün olan hallarının ümumi sayını bilmək lazım gəlir. n və l -in verilmiş qiymətlərində elektronun halları orbital və spin momentlərinin seçilmiş (adətən z oxu) istiqamətdəki proyeksiyaların müxtəlif qiyməti ilə seçilə bilər. $m=-l,$

$-l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ kimi $2l+1$ və $m_s = \pm \frac{1}{2}$ kimi iki qiymət aldığından n

və l -i eyni olan halların sayı $2(2l+1)$ olur. Bu hallar *ekvivalent hallar* adlanır. Pauli prinsipinə görə bu halların hər birini yalnız bir elektron tuta bilər.

Belə elektronlar *ekvivalent elektronlar* adlanır. n və l -in verilmiş qiymətlərinə uyğun atomun örtüyü elektronlarla tam dolduqda, o, verilmiş növlü *qapalı örtük* adlanır.

Atomun elektronları ekvivalent səviyyələrdə deyilsə, atomun mümkün olan hallarının sayını təyin etmək asandır. Elektronlar ekvivalent səviyyələrdə yerləşdikdə mümkün olan halların sayını tapmaq üçün Pauli prinsipi nəzərə alınmalıdır.

Tutaq ki, atomun iki elektronundan biri $n_1=3$, $l_1=2$, digəri isə $n_2=2$, $l_2=1$ ekvivalent olmayan hallarda yerləşir. Sistemin tam hərəkət miqdarı momenti $L=l_1+l_2, \dots, l_1-l_2$ -yə qədər 3,2,1; tam spin momenti isə $S=S_1+S_2, \dots, S_1-S_2$ -yə qədər 0,1 qiymətlərini alır. Belə iki elektronlu atom $S=0$ olanda ${}^1P, {}^1D, {}^1F$ hallarında, $S=1$ -də isə ${}^3P, {}^3D, {}^3F$ hallarında ola bilər.

Elektronların ekvivalent hallarda yerləşdiyini fərz edək. Əvvəlcə bizə məlum olan helium atomunun hər iki elektronunun eyni bir halda, yəni $n_1=n_2$ və $l_1=l_2=0$ halında olduğunu qəbul edək. Bildiyimiz kimi iki elektronlu sistemin tam spini $S=0$ və 1 qiymətlərini ala bilər. Lakin Pauli prinsipinə görə elektronların spinlərinin paralel yönəlmə $S=1$ halı qadağan olunur və atom 3S triplet halında ola bilməz. Belə sistem yalnız 1S sinqlet halına malik ola bilər.

İndi də fərz edək ki, hər iki elektron $n_1 = n_2$ və $l_1 = l_2 = 1$ halındadır. Elektronların orbital momentlərinin proyeksiyaları $m_l=1, 0, -1$ və $m_s=1, 0, -1$; spin momentlərinin proyeksiyaları isə $m_s = \pm \frac{1}{2}$ və $m_{2s} = \pm \frac{1}{2}$ kimi qiymətlər aldığından, hər bir elektronun mümkün olan halları:

$$1) m=1, m_s = \frac{1}{2}, 2) m=0, m_s = \frac{1}{2}, 3) m=-1, m_s = \frac{1}{2},$$

$$4) m=1, m_s = -\frac{1}{2}, 5) m=0, m_s = -\frac{1}{2}, 6) m=-1, m_s = -\frac{1}{2}$$

olar.

Belə elektronları olan atomun mümkün olan hallarını təyin etmək üçün atomun hərəkət miqdarı və spin momentləri tapılmalıdır. Hərəkət miqdarı momentinin $L=2, 1, 0$ qiymətlərinə uyğun atom D, P, S hallarında ola bilər. Bu hallar tam spin momentinin qiymətinə uyğun $S=0$ -da sinqlet, $S=1$ -də triplet qrupu təşkil edir. Atomun hərəkət miqdarı və spin momentlərinin $M_z=m_l+m_s$ və $M_s=m_{1s}+m_{2s}$ proyeksiyalarının qiymətlərini də nəzərə alsaq, atom aşağıdakı halların birini tuta bilər:

$$1) M_z=2, S_z=0; M_z=1, S_z=0; M_z=0, S_z=0 \rightarrow {}^1D$$

$$2) M_z=1, S_z=1; M_z=1, S_z=0; M_z=0, S_z=1, M_z=0, S_z=0 \rightarrow {}^3P (A)$$

$$3) M_z=0, S_z=0 \rightarrow {}^1S$$

M_z -in mənfi qiymətlərinə uyğun hallar burada göstərilməmişdir. O, heç bir yeniliyə gətirmir.

İndi də atomun enerji səviyyələrinin hansı ardıcılıqla düzülmə qaydası ilə tanış olaq.

Eyni bir elektron konfigurasiyasına (yəni n , l -in müəyyən qiymətinə) uyğun, lakin L hərəkət miqdarı momentinin və S spin momentinin qiymətləri ilə fərqlənən enerji səviyyələri arasındakı fərq atomun elektronlarının elektrostatik qarşılıqlı təsirinin nəticəsidir. Adətən bu halların enerjiləri arasındakı fərq, müxtəlif elektron konfigurasiyalarına uyğun halların enerjiləri arasındakı fərqdən bir neçə dəfə kiçikdir.

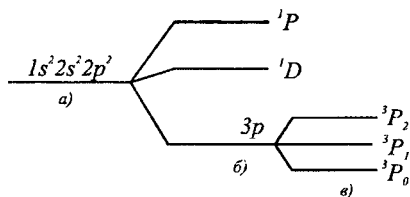
Atomun eyni elektron konfigurasiyasına aid, L və S -in qiymətləri ilə fərqlənən enerji səviyyələrinin düzülüşü *Hund qaydası* ilə təyin olunur. Hund qaydasına görə atomun müəyyən elektron konfigurasiyasına aid olan enerji səviyyələrindən S tam spinin ən böyük qiymətinə uyğun səviyyə ən kiçik enerjiyə uyğundur. S -in müəyyən qiymətinə aid olan enerji səviyyələri arasında isə L -in ən böyük qiymətinə uyğun səviyyə ən kiçik enerjiyə malikdir.

Bu qaydaları atomun (A) ilə verilmiş hallar çoxluğuna tətbiq etsək, (A)-nın 2) bəndində göstərilən səviyyələr çoxluğu S -in ən böyük qiymətinə ($S=1$) uyğundur. Deməli, 1S , 3P və 1D səviyyələrindən 3P səviyyəsi ən kiçik enerjiyə malikdir. Spinin $S=0$ qiymətinə aid 1S və 1D səviyyələrindən isə L -in ən böyük qiymətinə malik 1D səviyyəsinin enerjisi kiçikdir. Bütün bu dediklərimiz Ressel-Saunders rabitəli atomlara aiddir.

Yuxarıda verilən analiz, yəqin ki, xarici təbəqədə iki valent elektronu olan nisbətən ağır atomlar üçün də doğru qalar. Mərkəzi (sferik simmetrik) sahə yaxınlaşmasında atomun halları l , m , m_s -ə görə cırılmış olur. Nüvə və daxili elektronların valent elektrona təsiri nəzərə alındıqda l -ə görə cırılma ortadan götürülür və xarici iki elektronu (np) halında olan atom üçün 3P , 1D və 1S halları mümkün olur. Spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alındıqda isə 1D və 1S sinqlet halları öz fərdiliyini saxlayır, 3P halı isə $l_1+l_2=2$ və $M_z=2, 1, 0$ (M_z -in mənfi qiymətləri vəziyyəti dəyişmir) olduğundan 3P halı 3P_2 , 3P_1 və 3P_0 kimi üç hala parçalanır. Şəkil 39-da karbon atomu misalında dediklərimiz nümayiş etdirilir.

(*jj*) rabitəli atomların enerji səviyyələrinin düzülüşü haqqında da aşağıdakı qaydalar doğrudur.

Əvvəlcə yadımıza saraq ki, J tam moment L və S -in verilmiş qiymətlərində $L+S$ -dən $|L-S|$ -ə qədər müxtəlif qiymət alır. (\tilde{J}^2 , \tilde{L}^2 və \tilde{S}^2 operatorları kommutasiya etdiyindən) və J -nin qiyməti ilə fərqlənən hallar çoxluğu isə, yuxarıda dediyimiz kimi, multipletlik adlanır.



Şəkil 39.

- a) mərkəzi sahə yaxınlaşmasında,
 b) nüvə və daxili elektronların təsiri nəzərə alındıqda,
 v) spin-orbital təsir daxil edildikdə.

Atomun J tam momenti böyüdükdə multiplətin enerji səviyyəsi yuxarı qalxırsa, belə quruluş *normal quruluş* adlanır. Bu zaman ən kiçik enerjiyə malik səviyyə J -nin minimum qiymətinə uyğun olur. J -nin qiyməti böyüdükdə multiplətin enerji səviyyəsi aşağı düşürsə, belə quruluş *çevrilmiş quruluş* adlanır. Bunda ən kiçik enerjiyə malik səviyyə J -nin maksimum qiymətinə uyğun olur.

Baxılan atomun normal və ya çevrilmiş quruluşa malik olması aşağıdakı kimi təyin olunur. Atomun ekvivalent elektronlarının sayı mümkün olan elektronların sayının yarısından çoxdursa, atom çevrilmiş, azdırsa normal quruluşa malik olur.

Yuxarıda baxdığımız iki ekvivalent elektron sistemi ($n_1=n_2$, $l_1=l_2=1$) halında multiplətin quruluşu normal quruluş olur. Məsələn, onun $L=1$, $S=1$ səviyyəsi J -ya görə $J=2, 1, 0$ kimi üç səviyyəyə parçalanır. Bu multiplətdə ən aşağı səviyyə 3P_0 , sonra 3P_1 və ən yüksək səviyyə isə 3P_2 olur.

Başqa bir misala baxaq. Oksigenin elektron konfigurasiyası $1s^22s^22p^4$ - dur (bax: §91), $2p^4$ səviyyəsində ekvivalent elektronların sayı mümkün olan sayın (yəni 6-nın) yarısından çoxdur. Atomun multipləti çevrilmiş quruluşa malikdir. Onu iki dəfə ionlaşdırdıqda $2p$ -də ikicə elektron qalır və elektron quruluşu $2p^2$ olur. Bu halda multiplət normal quruluşa malik olur.

§89. Bir optik elektronlu atomların kvant nəzəriyyəsi

Mürəkkəb atomların kvant nəzəriyyəsində alınan nəticələrin nə dərəcədə təcrübi nəticələrlə uyğun olduğunu qələvi metallar qrupu misalında nümayiş etdirmək olar.

Atomun optik və kimyəvi xassələri, bildiyimiz kimi, nüvədən kifayət qədər uzaqda yerləşən xarici təbəqədəki elektronların sayı ilə təyin olunur. Litium (Li), natrium (Na), kalium (K) və i.a. qələvi metalların atomlarının xarici təbəqəsində optik adlanan yalnız bir elektron yerləşir. Bu elektron nüvənin və daxili təbəqələrdə olan elektronların birgə yaratdığı elektrik

sahəsində hərəkət edir. Daxili elektronların elektrik sahəsinin optik elektrona göstərdiyi təsirin xarakterini müəyyən etmək üçün §88-də elektron təbəqələri haqqında verdiyimiz məlumatdan və fermionlardan ibarət sistem üçün söylənmiş Pauli prinsipindən istifadə edək. Həmin paraqrafda qeyd etmişdik ki, hər hansı bir atomun K təbəqəsində yalnız iki müxtəlif hal var. Pauli prinsipinə görə orada yalnız iki elektron ($1s$ -örtüyü) yerləşə bilər və bununla həmin təbəqə dolmuş olur. L -təbəqəsinin dolması üçün isə səkkiz elektron (ikisi $2s$, altısı $2p$ örtüyündə) lazımdır və i.a.

Mürəkkəb atomlarda təbəqə və örtüklərin dolma ardıcılığını müəyyən etmək üçün elektronların qarşılıqlı təsirini də nəzərə almaq lazımdır.

Kvant mexanikasında mürəkkəb atomlar üçün yazılmış Şredinger tənliyinin təxmini həll edilmə metodları inkişaf etdirilmişdir. Onlar atomların elektron təbəqə və örtüklərinin dolma qaydasını müəyyən etməyə və rabitə enerjisini hesablamaya imkan verir.

Bu metodlardan ən sadəsi variasiya metodudur (Rits prinsipi, bax: §36). Bu metod yüngül atomlara tətbiq olunur və onun vasitəsi ilə stasionar səviyyələrin dalğa funksiyaları və enerjiləri təyin edilə bilər.

İkinci daha ümumi və geniş tətbiq tapmış metod özünə uzlaşan sahə (Xartri-Fok) metodudur (bax: §86). Bu metod mürəkkəb atomlara da tətbiq oluna bilər. Ondan çıxır ki, mürəkkəb atomlarda elektronların paylanması təbəqəli quruluşa malikdir və nəhayət o, təbəqə və örtüklərdə elektronların paylanma qaydasını müəyyən etməyə imkan verir. Lakin qeyd edək ki, bu metodun tətbiqi mürəkkəb hesablama maşınları vasitəsilə aparıla bilən böyük həcmli hesablamalara gətirir. Bunun nəticəsində atomun xarakteristikaları (dalğa funksiyaları və enerji səviyyələri) üçün analitik ifadələr yox, yalnız ədədi cədvəllər alınır.

Mürəkkəb atomlar üçün nisbətən az dəqiqliyə malik nəticələri Tomas-Fermi metodu (bax: §92) vasitəsilə də almaq olur. Buna baxmayaraq, metod xeyli sadə olduğundan o, mürəkkəb atomların hesablanmasına daha tez-tez tətbiq olunur.

Hidrogen (H) və helium (He) atomlarının əsas halında hidrogenin bir, heliumun iki elektronu K təbəqəsində yerləşir və He atomunda K təbəqə dolur. Litiumun (Li) iki elektronu K təbəqəsində, üçüncü elektronu isə L təbəqəsində yerləşməli olur. Onun elektron quruluşu $1s^2 2s^1$ kimi yazılır. Buna oxşar hərəkət etsək, onuncu element olan neon (Ne) atomunda həm K və həm də L təbəqə dolur ($1s^2 2s^2 2p^6$). On birinci element natrium (Na) atomunun on elektronu K və L təbəqələrində, on birinci elektronu isə M təbəqəsində yerləşməli olur ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$) və i.a.

Təbəqələrarası məsafə kifayət qədər böyük olduğundan He, Ne, Ar kimi qazları həyəcandırmaq üçün kimyəvi reaksiyalarda ayrılan enerji kifayət etmir və adi şəraitdə onlar kimyəvi reaksiyaya girmir. Buna görə də onlar *təsirsiz qazlar* adlanır. Təsirsiz qazların bu xassəsini dolmuş təbəqələrdə elektrik yükünün sferik simmetrik şəkildə paylanması ilə də izah

etmək olar, belə ki, kimyəvi enerji bu təbəqələri deformasiya edə bilməyindən atomlar kimyəvi reaksiyaya girə bilmir.

Li, Na, K qələvi metalların atomlarından optik elektronu xaric etsək, onların bir qat ionlarının (Li^+ , Na^+ , K^+) elektron təbəqəsi uyğun olaraq, He, Ne, Ar atomlarının elektron təbəqəsi üzərinə düşür. Buna görə də qələvi metalların atomlarının daxili təbəqəsində elektrik yükünün sferik simmetrik şəkildə paylandığını qəbul etmək olar. Digər tərəfdən, xarici optik elektronun təsiri nəticəsində daxili elektron təbəqəsinin çox cüzi polyarlaşdığını qəbul etsək, həmin atomlarda optik elektronun hərəkətinə, təxminən, nüvənin və daxili elektronların birgə yaratdığı mərkəzi sahədəki hərəkəti kimi baxıla bilər.

Nüvənin və daxili elektronların birgə sahəsində optik elektronun potensial enerjisi

$$U(r) = -eV(r). \quad (89.1)$$

burada $V(r)$ –birgə sahənin potensialıdır. Radiusu r olan sferanın daxilində elektronların sayı $N(r)$, nüvənin yükü Ze olarsa, birgə sahəni yaradan effektiv yük

$$eZ_{ef}(r) = eZ - eN(r) \quad (89.2)$$

olar, burada $Z_{ef} - r$ məsafəsində nüvənin effektiv nömrəsidir.

(89.2)-dən görünür ki, daxili elektronların yaratdığı sahə nüvə sahəsinin optik elektrona göstərdiyi təsiri zəiflədir. Bu, nüvə sahəsinin *ekranlaşdırılması* adlanır. Fəzadakı hərəkəti zamanı optik elektron nüvənin yaxınlığından keçdikdə daxili elektronların ona təsiri cüzi olur və $r \rightarrow 0$ -da sıfıra yaxınlaşır, məsafə daxili elektron örtüyünün a radiusundan böyük olduqda isə ($r > a$) təsir ən böyük qiymətə çatır. Bu onunla izah olunur ki, birinci halda optik elektron olan yerdə sahə yaradan daxili elektronların sayı çox az (yüklü kürənin elektrik sahəsinin xassəsinə əsasən), ikinci halda isə sahənin yaranmasında onların hamısı iştirak etmiş olur.

Gauss teoreminə əsasən eZ_{ef} effektiv yükün yaratdığı elektrik sahəsinin intensivliyi

$$\mathcal{E}(r) = \frac{eZ_{ef}}{r^2}, \quad (89.3)$$

potensialı isə

$$V(r) = - \int_{+\infty}^r \mathcal{E}(r) dr = -e \int_{+\infty}^r \frac{Z_{ef}}{r^2} dr \quad (89.4)$$

olar.

Sahənin potensial enerjisi yalnız nüvə ilə optik elektron arasındakı məsafənin mütləq qiymətindən asılı olduğuna görə (89.1) potensial enerjili sahədəki hərəkət üçün yazılmış Şredinger tənliyini həll etdikdə $Y_l^m(\theta, \varphi)$

bucaq (sferik) funksiyaları dəyişikliyə uğramır, $R = \frac{u(r)}{r}$ əvəzi ilə daxil edilən $u(r)$ radial funksiyası üçün isə (40.17) tənliyi əvəzində

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + V(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0 \quad (89.5)$$

tənliyi alınır.

Lakin bu tənlik dəqiq həll olunmur. Onu yalnız ədədi inteqrallama yolu ilə (yaxud elektrik hesablama maşınlarının köməyi ilə) həll etmək olur.

(89.4)-dən $V(\rho)$ effektiv potensialı üçün alınan ifadə, yəqin ki, Kulon sahəsinin $-\frac{Ze}{r}$ potensialından fərqli olacaq. Buna görə də istənilən sferik simmetrik sahə heç də Kulon sahəsi olmur və belə sahələrdəki hərəkətdə stasionar səviyyənin enerjisi, Kulon sahəsində olduğu kimi, yalnız n baş kvant ədədindən yox, l orbital kvant ədədindən də asılı olur, yəni Kulon sahəsindəki l üzrə olan təsadüfi cırılma burada ortadan götürülür.

Bunu nümayiş etdirmək üçün (89.5)-də $V(\rho)$ effektiv potensialı $\frac{2Z}{\rho} \left(1 + \frac{\beta}{\rho} \right)$ ilə əvəz edək:

$$\frac{d^2 u(\rho)}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l'(l'+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0, \quad (89.6)$$

burada l' – artıq tam ədəd olmur, o, l orbital ədədi ilə

$$l'(l'+1) = l(l+1) - 2Z\beta \quad (89.7)$$

münasibətindən təyin olunur. §40-a əsasən, bu halda ε üçün

$$\varepsilon = -\frac{Z^2}{n^2} \quad (89.8)$$

ifadəsi alınır, burada n^* -effektiv baş kvant ədədi, n baş kvant ədədi ilə

$$n^* = n_r + l + 1 = n_r + l + 1 + l' - l = n + \delta_l \quad (89.9)$$

kimi ifadə olunur, burada $\delta_l = l' - l$ baş kvant ədədi n -ə kiçik əlavədir. Bu zaman sistemin tam enerjisi

$$E_{n,l} = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^{*2}} = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 (n + \delta_l)^2} \quad (89.10)$$

n və l kvant ədədlərindən asılı olur. Başqa sözlə, l orbital kvant ədədi üzrə cırılma ortadan götürülür.

(89.5) tənliyinin ədədi inteqrallama yolu ilə həlli də optik elektronlu atomların tam enerji spektri üçün (89.10) ifadəsinə gətirir və δ_l düzəlişi analitik hesablanır. δ_l -in ədədi qiyməti fiziki təcrübələrin dəqiqliyi baxımından maraqlıdır. Bizim məqsədimiz isə onun l -dən asılılığını göstərmək idi.

Beləliklə, Kulon sahəsindən fərqli bütün mərkəzi sahələrdə n baş kvant ədədinin qiyməti ilə təyin olunan hər bir elektron təbəqəsi l -ə görə bir neçə örtüyə parçalanır, yəni l üzrə cırılma aradan götürülür. Beləliklə, qarşılıqlı təsir enerjisi valent elektronun elektron buludunun şəklindən asılı olur. Atomun fəzada yönünü təyin edən maqnit kvant ədədinə gəldikdə isə, fəzada üstünlük təşkil edən istiqamət (xarici sahə) olmadığından, atomun enerji səviyyələrinin ona görə cırılması saxlanılır.

Yuxarıda qeyd edildi ki, qələvi metalların daxili təbəqələri dolmuş, xarici təbəqədə isə yalnız bir elektron hərəkət edir. Onlar üçün daxili təbəqələrdə olan elektronların sayı $N(r) = Z - 1$ -ə bərabər olduğundan $Z_{ef} = Z - N = 1$ olur. Deməli, elektronu xarici örtükdə tutub saxlayan potensial enerji, hidrogen atomunda olduğu kimi,

$$V_{ef} = -\frac{Z_{ef} e^2}{r} = -\frac{e^2}{r} \quad (89.11)$$

olur. V_{ef} -in bu ifadəsini (89.5) tənliyində yazsaq, alınan Şredinger tənliyi hidrogen atomu üçün yazılmış (40.17) tənliyinin üzərinə düşür. Buradan qələvi metalların atomunun stasionar hallarının enerjisi üçün

$$E_n^o = -\frac{e^2}{2an^2} = -\frac{R\hbar}{n^2}, \quad (89.12)$$

dalğa funksiyası üçün isə (40.40) ifadəsi alınır:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)P_l^m(\cos \theta)e^{im\varphi}. \quad (89.13)$$

Əlbəttə, bütün bu dediklərimiz o zaman doğru olardı ki, nüvə ilə daxili təbəqələrdə olan elektronlar birlikdə nöqtəvi yük əmələ gətirsin. Lakin bir tərəfdən qələvi metallarda valent elektron ilə nüvə və daxili elektronların qarşılıqlı təsiri daxili yükün polyarlaşmasına və polyarlaşma qüvvəsinin yaranmasına gətirir, digər tərəfdən isə, daxili yük nöqtəvi deyil və o, müəyyən həcmdə hər hansı bir sıxlıqla yayılmış olur. Nəticədə (89.12) ilə verilmiş enerjiyə bu iki səbəbə uyğun düzəlişlər etmək lazım gəlir və onlar enerji səviyyələrinin l üzrə cırılmasını ortadan götürür.

Biz bu düzəlişlərin hesablanması üzərində dayanmayacağıq. Hər iki halda n - baş kvant ədədinə alınan δ_l düzəlişinin hazır ifadəsini gətirməklə kifayətlənəcəyik*.

Valent elektronun nüvə-daxili elektronlar sistemini polyarlaşdırması nəticəsində meydana çıxan polyarlaşma qüvvəsi hesabına atomun enerjisində düzəliş

$$\Delta E_{pol} = -\frac{e^2}{2a} \frac{2\delta_l}{n^3} \quad (89.14)$$

ifadəsi ilə verilir, burada

$$\begin{aligned} \delta_l &= \delta_{ll} - \frac{\delta_{2l}}{n^2}, \\ \delta_{ll} &= \frac{3\beta}{\left[4a^3 \left(l - \frac{1}{2}\right) l \left(l + \frac{1}{2}\right) (l+1) \left(l + \frac{3}{2}\right)\right]}, \\ \delta_{2l} &= \frac{1}{3} l(l+1) \delta_{ll}, \end{aligned} \quad (89.15)$$

β – atomun polyarlaşma əmsəlidir.

(89.12) və (89.14)-dən atomun tam enerjisi üçün

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2an^2} - \frac{e^2}{2a} \frac{2\delta_l}{n^3} = -\frac{e^2}{2a} \left(\frac{1}{n^2} + \frac{2\delta_l}{n^3} \right)$$

qiyməti alınır. Burada

* Düzəlişlərin hesablanması ilə maraqlanan oxucular Соколов А., Тернов И., Жуковский В. Квантовая механика, Москва, «Наука», 1979, стр. 398–400 kitabına müraciət edə bilərlər.

$$\frac{1}{(n - \delta_l)^2} = \frac{1}{n^2} \left(1 - \frac{\delta_l}{n} \right)^{-2} \approx \frac{1}{n^2} + \frac{2\delta_l}{n^3}$$

təxmini bərabərlik nəzərə alınsa, tam enerji qəbul edilmiş adi şəkildə yazıla bilər:

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2an^{*2}} \approx -\frac{e^2}{2a(n - \delta_l)^2} \quad (89.16)$$

Qeyd edək ki, (n, s) səviyyəsində olan elektron üçün (89.15) ifadəsindən istifadə edilə bilmir, çünki bu halda δ_{li} sonsuzluğa yaxınlaşır. Bu onunla əlaqədardır ki, polyarlaşma qüvvəsi xarici elektronun nüvə və daxili elektronlardan xeyli uzaqda yerləşdiyi hallarda əhəmiyyət kəsb edir. s halında dalğa funksiyası $r=0$ olduqda belə sıfırdan fərqli qalır (bax: §40).

Nüvə və daxili elektronların yükü radiusu R_o olan həcmdə bərabər yayılmış olduğu fərz edildikdə enerjiyə düzəlişin (ns) halı üçün tərtibini təyin etmək olur:

$$\Delta E_{hoc} = -\frac{2}{5} \cdot \frac{Ze^2 R_o^2}{a^3 n^3} = -\frac{e^2 2\delta}{2an^3}, \quad (89.17)$$

burada

$$\delta = \frac{2}{5} \cdot \frac{ZR_o^2}{a^2}. \quad (89.18)$$

Atomun radiusu üçün Tomas–Fermi modelində alınan

$$R_o = \frac{\gamma a}{Z^{1/3}} \quad (89.19)$$

qiyməti (89.17)-də yerinə yazsaq, tam enerji üçün yenə də (89.16)-ya oxşar ifadə alınır:

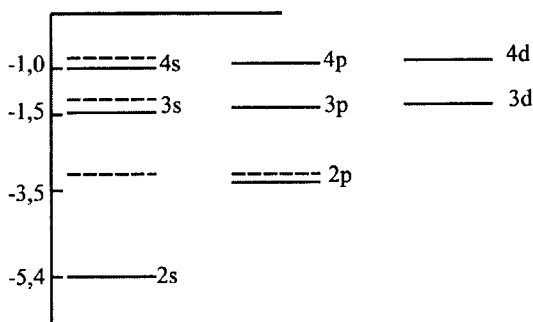
$$E_{nl=0} = -\frac{e^2}{2an^{*2}} = -\frac{e^2}{2a(n - \delta)^2}. \quad (89.20)$$

$n^* = n - \delta$ -dir və δ kəmiyyəti (89.18) ilə verilir.

Litium atomu üçün (ns) və başqa hallara olan düzəlişləri qiymətləndirsək, $l=1$, $n=2$ -yə uyğun $2p$ halında (89.14)-dən δ_l üçün 0,04 qiyməti,

2s halında isə (89.20)-dən bir tərtib böyük qiymət alınır.

δ düzəlişləri qələvi metalların enerji səviyyəsini, hidrogen atomunun uyğun səviyyəsinə nisbətən aşağı sürüşdürür. n baş kvant ədədinin qiyməti böyük olduqca sürüşmə kiçik olur, n -nin müəyyən qiymətində l kiçik olduqca sürüşmə böyük olur. Bunlar Li atomunun enerji səviyyələri diaqramında yaxşı görünür (şəkil 40). Punktirlə uyğun hidrogen atomunun səviyyələri göstərilmişdir.



Şəkil 40. Qələvi metalların enerji səviyyələri (bütöv xətlər) hidrogenin enerji səviyyələrinə (qırıq xətlər) nisbətən aşağı sürüşür.

İndi də qələvi metalların əsas spektral seriyaları ilə tanış olaq. Biz hidrogenin seriyaları ilə müqayisədə yalnız litium və natriumun seriyalarını göstərməklə kifayətlənəcəyik. Seriyalar hidrogen üçün alınmış $\Delta l = \pm 1$ seçmə qaydası gözlənilməklə verilir. Valent elektron litiumda $1s$, natriumda isə $2s$ səviyyələrini tuta bilmədiyindən bunların spektral seriyalarında Layman seriyasının üzərinə düşən seriya yoxdur. Lakin Balmer seriyasına oxşar üç seriya mövcuddur.

1. Baş seriya.

Bu seriyada sabit termlər uyğun olaraq 2^*s və 3^*s , dəyişən term isə (n^*p) -dir:

litium üçün

$$\omega = (n^*p) - (2^*s) = \frac{e^2}{2\hbar a} \left\{ \frac{1}{[2 - \delta(0)]^2} - \frac{1}{[n - \delta(1)]^2} \right\}; \quad (89.21)$$

natrium üçün

$$\omega = (n^*p) - (3^*s) = \frac{e^2}{2\hbar a} \left\{ \frac{1}{[3 - \delta(0)]^2} - \frac{1}{[n - \delta(1)]^2} \right\}.$$

2. Birinci köməkçi seriya.

Bu seriyada sabit term 2^*p və 3^*p , dəyişən term isə (n^*d) -dir:
litium üçün

$$\omega = (n^*d) - (2^*p) = \frac{e^2}{2\hbar a} \left\{ \frac{1}{[2 - \delta(1)]^2} - \frac{1}{[n - \delta(2)]^2} \right\}, \quad (89.22)$$

natrium üçün

$$\omega = (n^*d) - (3^*p) = \frac{e^2}{2\hbar a} \left\{ \frac{1}{[3 - \delta(1)]^2} - \frac{1}{[n - \delta(2)]^2} \right\}$$

3. İkinci köməkçi (kəskin) seriya.

Bu seriyada sabit term (2^*p) və (3^*p) , dəyişən term isə (n^*s) -dir,

litium üçün

$$\omega = (n^*s) - (2^*p) = \frac{e^2}{2\hbar a} \left\{ \frac{1}{[2 - \delta(1)]^2} - \frac{1}{[n - \delta(0)]^2} \right\} \quad (89.23)$$

natrium üçün

$$\omega = (n^*s) - (3^*p) = \frac{e^2}{2\hbar a} \left\{ \frac{1}{[3 - \delta(1)]^2} - \frac{1}{[n - \delta(0)]^2} \right\}.$$

4. Nəhayət qələvi metallarda **fundamental seriya da** müşahidə olunur.
Burada sabit term (3^*d) , dəyişən term isə (n^*f) -dir.

$$\omega = (n^*f) - (3^*d) \quad (89.24)$$

(89.21)–(89.24) ifadələrində $n=3, 4, \dots$ qiymətlərini alır.

Hidrogen atomunda olduğu kimi, bu seriyaların spektral xətlərinin multiplət quruluşu spin və relyativistik effektlərin nəticəsidir. Spektral xətlərin multiplət quruluşunu göstərmək üçün hidrogen atomu üçün çıxarılmış və enerjiyə spin-orbital və relyativistik effektlər hesabına alınan

$$\Delta E_{nlj} = -\frac{\hbar R Z^4 \alpha^2}{n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \quad (89.25)$$

düzəlişin ifadəsindən istifadə etmək olar (bax: §75). $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ – incə

quruluş sabitidir.

Qələvi metallar üçün buna ekvivalent ifadəni (89.25)-də Z -i Z_{ef} ilə əvəz etməklə almaq olar:

$$\Delta E_{nlj} = -\frac{\hbar R \alpha^2 Z_{ef}^4}{n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right). \quad (89.26)$$

Baxılan halın dalğa funksiyası sferik simmetriyaya malik deyilsə, yeni valent elektron hərəkəti zamanı nüvə və daxili elektronlar yerləşdiyi oblasta daxil olmur, $Z_{ef} \neq 1$ götürülə bilər, çünki bu halda $Z-1$ elektronların hamısı nüvə sahəsini ekranlaşdırır.

Halın dalğa funksiyası sferik simmetriyaya malik olduqda, yeni valent elektron nüvə və daxili elektronlar oblastına daxil ola bilirsə, Z_{ef} yalnız təcrübədən təyin oluna bilər.

Daxili (və ya köməkçi) kvant ədədi

$$j = \frac{1}{2}, l = 0; \quad j = l \pm \frac{1}{2}, l \neq 0 \quad (89.27)$$

qiymətlər aldığından qələvi metalların parçalanmayan s -termdən başqa, bütün termləri dublet quruluşu malik olur. Termin parçalanma məsafəsini tapmaq üçün spin və orbital momentlərin paralel və antiparalel olduğu iki hala baxaq.

a) Momentlər paralel olduqda

$$-\frac{\Delta E_{nlj=l+\frac{1}{2}}}{\hbar} = \frac{R \alpha^2 Z_{ef}^4}{n^4} \left(\frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right). \quad (89.28)$$

b) Momentlər antiparalel olduqda

$$-\frac{\Delta E_{nlj=l-1/2}}{\hbar} = \frac{R \alpha^2 Z_{ef}^4}{n^4} \left(\frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right) \quad (89.29)$$

olur. Bunların fərqi parçalanma məsafəsini verir:

$$\Delta \omega_{nl} = \frac{R \alpha^2 Z_{ef}^4}{n^3 l(l+1)}. \quad (89.30)$$

Buradan görünür ki, parçalanma məsafəsi n baş kvant ədədinin kubu ilə tərs mütənəsibdir.

Baş seriyada başlanğıc s term parçalanmır, $l=1$ -ə uyğun dəyişən p -term parçalandığından, onun spektral xətləri getdikcə bir-birinə yaxınlaşan dublet quruluşa malik olur:

$$\Delta\omega_n = \frac{R\alpha^2 Z_{ef}^4}{2n^3}.$$

İkinci köməkçi seriyaya gəldikdə isə başlanğıc $n=2$, $l=1$ termi parçalanır, dəyişən s -term isə parçalanmır. Ona görə də seriyanın bütün xətləri üçün parçalanma məsafəsi eyni olur:

$$\Delta\omega_2 = \frac{R\alpha^2 Z_{ef}^4}{16}.$$

Qalan başqa seriyalarda həm başlanğıc və həm də dəyişən term parçalanan olduğundan, onlarda spektral xətlərin multiplet quruluşu mürəkkəb olur.

§90. Atomların rentgen spektrləri (Xarakteristik spektrlər)

Optik spektrlər xarici təbəqələrin elektron konfigurasiyası haqqında məlumat verirə, rentgen spektrləri daxili təbəqələrin elektron konfigurasiyası haqqında məlumat almağa imkan verir.

Optik elektronlar atomun nüvəsi ilə zəif rabitədə olduğundan onları həyəcanlandırmaq, yəni yuxarı boş enerji səviyyəsinə keçirmək üçün lazım olan enerji də az (bir neçə on eV) olur. Bu onunla əlaqədardır ki, n baş kvant ədədi böyüdükcə təbəqə və örtüklər arasındakı məsafə (enerji vahidlərində) kiçilir və nisbətən az enerji keçid yarada bilir.

Orta və ağır atomların daxili təbəqələrində elektronların nüvə ilə rabitə enerjisi isə xeyli böyükdür (bir neçə on keV). Belə təbəqədəki elektronu xarici təbəqələrin birindəki boş yerə keçirmək üçün ona kifayət qədər böyük enerji vermək lazım gəlir.

Belə keçidləri yaratmaq üçün rentgen borusunun antikatodu sürətli elektron seli ilə bombardman edilir. Bu zaman bütöv və xətti spektrə malik iki növ rentgen şüalanması buraxılır. Bütöv spektrli rentgen şüalanması antikatoda düşən elektronların tormozlanması nəticəsində yaranır. Düşən elektron selinin enerjisi götürülən elementə uyğun hər hansı kritik qiyməti keçdikdə antikatod *xətti rentgen spektri* şüalandırır. Buna *xarakteristik spektr* də deyilir, belə ki, hər bir element özünə xas olan rentgen spektri şüalandırır.

Elementin rentgen spektrlərinin xarakteri, optik spektrlərdən fərqli olaraq, baxılan elementin atomar halda və ya hər hansı kimyəvi birləşmənin tərkibində olmasından asılı olmur.

Bütün elementlərin rentgen spektrləri o qədər də çox olmayan və bir-birindən eyni məsafədə yerləşmiş spektral xətlərdən ibarətdir. Bütün spektr xətləri eyni incə quruluşa malik olur və bir elementdən digərinə keçdikdə spektr xətləri tezlik şkalasında yerini dəyişir.

Elementlərin rentgen spektrləri də, xətti optik spektrlər kimi, bir sıra seriyalardan ibarətdir. Onlar elektron hansı daxili təbəqədən çıxıbsa, o təbəqənin də adını daşıyır və hansı xarici təbəqəyə düşməsindən asılı deyil. Seriyalar uyğun olaraq K -seriya, L -seriya, M -seriya və i.a. adlanır.

Orta və ağır atomlarda K , L , M , ... təbəqələri dolmuş olur. Dolmuş təbəqədəki elektronların ümumi tam mexaniki momenti sifra bərabərdir. Hər hansı (nl) örtüyündən bir elektron çıxanda, örtük müəyyən bir j tam momenti qazanır və bu həyəcanlanmış hal (nlj) kvant ədədləri ilə xarakterizə olunur.

Boş yerin hansı örtükdə yaranmasından və j kvant ədədinin $j = l \pm \frac{1}{2}$ qiymətindən asılı olaraq, *rentgen termləri* adlanan bu həyəcanlanmış səviyyələr aşağıdakı kimi işarə olunur.

Boş yer olan səviyyə:

$$1s_{1/2}, 2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}, 3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{3/2}, 3d_{5/2}, 4s_{-1/2}, \dots$$

Termlər:

$$K \ L_I \ L_{II} \ L_{III} \ M_I \ M_{II} \ M_{III} \ M_{IV} \ M_V \ N_p, \dots$$

Atomdan qoparılmış elektron K -təbəqədən ($1s_{1/2}$ örtüyündən) çıxıbsa, alınmış boş yerə L , M , N və i.a. təbəqələrdən elektronlar keçə bilər. Bu keçidlərə uyğun rentgen spektrinin xətləri K_α , K_β , K_γ kimi işarə olunur. Belə xətlər çoxluğu K -seriya adlanır (şəkil 41). Boş yer L -təbəqədə yaranıbsa ($2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ örtüklərindən birində), alınan rentgen spektr xətlər çoxluğu L -seriya və i.a. adlanır.

Mürəkkəb atomlar nəzəriyyəsi əsasında bir optik elektronlu atomların xassələrini təhlil edəndə nüvənin və daxili elektronların yaratdığı birgə sahənin potensialı

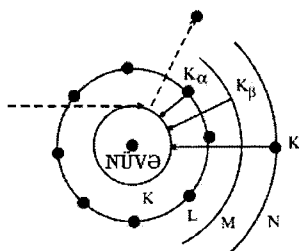
$$V(r) = \frac{eZ_{ef}}{r} = \frac{e(Z - N(r))}{r} \quad (90.1)$$

şəklində götürülmüşdü. Burada $N(r)$ – nüvənin sahəsinə ekranlaşdıran elektronların sayıdır. Nüvədən xeyli uzaq təbəqədə hərəkət edən elektron üçün

ekranlaşmanın təsiri böyük, yaxın təbəqədə isə xeyli kiçikdir.

Rentgen spektrlərinin yaranmasında nüvəyə yaxın daxili təbəqələrdəki elektronlar iştirak etdiyindən, onlardan birinin birgə sahədəki hərəkətində ekranlaşmanı nəzərə alan parametr, yəqin ki, əsasən n baş kvant ədədinin və ya da (n, l) kvant ədədlərinin (ekranlaşma l üzrə cırılşmanı ortadan çıxardığından) funksiyası olar. Bu parametri σ_n (və ya σ_{nl}) kimi işarə etsək, daxili təbəqələrdəki elektronlara təsir edən birgə sahənin potensialı

$$V(r) = \frac{e(Z - \sigma_n)}{r} \quad (90.2)$$



Şəkil 41. Xarakterik spektrin yaranma sxemi. Qırıq xətlər elektronun K örtüyündən çıxarılmasını göstərir.

kimi yazılar. n və eləcə də l böyüdükcə nüvə sahəsini ekranlaşdıran elektronların N sayı çoxaldığından σ_n də böyüyür. Birinci yaxınlaşmada l -dən asılılığı nəzərə almasaq, (90.2) ifadəsi vasitəsilə atomun rentgen termlərinin analitik ifadəsini almaq üçün hidrogenin enerji səviyyələri üçün alınmış ifadədə (bax: §40-da (40.26) formulası) Z -i $Z - \sigma_n$ ilə əvəz etmək lazımdır. Doğrudan da, eyni n baş kvant ədədinə malik termlər, müxtəlif n -lərə uyğun termlərə nəzərə bir-birinə yaxın yerləşir. Bu, daxili təbəqələrdəki elektronların nüvəyə yaxın yerləşməsi nəticəsidir. Onlar üçün nüvə

sahəsi zəif ekranlaşmış olduğundan, termlərin enerjisinin, hidrogendəki kimi, yalnız n -dən asılı hesab etmək olar.

$$E_n = -\frac{me^4(Z - \sigma_n)^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{R\hbar(Z - \sigma_n)^2}{n^2}. \quad (90.3)$$

Buradan rentgen spektrlərində spektr xətlərinin tezliyi üçün

$$\omega_{n'n} = \frac{E_{n'} - E_n}{\hbar} = R \left[\frac{(Z - \sigma_n)^2}{n^2} - \frac{(Z - \sigma_{n'})^2}{n'^2} \right] \quad (90.4)$$

ifadəsi alınır. (90.4)-dən K seriyasına daxil olan K_α xəttinin tezliyi

$$\omega_{K_\alpha} = R \left[\frac{(Z - \sigma_1)^2}{1^2} - \frac{(Z - \sigma_2)^2}{2^2} \right] \quad (90.5)$$

olur. (90.4) və (90.5)-dən görünür ki, rentgen spektral xətlərinin tezliyi Z -in kvadratı ilə monoton artır.

Bu qanunu təcrübi olaraq 1914-cü ildə Mozli tapmışdı. Mozli (90.5) ifadəsini

$$\omega_{K_\alpha} = R(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) \quad (90.6)$$

şəklində yazmışdı. Əlbəttə, K və L təbəqələri üçün σ_1 və σ_2 fərqləndiyindən ($\sigma_1=1$, $\sigma_2=3,5$) Mozlinin ifadəsi dəqiq deyil. Rentgen spektrləri tədqiq ediləndə hər termə uyğun σ_n -nin qiyməti təyin edilməlidir.

(90.3)-dən termin ifadəsi

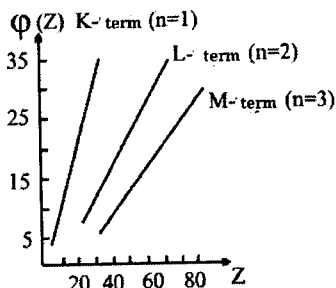
$$\sqrt{\frac{T_n}{R}} = \sqrt{\frac{E_n}{R\hbar}} = \frac{Z - \sigma_n}{n} \quad (90.7)$$

olar. Bu asılılıq *Mozli qanunu* adlanır və o, adətən qrafiki tədqiq olunur. Mozli

$$\sqrt{\frac{T_n}{R}} = \varphi(Z) \quad (90.8)$$

asılılığını qrafik qurmuşdu. Alınan əyrilər Mozli əyriləri adlanır (şəkil 42).

Diqqətlə aparılan tədqiqatlar rentgen spektral xətlərinin multipol quruluşu malik olduğunu göstərmişdir. Xətlərin multipol quruluşunu izah etmək üçün (90.3) ilə verilmiş E_n -ə relyativistik effektlər hesabına alınan ΔE_{nj} düzəlişini əlavə etmək lazımdır. Bu halda Mozli qanunu



Şəkil 42. Mozli diaqramı.

$$\sqrt{\frac{T_{nj}}{R}} = \frac{Z - \sigma_n}{n} + \frac{1}{2} \cdot \frac{(Z - \sigma_n)^3 \alpha^2}{n^3} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \quad (90.9)$$

şəklini alır. Buradan görünür ki, K termi $\left(l=0, j=\frac{1}{2} \right)$ parçalanmır. L və

başqa termlər isə $j = l \pm \frac{1}{2}$ qiymətinə uyğun ikişər (dublet) termə parçalanır.

Beləliklə, relyativistik effektlərin nəzərə alınması j -nin müxtəlif qiymətlərinə uyğun termlərin parçalanmasına gətirir. Məsələn, L_I və L_{II} termləri L_{III} termdən, M_I və M_{II} termləri M_{III} və M_{IV} -dən və i.a. ayrılır. Belə termlər (enerji səviyyələri) *relyativistik* və ya *requlyar dubletlər* adlanır. j -si eyni, l -i müxtəlif olan termlərin bir-birindən ayrılması isə baxılan elektronun digər elektronlarla qarşılıqlı təsiri nəticəsində birgə sahənin Kulon sahəsindən fərqlənməsi, başqa sözlə, nüvə sahəsinin ekranlaşması ilə bağlıdır. Bu halda, məsələn, L_I termi L_{II} -dən, M_I -termi M_{II} -dən və i.a. ayrılır. Belə ikişər termlər *ekranlaşmış* və ya *irrequlyar dubletlər* adlanır.

Beləliklə, əsasını Dirak nəzəriyyəsi təşkil edən kvant mexanikası rentgen spektrlərinin tam nəzəri izahını verə bilər.

§91. Kimyəvi elementlərin dövri (Mendeleyev) sistemi

Mendeleyevin 1869-cu ildə kəşf etdiyi kimyəvi elementlərin dövri sistemi nəinki kimyanın, hətta atom və nüvə fizikasının da əsasını təşkil edir. Sonralar müəyyən olundu ki, atomun nüvəsi onun elektron örtüyünün quruluşunu və beləliklə də elementlərin fiziki və kimyəvi xassələrini təyin edir. Nüvənin özünün quruluşuna gəldikdə isə müəyyən olundu ki, nüvə, kütləsi $M_p=938,3 \text{ MeV}$ olan müsbət yüklü protonlardan və kütləsi $M_n=939,5 \text{ MeV}$ olan yüksüz neytronlardan təşkil olunmuşdur. Müasir təsəvvürlərə görə proton, neytron və eləcə də bütün adronlar kvark adlanan fermionlardan təşkil olunub. Adronların tərkibində kvarkları tutub saxlayan cazibə qüvvələri (bunlar nüvə qüvvələri də adlanır) isə qlüon adlanan nüvə sahəsinin kvantları ilə daşınır. Atom nüvəsinə olan bu baxış onun təcrübədə müşahidə olunan karakteristikalarının – kütləsinin və yükünün nəzəri tədqiqinə imkan verir.

Beləliklə, elementlərin xassələrinin dövriliyinin təbiətini izah etmək üçün nüvənin məlum yükü və kütləsi əsasında elektronların atomdakı hərəkətini öyrənməklə kifayətlənirlər. Mürəkkəb atomların tərkibində elektronların sayı çox olduğundan baxılan məsələ riyazi olaraq fəvqəladə çətin bir məsələdir. Belə ki, hətta riyazi fizikada üç cisim məsələsi indiyə kimi tam həllini tapmamışdır.

Lakin 86 və 92 §-lərdə mürəkkəb atomların dalğa funksiyalarını və enerjilərini hesablamaq üçün Xartri–Fok və Tomas–Fermi tərəfindən təklif olunmuş metodlar şərh olunmuşdur. Onlarda iddia olunur ki, mürəkkəb atomda hər bir elektronun hərəkətinə, Pauli prinsipi ödənilməklə, nüvənin və qalan elektronların özünə uzlaşan sahəsində sərbəst (digərlərinin hərəkətindən asılı olmayan) hərəkəti kimi baxmaq olar.

Bu iddia atomda elektronların yerləşmə qaydasını və onunla birlikdə elementlərin kimyəvi xassələrinin dövriliyini başa düşməyə imkan verir.

Mendeleev, dövrü cədvəldə elementləri əsasən atom çəkisinin artmasına görə düzşə də, elementin cədvəldəki Z sıra nömrəsinə və elementlərin kimyəvi xassələrinin dövriliyinə xüsusi əhəmiyyət vermişdi. O, hər bir elementi cədvəldə yerini təyin edən nömrə (sıra nömrəsi) ilə təmin etmiş və ona məlum olan elementləri kimyəvi xassələrinə görə qruplara bölmüşdü.

Sonralar aydınlaşdı ki, elementin Z sıra nömrəsi dərin fiziki mənaya malikdir. Elementar yük vahidində və atom neytral olduğundan ondakı elektronların sayı Z -ə bərabərdir. Yuxarıda qeyd edildi ki, atomun nüvəsi müsbət yüklü protonlardan və yüksüz neytronlardan təşkil olunmuşdur. Deməli, nüvənin tərkibində protonların sayı Z -ə, neytronların sayı N isə A atom çəkisi ilə Z -in fərqi bərabərdir: $N = A - Z$.

Sonrakı tədqiqatlar göstərdi ki, Z -i eyni olub, A atom çəkisi ilə fərqlənən elementlər də mövcuddur. Yəqin ki, belə elementlərin hamısı dövrü cədvəlin bir xanasında yerləşir. Onlar *izotoplar* adlanır. Elementin kimyəvi xassələri onun atomunun xarici təbəqəsindəki elektronların sayı ilə təyin olduğundan, ilk baxışda iddia etmək olar ki, bütün izotop elementlər eyni bir kimyəvi xassələrə malik olmalıdır. Lakin bu iddia təxmini xarakter daşıyır, çünki izotoplar, məsələn kinetik reaksiyalarda özlərini müxtəlif cür aparır, çünki bu reaksiyalarda yalnız elektronların sayı yox, atomun kütləsi də mühüm rol oynayır. Fiziki xassələrinə görə isə izotoplar bir-birindən xeyli fərqlənə bilər. Məsələn, uranın U^{235} izotopu yavaş neytronlarla zəncirvari reaksiya yaradırsa, U^{238} izotopu yalnız sürətli elektronlarla həmin reaksiyanı yaradır və i.a.

Nüvədə proton və neytronların sayının təxminən bərabər olması nəticəsində elementlərin dövrü cədvəldə atom çəkisinin artmasına görə düzülüşü, nüvənin yükünün (Z -in) artmasına görə düzülüşlə, demək olar ki, eyni olur.

Z sıra nömrəsinin artması ilə elementlərin kimyəvi xassələrinin dövriliyini və ardıcıl dəyişmə prinsipini aydın başa düşmək üçün elektronların atomun təbəqə və örtüklərində (enerji səviyyələrində) yerləşmə qaydası ilə tanış olaq.

Bunun üçün fərz edək ki, hər bir element ondan əvvəlki elementin nüvəsinə bir protonun, elektron örtüyünə isə bir elektronun əlavə edilməsi ilə yaranır. Kvant mexanikasının prinsiplərinə görə atomun dörd n , l , m , m_s kvant ədədləri ilə təyin olunan səviyyəsində yalnız bir elektron ola bilər (Pauli prinsipi) və elektron həmişə ən aşağı enerji səviyyəsini tutmağa çalışır. n baş kvant ədədi böyüdükcə mərkəzi sahədə hərəkət edən elektronun enerjisi böyüdüyündən (bax: §40) elektronlar ardıcıl olaraq atomun əvvəlcə $n=1$ -ə uyğun K təbəqəsini, sonra $n=2$ -yə uyğun L təbəqəsini, daha sonra $n=3$ -ə uyğun M təbəqəsini və i.a. tutmağa başlayır.

Atomda elektron təbəqələrinin belə ardıcıl dolması o zaman tam doğru olardı ki, $+eZ$ yüklü nüvə və $Z-1$ sayda elektronlar tərəfindən atomun hər bir elektronuna təsir edən sahə nöqtəvi yükün yaratdığı sahə ilə eyni olsun.

Bu halda atomun hər bir enerji səviyyəsi l tərtibdən cırlaşmış olardı (hidrogen atomunda olduğu kimi).

Lakin §88-də mürəkkəb atomların tədqiqi göstərdi ki, elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsirin və atomun yükünün onun həcmi üzrə yayılmasının nəzərə alınması enerji səviyyələrinin l üzrə cırlaşmasını ortadan götürür və baxılan təbəqədə elektron örtüklərinin l -in artması istiqamətində düzülüşünə gətirir. Hər bir təbəqədə ardıcıl olaraq əvvəlcə s , sonra p , daha sonra d və i.a. örtüklər dolur.

Aşağıda görəcəyimiz kimi, elektronlararası qarşılıqlı təsirin və yükün atomun həcmində yayılma effekti dördüncü və ondan sonra gələn dövrlərdə özünü göstərir. Birinci, ikinci və üçüncü dövrlərdə isə atomların enerji səviyyələrinin elektronlarla tutulması hidrogen atomundakı enerji səviyyələrinin düzülüşünə uyğun olur.

Neytronu dövrü sistemin sıfırıncı dövrü təşkil edən sıfırıncı elementi ($Z=0$) hesab etmək olar. Nüvəsi müsbət yüklü bir protondan ibarət olan hidrogen isə birinci dövrin birinci elementidir ($Z=1$). Onun bir elektronu normal halda K təbəqəsindəki yeganə s örtüyünü təşkil edən iki

$\left(n=1, l=0, m=0, m_s = \pm \frac{h}{2} \right)$ halın birində yerləşir. Hidrogenin elektron

konfigurasiyası $1s^1$ -dir.

Hidrogenin nüvəsini bir $+e$ qədər artırıb, elektron təbəqəsinə də bir elektron əlavə etsək, helium (He) atomunu alarıq. İkinci elektronun spini əvvəlki elektronun spininə paralel deyilsə, o, K təbəqəsindəki s örtüyündə boş olan səviyyəni tutar. Beləliklə, K örtüyü tam dolmuş olar. Bununla da dövrü sistemin yalnız iki – hidrogen (H, $Z=1$) və heliumdan (He, $Z=2$) ibarət birinci dövrü qurtarmış olur. Heliumun elektron konfigurasiyası $1s^2$ -dir.

Helium atomu nüvəsinin yükünü bir vahid ($+e$) artırıb, elektron təbəqəsinə bir elektron əlavə etsək, litium (Li, $Z=3$) atomunu alarıq. K təbəqəsi artıq dolmuş olduğundan litiumun üçüncü elektronu, yaqın ki, K -dan sonra

gələn L təbəqəsinin birinci s örtüyündə $(n=2, l=0, m=0, m_s = \pm \frac{h}{2})$

yerləşər. Beləliklə, litium ilə dövrü sistemin ikinci dövrü başlanır. Yuxarıda qeyd edilmişdi ki, L təbəqəsi $2s$ və $2p$ örtüklərindən ibarətdir. s örtüyündə 2, p örtüyündə isə 6 elektron yerləşə bildiyindən L təbəqəsində elektronların maksimum sayı 8 olar. Deməli, hər əvvəlki elementin nüvəsinə bir proton və atoma bir elektron əlavə etməklə, ardıcıl olaraq, berillium (Be, $Z=4$), bor (B, $Z=5$), karbon (C, $Z=6$), azot (N, $Z=7$), oksigen (O, $Z=8$), fluor (F, $Z=9$) və nəhayət onuncu element neonda (Ne, $Z=10$) L -təbəqəsi tam dolmuş olar. Neonun elektron konfigurasiyası $1s^2 2s^2 2p^6$ -dır. Beləliklə, dövrü sistemin ikinci dövrü 8 elementdən ibarət olur.

Dövrü sistemin üçüncü dövrü natriumdan (Na, $Z=11$) başlanır. Onun on birinci elektronu K və L təbəqələri dolduğundan, yaqın ki, M ($n=3$) təbə-

qəsinin $3s$ örtüyündə yerləşər. Maqnezium (Mg, $Z=12$) elementində $3s$ örtüyü dolur. Alüminium (Al, $Z=13$) elementində $3p$ - örtüyü dolmağa başlayır. Sonra silisium (Si, $Z=14$), fosfor (P, $Z=15$), kükürd (S, $Z=16$), xlor (Cl, $Z=17$) və nəhayət arqonda (Ar, $Z=18$) $3p$ örtüyü tam dolur. Arqonun elektron konfigurasiyası $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ olur. Beləliklə, üçüncü dövr başa çatır. Gördüyümüz kimi bu dövr də 8 elementdən ibarət olur.

Arqonun nüvəsinin yükünü bir vahid artırıb, onun elektron təbəqəsinə bir elektron əlavə etsək, kalium (K, $Z=19$) elementini alarıq. M təbəqəsində $3s$ və $3p$ örtükləri dolduğundan, əvvəldəki kimi örtüklərin ardıcıl dolmasını tələb etsək, onun 19-cu elektronu M təbəqəsində boş olan $3d$ örtüyündə yerləşməli idi. Lakin kalium elementi özünün optik və kimyəvi xassələrinə görə xarici s örtüyündə bir optik (valent) elektron olan Li, Na elementlərinə çox oxşayır. Ona görə də onun sonuncu elektronunu s - örtüyündə yerləşdirmək lazım gəlir. Bu örtük, yəqin ki, $n=4$ və $l=0$ -a uyğun N təbəqəsinin $4s$ örtüyü olar. Bu yalnız onunla izah oluna bilər ki, $4s$ səviyyəsi $3d$ səviyyəsindən (termdən) aşağıda yerləşsin.

Doğrudan da, elektronların qarşılıqlı təsiri və yükün həcmdə yayılması nəticəsində n baş kvant ədədinə olan δ_l əlavəsi digər termlərə nəzərən s -termi üçün daha böyük qiymətə malik olur. Məsələn, $4s$ termi üçün $\delta_l = 2,23$, $3d$ termi üçün isə $\delta_l = 0,146$ -dır. Termin

$$\frac{E_{nl}}{\hbar} = -\frac{R}{(n - \delta_l)^2}$$

kimi təyin olunduğunu nəzərə alsaq,

$$E_{4s} = -\frac{R\hbar}{(4 - 2,23)^2}$$

və

$$E_{3d} = -\frac{R\hbar}{(3 - 0,146)^2}$$

olur. E_{4s} ilə E_{3d} -nin müqayisəsindən $E_{4s} < E_{3d}$ alınır.

Beləliklə, kalium (K, $Z=19$) elementi ilə dördüncü dövr başlanır. İyirminci element kalsiumun (Ca, $Z=20$) sonuncu elektronu da $4s$ örtüyündə yerləşir. Örtüklərin ardıcıl dolma prinsipinə görə skandiumun (Sc, $Z=21$) iyirmi birinci elektronu $4p$ örtüyündə yerləşməli idi. Lakin $E_{3d} < E_{4p}$ olduğundan o, $3d$ örtüyünə keçir. Bildiyimiz kimi $d(l=2)$ örtüyündə yerləşəcək elektronların maksimum sayı 10-a bərabərdir. $3d$ örtüyünün dolma

prosesində xromda (Cr, $Z=24$) ardıcılıq nisbətən pozulur. Onun 4s örtüyündə iki əvəzinə bir, 3d örtüyündə isə dörd əvəzinə beş elektron olur. Sonra yenə 3d örtüyü dolmağa başlayır. Xromdakı anomaliya misdə (Cu $Z=29$) də təkrar olunur. Onun 4s örtüyündə bir, 3d örtüyü isə tam dolmuş olur. Sinqin (Zn, $Z=30$) sonuncu elektronu 4s -i doldurur. Qalliumdan (Ga, $Z=31$) başlayaraq 4p-örtüyü dolmağa başlayır və o, kriptonunda (Kr, $Z=36$) tam dolmaqla dördüncü dövrü tamamlayır. Kriptonun elektron konfigurasiyası $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$ şəklindədir. Beləliklə, dördüncü dövrə kaliumda başlayıb, kriptonunda qurtarır. Bu dövrə on səkkiz element daxildir.

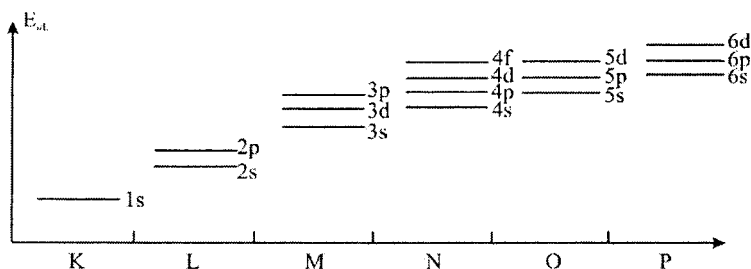
Dövrə sistemin beşinci dövrə rubidiumla (Rb, $Z=37$) başlanır. O, optik və kimyəvi xassələrinə görə natrium və kalium elementlərini xatırladır. N-təbəqənin 4d və 4f örtüklərinin boş olmasına baxmayaraq, onun 37-ci elektronu O təbəqəsinin 5s örtüyündə yerləşir. Bu o deməkdir ki, 5s-termi 4d və 4f termlərindən aşağıda yerləşir. Ondan sonra gələn stronsium (Sr, $Z=38$) elementinin sonuncu elektronu da 5s -ə daxil olur, çünki stronsium öz xassələrinə görə kalsiuma oxşayır. Ondan sonra gələn itrium (Y, $Z=39$) elementindən N təbəqəsinin 4d örtüyü, indium (In, $Z=49$) elementindən isə O təbəqəsinin 5p örtüyü dolmağa başlayır və ksenonda (Xe, $Z=54$) o tam dolur. Ksenonun elektron konfigurasiyasını yazmaq üçün kriptonun elektron konfigurasiyasına $4d^{10} 5s^2 5p^6$ əlavə etmək lazımdır. Bu dövrə rubidiumda başlayıb ksenonda qurtarır. Dövrə on səkkiz element daxildir. Elektron örtüklərinin dolma qaydasına görə dördüncü dövrə təkrar edir.

Altıncı dövrə sezium (Cs, $Z=55$) elementindən başlayır. Onun sonuncu elektronu P təbəqəsinin 6s örtüyündə yerləşir. Bariumda (Ba, $Z=56$) 6s -örtüyü dolur. Sonra gələn elementlərdə qismən 5d, seriumdan (Ce, $Z=58$) başlayaraq isə daxili 4f örtüyü dolmağa başlayır və o, lütensiumda (Ln, $Z=71$) tam dolur. Seriumda başlayıb lütensiumda qurtaran bu on dörd elementin optik və kimyəvi xassələri bir-birinə çox yaxındır (onların xarici elektron örtükləri demək olar ki, eyni quruluşa malikdir). Bu elementlər qələvi torpaq metalların xassələrini təkrar etdiyindən, onların hamısı dövrə cədvəldə bir xanada – lantanidium elementinin xanasında yerləşdirilir və «lantanoidlər» adlanır.

Lantanoidlər qrupunun təhlili ilə əlaqədar demək lazımdır ki, uzun müddət hafnium (Hf, $Z=72$) elementini də bu qrupa daxil edirdilər. Lakin Bor nəzəri olaraq göstərdi ki, hafnium bu qrupa daxil olmamalıdır, çünki 4f örtüyündə yerləşə biləcək elektronların maksimum sayı 14-dən artıq ola bilməz. Böyük səylə aparılan təcrübə analiz göstərdi ki, hafniumun optik və kimyəvi xassələri sirkoniumun (Zr, $Z=40$) xassələrini xatırladır.

Hafniumdan başlayaraq əvvəlcə 5d, sonra isə 6p örtüyü dolmağa başlayır və o, radonda (Rn, $Z=86$) tam dolur. Bununla altıncı dövrə qurtarır. Bu dövrə 32 element daxildir. Radonun elektron konfigurasiyasını almaq üçün ksenonun elektron konfigurasiyasına $4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$ əlavə etmək lazımdır.

Atom termlərinin düzülmə ardıcılığı şəkil 43-də göstərilmişdir.



Şəkil 43. Atom termlərinin düzülüş sxemi.

Nəhayət fransiumdan (Fr, $Z=87$) başlayaraq yeddinci dövr başlanır. O, demək olar ki, örtüklərin dolma prinsipinə görə altıncı dövrü təkrar edir. Bu dövrdə də 32 element olmalı idi. Bu dövrdə, altıncı dövrdə olduğu kimi, əvvəlcə $7s$, sonra isə ardıcıl olaraq $5d$, $5f$ və $7p$ örtükləri dolmalı idi. Lakin bu dövrə daxil olacaq elementlərdən yalnız 20-yə yaxın element məlumdur. Radiumda (Ra, $Z=89$) $7s^2$ örtüyü dolur. Aktiniumun son elektronu $6p^1$ -də yerləşir. Torium (Th, $Z=90$)-dan başlayaraq laurensium (Lr, $Z=103$) daxil olmaqla on dörd element, altıncı dövrə oxşar olaraq, ikinci daxili $5f$ örtüyünü doldurur. Onların optik və kimyəvi xassələri, lantanoidlərdə olduğu kimi, bir-birinə çox yaxındır. Bu on dörd element dövrü cədvəldə aktiniumun xanasında yerləşdirilir və “*aktinoidlər*» adlanır. Onlar yəqin ki, lantanoidlərin xassələrini təkrar edir.

Axır illərdə urandan sonra gələn elementlərin kəşfi dövrü cədvəli genişləndirmişdir. Bu gün təxminən 108-ə qədər element məlumdur. Onlardan neptinium (Np, $Z=93$) və plotiniumun (Pu, $Z=94$) nüvə enerjisi sənayesində böyük əhəmiyyətə malikdir (bax: forzas Mendeleyev cədvəli).

Yuxarıda dediklərimizdən görünür ki, elementlərin kimyəvi xassələrində Mendeleyevin kəşf etdiyi dövrlük, kvant mexanikası baxımından, atomların xarici elektron örtüklərinin quruluşunun təkrarı ilə əlaqədardır. Dövr başlanan elementin xarici ns^1 örtüyündə bir, dövr tamamlanan elementin xarici ns^2np^6 örtüklərində isə səkkiz elektron olur və onlar elementin nəinki kimyəvi, fiziki xassələrini də təyin edir.

Xarici təbəqədəki elektronların sayına görə bütün elementlər *səkkiz qrupa* bölünür.

Hidrogenlə birgə litium, natrium, kalium və b. qələvi metallar daxil olan birinci qrupdakı elementlərin hamısının xarici təbəqəsinin s örtüyündə bir elektron (ns^1) var. Onların hamısı kimyəvi reaksiyalarda bir valentli element kimi iştirak edir və şüalanma (şüaudma) spektrində spektr xətləri dublet quruluşa malik olur.

İkinci qrupa daxil olan qələvi torpaq metalların Be, Mg, Ca və b. xarici təbəqəsinin s örtüyündə iki elektron (ns^2) olur. Onlar kimyəvi reaksiyalarda iki valentlidir və spektr xətləri ya sinqlet və ya da triplet quruluşa malikdir. Xarici örtükdə iki elektronu olan helium, elektron konfigurasiyasına görə qələvi torpaq metalları xatırladır. Qələvi torpaq metallarda olduğu kimi, iki elektronlu sistemin tam spin momentinin sıfır və ya vahid olmasına uyğun olaraq, heliumun da enerji səviyyələri (spektr xətlərinin quruluşu) ya sinqlet və ya da triplet quruluşa malikdir (bax §83–85). Lakin helium özünün kimyəvi xassələrinə görə təsirsiz qazdır. Bu onunla izah olunur ki, helium üçün birinci K təbəqə elektronlarla dolmuş olur, ikinci L təbəqə isə K -dan xeyli uzaqda yerləşir və o, adi şəraitdə kimyəvi reaksiyalara girə bilmir.

Üçüncü qrupu təşkil edən bor, alüminium, skandium və b. elementlərin xarici təbəqəsində üç (ns^2np^1) elektron olur.

Onların maksimum valenti üç, spektr xətləri kvartet (dörd) quruluşludur. Lakin qeyd edək ki, skandiumdan ($3d^14s^2$) başlayıb nikelde ($3d^84s^2$) $3d$ daxili örtüyü dolan dördüncü dövr elementlərinin xarici örtüklərinin elektron konfigurasiyası $3d^k4s^2$ şəklindədir ($k=1\div 8$). Bu örtüklərdəki elektronların sayı elementlərin hec də valentliyini təyin etmir, belə ki, valentlik ümumiyyətlə kompensə olunmamış spinlərin sayı ilə təyin edilir. Bu say isə səkkizdən (təsirsiz qazlar) artıq ola bilməz. Digər tərəfdən bu dövrdə daxil olan dəmir ($Z=26$), kobalt ($Z=27$) və nikel ($Z=28$) elementləri kimyəvi və fiziki xassələri ilə bir-birinə oxşayır. Məsələn, daxili $3d$ -də kompensə olunmamış spinlər hesabına onlar kifayət qədər güclü ferromaqnit xassələrə malikdir. Bu onunla əlaqədardır ki, kristal qəfəs yarananda $3d$ səviyyəsi, spinlər kompensə edilməmiş digər səviyyələrə nəzərən xeyli əlverişli olur.

Beləliklə, bütün qruplar haqqında danışmaq olar. Maraqlananlar ədəbiyyata müraciət edə bilərlər. Biz isə axırıncı iki (yeddi və səkkiz) qrup haqqında bəzi qeydlərlə kifayətlənəcəyik.

Flor, xlor, brom və b. hallogenlər (yeddiinci) qrupuna daxil olan elementlərin xarici təbəqəsində, onların, təsirsiz qazların xarici təbəqəsinin quruluşunu tamamlamaq üçün bir elektron çatmır. Bu elementlər kimyəvi reaksiyalarda maksimum yeddi müsbət valentli olmaqla yanaşı, ion birləşmələrində onlarla reaksiyaya girən elementin atomundan bir elektronu özünə birləşdirməklə bir mənfə valentli də ola bilər.

Nəhayət (ns^2np^6) xarici elektron örtüyü dolmuş neon, arqon, kripton və i. a. təsirsiz qazların xarici təbəqəsində səkkiz elektron olduğunu əsas tutaraq, onlar səkkizinci qrupa daxil edilir. Təbəqələrarası məsafə (enerji vahidlərində) örtüklərarası məsafəyə nəzərən böyük olduğundan, bu elementlər adi şəraitdə kimyəvi reaksiyalara girmir, belə ki, kimyəvi reaksiyanın yaratdığı həyəcanlanma enerjisi təbəqələrin enerjiləri arasındakı fərqdən xeyli kiçik olur. Bu səbəbdən onlar təsirsiz qazlar adlanır.

§92. Statistik Tomas–Fermi metodu

Xartri–Fok metodu ilə atomun quruluşunun öyrənilməsi kifayət qədər dəqiq nəticələrə gətirirsə də, aparılan ədədi hesablamaların həcmi ağır atomlara keçdikcə artdığından, xeyli çətinliklərə gətirir. Doğrudan da, helium misalında gördüyümüz kimi, Xartri–Fok tənliklər sisteminə tənliklərin sayı atomdakı elektronların sayına bərabərdir və ağır atomlar üçün belə sistemin hətta ədədi hesablanması məsələsi çətin bir problemə çevrilir.

Kvant mexanikasının müddəaları əsasında inkişaf etdirilən təxmini metodlarla yanaşı, statistik fizika qanunları əsasında inkişaf etdirilmiş təxmini metodlar da yaradılmışdır.

Bildiyimiz kimi statistik metodlar eyni təbiətli hadisələr çoxluğunun ümumi qanunauyğunluqların öyrənilməsi üçün tətbiq olunur. Tomas–Fermi metodu çoxelektronlu atomlara tətbiq edildikdə nisbətən dəqiq nəticələrə gətirir. Əlbəttə, Xartri–Fok metodunda Tomas–Fermi metoduna nisbətən daha dəqiq nəticələr alınır, beləki, statistik metod ilə atomda ayrıca götürülmüş elektronun fərdi xassələrini təfəsilatla təsvir etmək mümkün deyildir. Buna baxmayaraq baxılan metod atomun ümumi xassələrini – radiusunun tərtibini qiymətləndirməyə, ionlaşma enerjisini, polyarlaşmanı və elektron örtüyünün dolmasındakı əsas xüsusiyyətləri izah etməyə imkan verir.

Tomas–Fermi metodunun əsas müddəası – atomda elektron yükünün nüvəyə nəzərən ölçülən r məsafəsindən asılı $\rho(r)$ sıxlığı ilə kəsilmədən paylanmasıdır.

Yəqin ki, belə fərziyyə ağır atomlar üçün daha doğru olar. Onlarda elektronların əksəriyyəti n baş kvant ədədinin böyük qiymətlərinə uyğun səviyyələri tutur və n böyüdükcə enerji səviyyələri daha sıx yerləşir. Bu cür yerləşmiş elektronların yükünün fəzada təxminən bərabər paylandığını qəbul etmək olar. Adətən kvant mexanikasında belə hallarda kvaziklassik yaxınlaşma tətbiq olunur və bu yaxınlaşmada elektronun impulsuna koordinatların funksiyası kimi baxmaq olur.

Əvvəlcə məsələyə elektrostatika baxımından yanaşaq. Elektronların fəzada paylanmasını, klassik elektrodinamikada olduğu kimi, onların yükünün $\rho(r)$ sıxlığı ilə paylandığını qəbul edək. Fəzada kəsilmədən paylanmış yükün yaratdığı sahənin $\varphi(r)$ potensialı koordinatların kəsilməz funksiyası olduğundan o,

$$\nabla^2 \varphi(r) = -4\pi\rho(r) \quad (92.1)$$

Puasson tənliyi ilə təyin olunur, burada $\rho(r) = en(r)$, $n(r)$ – vahid həcmdəki elektronların sayıdır.

Kvant statistikasını baxımından atomun hər hansı elementar həcmində olan elektronun \vec{p} impulsu ilə onun tam enerjisi E

$$E = \frac{p^2}{2m} - e\varphi(r) \quad (92.2)$$

bərabərliyi ilə əlaqədardır.

Yəqin ki, atomda hər bir elektronun tam enerjisi mənfi olmalıdır, əks halda o, atomdan kənara çıxar və sonsuzluğa gedə bilər. Fəzanın hər hansı bir nöqtəsində elektronun maksimum tam enerjisini $e\Phi_0$ ilə işarə edək. Φ_0 – müsbət sabit kəmiyyətdir. Φ_0 sabit kəmiyyət qəbul edilməsə, elektron Φ_0 -ın kiçik qiymətinə uyğun nöqtələrdən böyük qiymətə malik nöqtələrə keçər.

Beləliklə, nüvədən r məsafəsində olan elektronun impulsunun maksimum qiyməti

$$\frac{1}{2m} p_{\max}^2 = e(\Phi(r) - \Phi_0). \quad (92.3)$$

Kvant statistikasına görə faza fəzasının elementar həcmi $d\Omega = dx dy dz \times dp_x dp_y dp_z = dV p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi$ kimi təyin olunur. Buradan p_{\max} -a uyğun faza fəzasının ümumi həcmi $\frac{4\pi}{3} p_{\max}^3(r)V$ olar. Kvant qəfəsinin həcmi isə $(2\pi\hbar)^3$ -a bərabərdir. Pauli prinsipinə görə hər qəfəsdə yalnız iki elektron yerləşə bildiyindən $\frac{4\pi}{3} p_{\max}^3(r)V$ həcmində olan elektronların sayı

$$N(r) = 2 \frac{4\pi}{3} \frac{p_{\max}^3 V}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Buradan vahid fəza həcmindəki elektronların sayı üçün

$$n(r) = \frac{N(r)}{V} = 2 \frac{4\pi}{3} \frac{p_{\max}^3}{(2\pi\hbar)^3} \quad (92.4)$$

alınar. (92.3)-dən p_{\max} təyin edib, (92.4)-də yazsaq,

$$\rho(r) = en(r) = \frac{e}{3\pi^2\hbar^3} \{2me[\Phi(r) - \Phi_0]\}^{3/2} \quad (92.5)$$

olar.

(92.1) tənliyi müəyyən sərhəd şərtləri çərçivəsində həll olunmalıdır. (92.5)-dən görünür ki, $\Phi(r) = \Phi_0$ -da yükün $\rho(r)$ sıxlığı sıfıra bərabərdir. (92.3)-də isə $\Phi(r)$ -in $\Phi(r) < \Phi_0$ olan bütün qiymətlərində elektronun impulsunun qiymətinin kvadratı mənfidir. Beləliklə, $\Phi(r) = \Phi_0$ bərabərliyi atomun sərhədini, yəni onun radiusunu təyin etmiş olur. Atomun radiusunu R ilə işarə etsək,

$$\Phi_0 = \Phi(R).$$

Tam yükü sıfıra bərabər olan atomda yük sferik simmetrik paylanmış olarsa, atomdan kənarında sahə sıfıra bərabər olur, çünki nüvənin sahəsi elektronların sahəsi tərəfindən tam ekranlaşdırılır. Beləliklə, neytral atomun sərhədində $\Phi(R) = 0$ olduğundan

$$\Phi_0 = \Phi(R) = 0 \quad (92.6)$$

Atomun stasionar halında sahənin sferik-simmetrik paylanmış olduğunu qəbul etdikdə, yükü eZ olan nüvənin kifayət qədər yaxınlığında

$$\Phi(r) = \frac{Ze}{r}, \quad r \rightarrow 0 \quad (92.7)$$

nüvədən xeyli uzaqda isə

$$\Phi(r) = 0, \quad r \rightarrow \infty \quad (92.7')$$

olur.

Atomda elektronların N sayı nüvənin Z yükünə bərabər olmadıqda, $Z - N$ tərtibli ionun sərhədində heç bir sonsuzluğa təsadüf olunmamalıdır, yəni sahənin yalnız potensialı yox, onun intensivliyi də kəsilmədən dəyişməlidir.

Beləliklə, ion üçün sərhəd şərtləri

$$\Phi' - \Phi(R) = \frac{Ze}{r},$$

$$\Phi(R) = \frac{e(Z - N)}{R}; \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{r=R} = -\frac{e(Z - N)}{R^2} \quad (92.8)$$

olur.

(92.1) və (92.5) tənlikləri, prinsipcə, hər iki $\Phi(r)$ və $\rho(r)$ funksiyalarını təyin etməyə imkan verir. (92.5)-dən $\rho(r)$ -in ifadəsini (92.1)-də yazıb, sahənin sferik simmetrikliliyini nəzərə alsaq, $\Phi(r)$ üçün

$$\nabla^2 \Phi(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi}{dr} \right) = \frac{4e}{3\pi\hbar^3} \left\{ 2me \left[\Phi(r) - \Phi(R) \right] \right\}^{3/2} \quad (92.9)$$

tənliyi alınır.

(92.9) tənliyini həll etmək üçün ölçüsüz (adsız) kəmiyyətlərə keçək. Bunun üçün

$$\Phi(r) - \Phi(R) = \frac{Ze}{r} \varphi(r); \quad r = bxZ \frac{1}{3} \quad (92.10)$$

əvəzlərini qəbul edək, burada

$$b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3} a \approx 0,885a .$$

$a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ - Bor orbitinin radiusudur. Onda (92.1) tənliyi

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{x}} \varphi^{3/2}(x) \quad (92.11)$$

şəklini alır. (92.11) tənliyinə heç bir parametr daxil olmur və o, bilavasitə $\varphi(x)$ funksiyasını təyin edir.

İki halı təhlil edək. Əvvəlcə neytral atoma ($Z=N$) baxaq.

a) Neytral atom üçün (92.7) və (92.8) sərhəd şərtləri

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= 1, \quad r \rightarrow 0 \\ \varphi &= 0, \quad r \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (92.12)$$

şəklini alır. (92.11) tənliyinin

$$\varphi(x) = \frac{144}{x^3} \quad (92.13)$$

və ya

$$\Phi(r) - \Phi(R) = \frac{81\pi^2 \hbar^6}{8m^3 e^5} \cdot \frac{1}{r^4} \quad (92.13')$$

kimi bir dəqiq həlli vardır. Bu həll (92.12) sərhəd şərtlərindən ikincisini ödəyir, yəni $x \rightarrow \infty$ -da sıfır bərabər olur, birinci şərti isə ödəmir, $x \rightarrow 0$ -da həll dağılır və öz fiziki mahiyyətini itirir.

(92.11) tənliyini (92.12) şərtlərini ödəmək şərti ilə ədədi hesabladıqda alınan həll $x \rightarrow \infty$ -da asimptotik sıfır yaxınlaşır. Bu zaman (92.5) və (92.11) tənliklərində yükün sıxlığı $\rho(r)$ və sahənin potensialı $\Phi(r)$ sıfır bərabər olmur, yəni atomun sərhədləri sonsuzluğa qədər yayılır. Bu cür həll ilə atomun radiusu üçün sonlu qiymət tapmaq mümkün olmur.

$\varphi(x)$ funksiyası məlum olduqda atomda elektronların $n(r)$ sıxlığını tapmaq olar. Neytral atom üçün (92.6)-dan $\Phi(R) = 0$ olduğundan (92.10) əvəzi

$$\Phi(r) = \frac{Ze}{r} \varphi\left(\frac{r}{b} Z^{1/3}\right) \quad (92.14)$$

şəklini alar. $\Phi(r)$ -in bu qiymətini (92.5) -də yazdıqda

$$n(r) = \frac{Z^2}{3\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{2me^2}{b}\right)^{3/2} f\left(\frac{r}{b} Z^{1/3}\right) \quad (92.15)$$

olur. Burada

$$f(x) = \left[\frac{1}{x} \varphi(x)\right]^{3/2}.$$

(92.15)-dən görünür ki, elektron yükünün ağır atomlarda paylanma xarakteri hamısı üçün eynidir. x -in $x \geq 1$ qiymətlərində elektronların sıxlığı kəskin azalır. Ona görə də x -in $x = \frac{r}{b} Z^{1/3}$ qiymətini və yaxud

$r = R = xbZ^{-1/3}$ məsafəsini xarakterik məsafə hesab etmək olar, çünki Z -in bütün qiymətləri üçün R məsafəsində elektronların sıxlığı maksimum qiymət alır. Ədədi hesablamalar göstərir ki, atomun tam elektrik yükünün yarı radiusu $1,33Z^{-1/3}$ olan sferanın daxilində yerləşir.

Tomas–Fermi tənliyi kifayət qədər kiçik və kifayət qədər böyük məsa-

fələrdə təcrübəyə uyğun nəticələrə gətirmir. Nüvədən uzaq məsafələrdə ($r \rightarrow \infty$) $\Phi(r)$ üçün (92.11) tənliyindən alınan qiymət təcrübi qiymətdən xeyli böyükdür.

Elektron yükünün atomda paylanmasına gəldikdə isə (92.10)-dan $\Phi(r)$ - $\Phi(R)$ fərqi üçün ifadəsini (92.5)-də yerinə yazanda, $\rho(r)$ üçün

$$\rho(r) = Ar^{-3/2} \quad (92.16)$$

ifadəsi alınır. $r \rightarrow \infty$ -da $\rho(r) \rightarrow 0$ yaxınlaşır. Lakin daha dəqiq Xartri-Fok metodunun atoma tətbiqindən çıxır ki, $r \rightarrow \infty$ -da elektrik yükünün sıxlığı eksponensial sifra yaxınlaşır.

Hər iki metod vasitəsilə adətən

$$D(r) = 4\pi r^2 \rho(r) \quad (92.17)$$

radial elektron sıxlığı hesablanır. Şəkil 44-də arqon atomu üçün radial sıxlığın $\frac{r}{a}$ -dan asılılığı verilmişdir. Bütöv əyri Tomas-Fermi, qırıq əyri isə

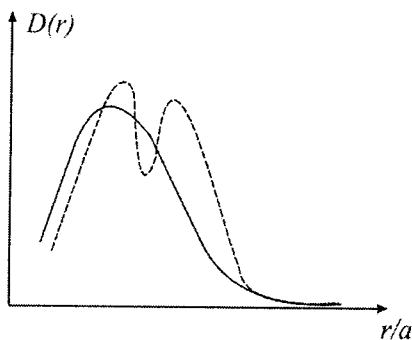
Xartri-Fok metodu ilə hesablanmışdır. Əyriyərdən görünür ki, Tomas-Fermi metodu atomun daxilində elektron sıxlığının dəyişməsinə təfsilatı ilə izah edə bilmir, lakin onun ümumi dəyişmə xarakterini düzgün verir. Atomun elektron sıxlığı üçün nüvədən uzaqda, yəni atomun xarici təbəqələrində təcrübəyə nisbətən xeyli böyük qiymət alınır.

Beləliklə, Tomas-Fermi statistik metodu ayrı-ayrı atomların fərdi xüsusiyyətlərini nəzərə ala bilmir, elektron örtüklərinin quruluşunu, nisbətən zəif rəbitədə olan valent elektronların yük sıxlığının dəyişmə xarakterini dəqiq verə bilmir.

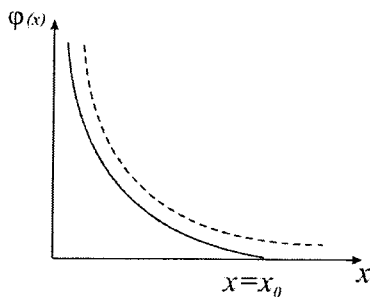
b) Tomas-Fermi metodunun müsbət iona tətbiqi təcrübə ilə daha yaxşı uyğunlaşan nəticələrə gətirir. Nüvənin elektrik yükü böyük olduqda, elektron örtükləri nüvəyə daha sıx yerləşir. Elektron sıxlığı nüvədən olan məsafənin artması ilə kəskin azalır və elektron örtüyü sonlu $r=R$ radiusa malik olur. Bu halda (92.11) tənliyi, (92.8) və ya

$$\varphi(0) = 1, \varphi(x_0) = 0, \quad x_0 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_{x=x_0} = \frac{Z-N}{Z} \quad (92.18)$$

sərhəd şərtləri ödənilməklə həll edilir, burada $x_0 = \frac{RZ^{1/3}}{b}$ -dir. ($r = bxZ^{1/3}$ ifadəsindən).



Şəkil 44. Arqon atomunun radial sıxlığının r/a -dan asılılıq əyrisi.



Şəkil 45.

(92.11) tənliyi (92.12) və (92.18) sərhəd şərtləri daxilində inteqrallanmış və alınmış $\varphi(x)$ həllinin x -dən asılılığı şəkil 45-də göstərilmişdir. Burada qırıq xətt atoma, bütöv xətt isə iona aiddir. Ölçüsüz (adsız) potensial atomun nömrəsindən asılı olmadığından $\varphi(x)$ üçün alınmış paylanma universal xarakter daşıyır.

$x \rightarrow \infty$ -da atomun $\varphi(x)$ potensialı asimptotik olaraq sıfıra yaxınlaşdığından, nə potensialın özü, nə də elektron sıxlığı heç yerdə sıfır olmur, yəni atomun radiusu sonlu olmur. İon üçün isə $\varphi(x)$ potensialı $x=x_0$ nöqtəsində absis oxunu kəsir. Bu isə ionun $R=x_0 b Z^{-1/3}$ sonlu radiusa malik olduğuna dəlalət edir.

Tomas–Fermi metodu ilə atomun tam (rabitə) enerjisini hesablamaq olur. Atomun tam enerjisi dedikdə elektronların kinetik, onların nüvə və bir-biri ilə elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjilərinin cəmi başa düşülür. Buna atomun tam ionizasiya enerjisi, yəni neytral atomun bütün elektronlarını qoparmaq üçün lazım olan enerji də deyilir. Onun qiymətini tapmaq üçün atomun daxilində $\rho(r)=en(r)$ sıxlığı ilə paylanmış yüklərin $E^{e.s.}$ elektrostatik təsir enerjisini hesablamaq kifayətdir.

Kulon qanunu ilə təsirdə olan zərrəciklər sistemi üçün virial teoremindən çıxır ki, bu sistemin orta kinetik enerjisi K onların $E^{e.s.}$ elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinin mənfi işarə ilə götürülmüş yarısına bərabərdir (bax: §18)

$$K = -\frac{1}{2} E^{e.c.}.$$

Atomun, beləliklə, hesablanmış tam enerjisi

$$E = K + E^{e.c.} = -\frac{1}{2}E^{e.c.} + E^{e.c.} = \frac{1}{2}E^{e.c.}$$

yaxud

$$E = -0,758 \frac{e^2}{a} Z^{7/3} \quad (92.19)$$

olur*.

Tomas–Fermi (92.11) tənliyinin ədədi inteqrallanması nəticəsində neytral atomun tam enerjisi üçün alınan qiymət (92.19) -a yaxındır:

$$E = -0,769 \frac{e^2}{a} Z^{7/3} = -20,94 Z^{7/3} eB. \quad (92.20)$$

E -nin Z -dən burada alınmış asılılıq xarakteri təcrübədə tam təsdiq olunur. Lakin təcrübədə 20.94 əvəzinə 16 əmsalı alınır. Beləliklə, Tomas–Fermi metodunda E üçün nəzəri alınmış qiymət yüngül atomlar üçün təcrübi qiymətdən xeyli böyük olur, ağır atomlara getdikcə onlar arasındakı fərq azalır.

v) Tomas–Fermi metodu vasitəsilə atomun elektron örtüklərinin dolma ardıcılığını, yəni s , p , d , f ,... hallarının Z -in hansı ən kiçik qiymətindən başlayaraq dolmağa başladığını da izah etmək olar.

Bildiyimiz kimi məhdud fəzada hərəkət edən kvant-mexaniki sistemin enerji və impulsu diskret spektrə malikdir. Fəzanı ölçüsü L olan kub qəbul etdikdə L ilə sistemin impulsu arasındakı rabitə

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L} n_1, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L} n_2, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L} n_3, \quad (92.20')$$

kimi təyin edilir. p -nin iki ardıcıl qiyməti arasındakı fərq

$$\Delta p_i = \frac{2\pi\hbar}{L} \Delta n_i, \quad i=1, 2, 3$$

olar, burada $\Delta n_1 = \Delta n_2 = \Delta n_3 = 1$ olduğundan,

*Вах: А.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский, «Квантовая механика», «Наука» Москва, 1979, с.422; «Задачи по квантовой механике», «Мир», Москва, 1974, с.144.

$$\Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = 1 = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$$

vahid intervala sistemin yeganə bir halı uyğun olur.

Kvant-mexaniki sistem atomun daxilində hərəkət edən elektron olduqda, baxılan halda yalnız iki elektron ola bilər. Ona görə də vahid həcmdəki elektronların sayı $\rho(r) = en(r)$ elektronun malik ola biləcək maksimal impuls ilə

$$\begin{aligned} p(r) &= \frac{e}{L^3} \sum \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_{\max}} dp_x dp_y dp_z = \\ &= \frac{2 \cdot 4\pi e}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_{\max}} p^2 dp = \frac{ep_{\max}^2}{3\pi^2 \hbar^3} \end{aligned} \quad (92.21)$$

kimi təyin olunur.

Sistemin hərəkət miqdarı momentinin

$$\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$$

ifadəsindən

$$p_n^2 = \frac{L^2}{r^2}$$

alınır. p_n – impulsun \vec{r} radius-vektora perpendikulyar istiqamətdəki proyeksiyasıdır. Yəqin ki, atomda elektronun maksimum impulsu p_n -dən kiçik ola bilməz:

$$p_{\max}^2 \geq p_n^2 = \frac{L^2}{r^2}. \quad (92.21')$$

L^2 -i üçün kvaziklassik yaxınlaşmada alınan (belə ki, Tomas–Fermi metodu bu yaxınlaşmada doğrudur)

$$L^2 = \hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} (2l+1)^2$$

ifadəsini (bax: §32), p_{\max} -un (92.21)- dəki qiymətini və $\rho(r)$ üçün Tomas–Fermi tənliyinin təxmini həllindən alınan

$$\rho(r) = \frac{Z\lambda^{3/2}}{16\pi r^{3/2}} e^{-\sqrt{\lambda}r}; \quad \lambda = \frac{100}{9} \left(\frac{3\pi}{2} \right)^{-2/3} \frac{Z - \frac{N}{8}}{N^{2/3}a}$$

götürüb, (92.21') ifadəsindən istifadə etsək,

$$Z = \frac{2e^3}{81\pi} (2l+1)^3 = \gamma(2l+1)^3 \quad (92.22)$$

olar, burada $e=2,718$ – natural loqarifmanın əsası, $\gamma=0,158$ -dir. (92.11) Tomas–Fermi tənliyini ədədi hesabladıqda γ üçün yuxarıdakına yaxın qiymət alınır:

$$Z_{T.F.} = 0,155(2l+1)^3 \quad (92.23)$$

olur. Bu düstur atomun l -in verilmiş qiymətinə uyğun səviyyədə elektronun ilk dəfə meydana çıxmasını göstərən Z -in qiymətini təyin edir. (92.23)-dən $s(l=0)$ səviyyəsi üçün $Z \approx 1$, $p(l=1)$ səviyyəsi üçün $Z \approx 5$, $d(l=2)$ səviyyəsi üçün $Z \approx 23$, $f(l=3)$ səviyyəsi üçün $Z \approx 54$ və i. a. alınır.

Lakin 0, 155 əmsali əvəzinə 0,17 götürülsə,

$$Z = 0,17 (2l+1)^3 \quad (92.24)$$

düsturu təcrübəyə tam uyğun qiymətlərə gətirir. $l=0,1,2,3$ qiymətlərində (92.24)-dən, uyğun olaraq, dəqiq 1, 5, 21, 58 olur. $l=4$ -də isə Z üçün 124 qiyməti alınır, yəni g səviyyəsinin dolması $Z=124$ -dən başlanmalı idi.

XI FƏSİL

MOLEKULLARIN KVANT NƏZƏRƏYYƏSİ

§93. Adiabatik yaxınlaşma metodu

Molekulların və bərk cisimlərin xassələri kvant nəzəriyyəsi baxımından öyrəniləndə elektronlardan və nüvələrdən ibarət sistemləri tədqiq etmək lazım gəlir. Bildiyimiz kimi, molekul bir neçə nüvədən və onların elektrik sahəsində hərəkət edən elektronlardan təşkil olunmuşdur. Belə sistemin

stasionar hallarının təyini kvant mexanikasında mürəkkəb bir məsələdir. Lakin elektronların kütləsi nüvələrin kütləsindən minlərlə dəfə kiçik olduğundan və onlara eyni tərtibli qüvvələr təsir etdiyindən məsələnin həllini bir qədər sadələşdirmək mümkün olur.

Eyni tərtibli qüvvələrin təsiri altında nüvələr elektronlara nəzərən çox kiçik sürətlə hərəkət edir. Müəyyən yaxınlaşmada onların hərəkətinin bir-birindən asılı olmayaraq baş verdiyini qəbul etmək olar. Doğrudan da, birinci yaxınlaşmada elektronlara nəzərən nüvələri sükunətdə qəbul edib, sistemin dinamik halı olaraq sükunətdəki qüvvə mərkəzləri sahəsində hərəkət edən elektronların halı dinamik hal hesab edilə bilər. Nüvələr çox kiçik sürətlə hərəkət etdiyindən elektronların dinamik halı nüvələrin yaratdığı orta potensial sahədə olduqca yavaş (adiabatik) dəyişər. Ona görə də nüvələrin elektronlara təsirini müəyyən bir orta potensial funksiya ilə əvəz etmək olar. Məsələyə belə baxış yalnız nüvələrin koordinatlarından asılı olan, yəni onların stasionar hallarını təyin edən Şredinger tənliyinə gətirir. Dəyişənlərin belə ayrılması metodunun əsasını təşkil edən yaxınlaşma *adiabatik yaxınlaşma* adlanır.

Şredinger tənliyində nüvələrin qarşılıqlı təsirinin potensialı yalnız onların arasındakı məsafədən asılı olur. Molekul mövcuddursa, bu potensial onların arasındakı məsafənin hər hansı müəyyən bir qiymətində minimal qiymətə malik olmalıdır. Bu minimum, molekulun dayanıqlı halına uyğun olur. Nüvələr bu minimuma uyğun nöqtə ətrafında kiçik amplituda malik rəqsi hərəkət edir. Bundan başqa molekul bütövlükdə irəliləmə və fırlanma hərəkətlərində iştirak edə bilər. Molekulun irəliləmə hərəkəti onun ətalət mərkəzinin sərbəst hərəkəti ilə əvəz edilsə (bax: §40), molekulun yalnız rəqsi və fırlanma hərəkətləri ilə maraqlanmaq olar.

Adiabatik yaxınlaşmanın mahiyyətini başa düşmək üçün ümumi kütləsi m olan elektronlardan və ümumi kütləsi M olan nüvələrdən ibarət sistemə baxaq. Elektronların $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots$ koordinatlar çoxluğunu \vec{r} , nüvələrin $R_1, R_2, \dots, R_p, \dots$ koordinatlar çoxluğunu \vec{R} ilə işarə edək. Onda belə sistemin \tilde{H} Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = \tilde{T}_e + \tilde{T}_n + \tilde{V}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (93.1)$$

və onun stasionar hallarını təyin edən Şredinger tənliyi

$$\tilde{H}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (93.2)$$

olar. (93.1)-də

$$\tilde{T}_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2(\vec{r}) \quad (93.3)$$

elektronların,

$$T_n = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2(\vec{R}) \quad (93.4)$$

nüvələrin kinetik enerji operatorları,

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{r_{i,j}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|R_i - R_j|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} \quad (93.5)$$

molekulda olan bütün zərrəciklərin qarşılıqlı təsir operatorudur. (93.5) - də birinci hədd elektronlar, ikinci hədd nüvələr, üçüncü hədd isə nüvələr ilə elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsir enerjisini göstərir.

Birinci yaxınlaşmada $M \rightarrow \infty$ götürüb, nüvələrin kinetik enerji operatorunu kiçik həyəcanlanma kimi qəbul etsək, həyəcanlanmamış sistemin Hamilton operatoru

$$\tilde{H}_e = \tilde{T}_e + V(\vec{r}, \vec{R})$$

olar. Onda həyəcanlanmamış sistemin stasionar hallarının enerjiləri və dalğa funksiyaları

$$\tilde{H}_e \Psi^o(\vec{r}, \vec{R}) = E^o(R) \Psi^o(\vec{r}, \vec{R}) \quad (93.6)$$

tənliyinin həllindən tapılar. (93.6) tənliyi nüvələrin verilmiş vəziyyətində və ya çox yavaş hərəkəti zamanı (adiabatik yaxınlaşma) elektronların hərəkət halını xarakterizə edir. Stasionar halların $E_n^o(R)$ enerjilərinə və $\Psi_n^o(\vec{r}, \vec{R})$ dalğa funksiyalarına nüvələrin \vec{R} koordinatları parametr kimi daxil olur (n indeksi stasionar halı təyin edən kvant ədədlər çoxluğu).

(93.6) tənliyinin həllərinin məlum olduğunu fərz etsək, (93.2) ümumi tənliyinin həllini \tilde{H}_e operatorunun $\{\Psi_n^o(\vec{r}, \vec{R})\}$ məxsusi funksiyalarının superpozisiyası şəklində axtarmaq olar. Bu zaman superpozisiya əmsalları, yəqin ki, nüvələrin koordinatlarının funksiyası kimi seçilməlidir:

$$\Psi^o(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_m \Phi_m(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R}). \quad (93.7)$$

Bunu (93.2)-də yazdıqda

$$(\check{H}_e + \check{T}_n) \sum_m \Phi_m(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R}) = E \sum_m \Phi_m \Psi_m^o. \quad (93.8)$$

Mötərizələri açıb, (93.6) tənliyini nəzərə alsaq,

$$\sum_m \Phi_m E_m \Psi_m^o + \check{T}_n \sum_m \Phi_m(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R}) = E \sum_m \Phi_m \Psi_m^o. \quad (93.8')$$

Axırıncı bərabərliyi soldan $\Psi_n^{*o}(\vec{r}, \vec{R})$ -ə vurub, elektronların koordinatları üzrə inteqral alaq. Onda $\Psi_n^o(\vec{r}, \vec{R})$ funksiyaları üçün ortoqonallıq şərtindən (93.8') tənliyi

$$(E_n^o - E) \Phi_n(\vec{R}) + \sum_m \int \Psi_n^{*o} \check{T}_n \Phi_m(\vec{R}) \Psi_m^o(d\vec{r}) = 0 \quad (93.9)$$

şəklinə düşər.

\check{T}_n operatorunun (93.4) ilə verilmiş ifadəsini (93.9) - da yazandan sonra $\nabla^2(R)$ operatorunun

$$\nabla^2(\varphi) = 2\vec{\nabla}f\vec{\nabla}\varphi + \varphi\nabla^2 f + f\nabla^2\varphi$$

kimi təyin olunan təsiri nəzərə alınsa,

$$\begin{aligned} & \int \Psi_n^{*o} \check{T}_n \Phi_m(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R})(d\vec{r}) = \\ & = -\hbar^2 \sum_i \frac{1}{M_i} \int \Psi_n^{*o} \vec{\nabla}_i(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R}) \vec{\nabla}_i(\vec{R}) \Phi_m(\vec{R}) + \\ & + \int \Psi_n^{*o} \check{T}_n \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R})(d\vec{r}) \Phi_m(\vec{R}) + \delta_{nm} \check{T}_n \Phi_m(\vec{R}) \end{aligned}$$

olar. Bunu (93.9)- da yazıb, \vec{R} koordinatlarına təsir edən

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{nm} = \hbar^2 \sum_i \frac{1}{M_i} \int \Psi_n^{o*} \tilde{\nabla}_i(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R})(d\vec{r}) \tilde{\nabla}_i(\vec{R}) - \\ - \int \Psi_n^{o*}(\vec{r}, \vec{R}) \tilde{T}_n \Psi_m^o(\vec{r}, \vec{R})(d\vec{r}) \end{aligned} \quad (93.10)$$

operatoru daxil edilərsə, (93.9) tənliyi

$$(\tilde{T}_n + E_n^o - E) \Phi_n(\vec{R}) = \sum_m \tilde{A}_{nm} \Phi_m(\vec{R}) \quad (93.11)$$

şəklə düşər.

(93.11)-də m -ə $m=1, 2, 3, \dots$ qiymətlərini verdikdə sistem E tam enerjinin məxsusi qiymətlər spektrini və $\Phi_m(\vec{R})$ məxsusi funksiyalar çoxluğunu təyin edən bircins tənliklər sistemi alınır. Belə sistemi dəqiq həll etmək mümkün deyildir. Lakin (93.10) operatoruna kiçik həyəcanlanma operatoru kimi baxmaq mümkün olarsa, (93.11) tənliklər sistemini ardıcıl yaxınlaşma metodu ilə həll etmək olar. Sıfırıncı (adiabatik) yaxınlaşmada (93.11) tənliyinin sağ tərəfini sıfıra bərabər götürdükdə (93.11) sistemi

$$(\tilde{T}_n + E_n^o(R)) \Phi_n(\vec{R}) = E \Phi_n(\vec{R}) \quad (93.12)$$

tənliklər sisteminə çevrilir. (93.12) tənliyindən görünür ki, nüvələrin verilmiş vəziyyətində ($R = \text{const}$) elektronların hərəkət halını təyin edən $E_n^o(R)$ enerjisi nüvələrin hərəkət tənliyində potensial enerji rolunu oynayır, $\Phi_n(\vec{R})$ -funksiyası isə elektronların verilmiş hərəkət halında nüvələrin hərəkətini xarakterizə edir.

Elektronların n -kvant ədədlər çoxluğu ilə təyin olunan müəyyən halında nüvələr müxtəlif hallarda ola bildiyindən, həmin halları təyin edən kvant ədədlər çoxluğunu α ilə işarə edək. Onda (93.12) tənliyi

$$(\tilde{T}_n + E_n^o(R)) \Phi_{n\alpha}(\vec{R}) = E_{n\alpha} \Phi_{n\alpha}(\vec{R}) \quad (93.12')$$

kimi yazılar.

Beləliklə, adiabatik yaxınlaşmada nüvələrdən və elektronlardan təşkil olunmuş kvant sisteminin müəyyən halının (93.7) dalğa funksiyası

$$\Psi_{n\alpha}(\vec{r}, \vec{R}) = \Phi_{n\alpha}(\vec{R}) \Psi_n^o(\vec{r}, R) \quad (93.13)$$

kimi iki funksiyanın sadə hasilinə bərabər olur, yəni elektronların n kvant

ədədlər çoxluğu ilə təyin olunan hər bir $\Psi_n^o(\vec{r}, \vec{R})$ halına, nüvələrin α kvant ədədləri ilə fərqlənən $\Phi_{n\alpha}(\vec{R})$ halları uyğun gəlir. Burada (93.6) tənliyinin həllindən tapılan $E_n^o(R)$ –molekulun elektronlarının tam enerjisi olduğu halda, (93.12') tənliyinin həllindən tapılan $E_{n\alpha}$ -nın ifadəsinə isə yalnız elektronların enerjisi yox, nüvələrin hərəkət enerjisi (molekulun rəqs və fırlanma enerjiləri) də daxil olur (§97- yə bax).

Adiabatik yaxınlaşma o vaxt nisbətən yaxşı nəticələrə gətirir ki, (93.11) tənliyinin dəqiq həlli sıfırıncı yaxınlaşmada alınan (93.12') tənliyinin həllindən az fərqlənsin. Bu o zaman olar ki, \tilde{A}_{nm} operatorunun hər hansı iki $E_n^o(R)$ və $E_m^o(R)$ stasionar hala uyğun matrisa elementi onların enerjiləri fərqindən xeyli kiçik olsun, yəni

$$\left| \int \Phi_{n\alpha}^* \tilde{A}_{nm} \Phi_{m\alpha'}(d\vec{R}) \right| \ll \left| E_{n\alpha}^o - E_{m\alpha'}^o \right| \quad (93.14)$$

şerti ödənilsin, burada α və α' istənilən ola bilər.

§94. Hidrogen molekulunun kvant nəzəriyyəsi

Elementlərin kimyəvi xassələri və onların optik spektrləri atomların xarici s və p örtüklərindəki elektronların sayı ilə təyin olunur. Daxili elektronlar isə nüvə ilə daha güclü bağlandıqlarından atomların yuxarıdakı xassələrinə elə bir təsir göstərmir. Ona görə də kimyəvi reaksiyalarda ayrılan enerji daxili örtüklərdəki elektronların enerjisindən xeyli kiçik olur.

Müxtəlif elementlərin atomları adətən iki növ kimyəvi rabitə nəticəsində molekul yarada bilər. Bunlardan biri *ion rabitəsi* (bu *heteropolyar rabitə* adlanır), ikincisi isə *atom rabitəsidir* (bu *homeopolyar rabitə* adlanır).

İon rabitədə molekul mənfi və müsbət elektrik yükünə malik ionlardan ibarət olur və onlar arasında təsir edən adi Kulon cazibə qüvvəsi hesabına molekulun dayanıqlığı təmin olunur. Belə molekulur heteropolyar molekulur adlanır.

Molekula daxil olan ionlardan hansının müsbət və ya mənfi yükə malik olması bir tərəfdən reaksiyaya girən atomların ionizasiya potensialından, yəni xarici örtükdəki elektronu atomdan qoparmaq üçün lazım olan enerjiden, digər tərəfdən isə, atomun elektrona olan *yaxınlığından* (srodstvo), yəni neytral atomun xarici təbəqədə əlavə elektronu tutub saxlamaq qabiliyyətindən asılıdır.

Birinci qrup elementlərin (qələvi metallar) atomlarının ionizasiya potensialı ən kiçik (minimum) qiymətə malikdir. Qrupdan qrupa keçdikcə onun qiyməti elementin Z sıra nömrəsindən asılı olaraq artır və VIII qrup ele-

mentlərində (təsirsiz qazlarda) maksimum qiymət alır. Ona görə də təsirsiz qazların atomları üçün elektronunu başqa atoma vermək prosesi əlverişli olmur və xarici s və p örtükləri dolu olduğundan, Pauli prinsipinə görə xarici örtüyə əlavə elektron da qəbul edə bilmir, yəni onların elektrona yaxınlığı da sıfır bərabər olur. Buradan çıxır ki, təsirsiz qazlar, adi şəraitdə, kimyəvi reaksiyalarda iştirak edə bilmir. Lakin bu və ya başqa bir yolla onların atomlarını həyəcanlandırmaq mümkün olarsa, yəqin ki, kimyəvi birləşmələr yaratmaqda iştirak edə bilər.

I və II qrup elementləri olan qələvi və qələvi torpaq metalların atomları üçün ionizasiya potensialı kiçik olduğundan öz xarici örtüyündəki bir və ya iki elektronunu asanlıqla başqa atoma verə bilər. Əksinə, VI və VII qruplardakı elementlərin atomlarının elektrona yaxınlığı çox olur və onların xarici p -örtüyünün dolması üçün çatışmayan bir və ya iki elektronu digər atomdan asanlıqla alır.

Misal üçün adi xörək duzunun molekulu I qrup elementi natrium (Na) və VII qrup elementi xlor (Cl) atomlarından ibarətdir. Bu molekulda natrium öz elektronunu xlorə verərək müsbət ion (Na^+), xlor isə onu alaraq mənfi ion (Cl^-) şəklində molekula daxil olur. Bu halda natrium atomunun ionizasiya potensialı kiçik, xlor atomunun isə elektrona yaxınlığı böyükdür.

Deməli, kimyəvi elementlərin atomları iki növ valentliyə malik olur. Kimyəvi reaksiyalar zamanı xarici örtüyündəki elektronları digər atomlara verən elementlərin valentliyi müsbət, onları qəbul edən atoma uyğun elementin valentliyi isə mənfi hesab olunur. Baxılan elementin bir, iki və i.a. valentli olması isə verilən və ya qəbul edilən (alınan) elektronların sayı ilə təyin olunur. Müsbət valentlik I və II qrup elementlərində, mənfi valentlik isə VI və VII qrup elementlərində daha qabarıq şəkildə özünü büruzə verir. Hər bir element şəraitdən asılı olaraq prinsipcə hər iki növ valentliyə malik ola bilər.

Homeopolyar (atom) rabitəyə gəldikdə, xüsusi qeyd etmək lazımdır ki, bu növ rabitə iki neytral atom arasında yaranır. Bu rabitə *spin rabitəsi* də adlanır.

Heteropolyar rabitənin klassik nəzəriyyəsini qurmaq mümkün olduğu halda, homeopolyar rabitə klassik fizika baxımından anlaşılmır. Bu rabitənin təbiəti onun yalnız kvant nəzəriyyəsi yaradıldıqdan sonra məlum olmuşdur. Burada ion rabitənin şərhini üzərində dayanmayacağıq, maraqlanan oxucular onu uyğun ədəbiyyatda tapa bilərlər*. Bizim əsas məqsədimiz ən sadə molekulların hidrogen molekulu təmsalində oxucuları homeopolyar rabitənin kvant nəzəriyyəsi ilə tanış etməkdir.

Bundan əvvəlki paragrafda göstərdik ki, adiabatik yaxınlaşmada, nüvələrin verilmiş vəziyyətində elektronların hərəkət halı (93.6) tənliyi ilə təs-

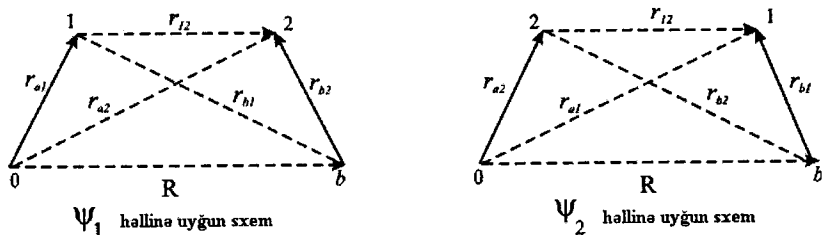
*Məsələn, ion rabitənin sxematik izahı ilə A.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский, «Квантовая механика», «Наука», 1979, с. 436 kitabında tanış olmaq olar.

vir olunur. Bu tənliyin köməyilə az-çox yaxşı nəticələr almaq mümkün olan molekul hidrogen molekuludur. Məlumdur ki, hidrogen molekulunu iki neytral atomdan təşkil olunmuşdur və homeopolyar kimyəvi rabitəyə ən yaxşı misaldır.

Nüvələri bir-birindən xeyli uzaqda olan hala uyğun enerjini hesablama başlanğıcı qəbul etsək, molekulun dayanıqlı halının enerjisi mənfi olmalıdır. Molekulun baxılan halındakı enerjisi, əslində, onu təşkil edən atomların kimyəvi rabitəsinin ölçüsüdür. Ona görə də molekulun enerjisini hesablamaq onun atomları arasındakı kimyəvi rabitənin ədədi nəzəriyyəsinə qurmaq deməkdir. Kvant mexanikası yaranana qədər nəinki homeopolyar rabitə, ümumiyyətlə kimyəvi rabitənin təbiəti haqqında elə bir əsaslı fikir mövcud deyildi. Kimyəvi rabitənin təbiətinin müəyyən edilməsi kvant mexanikasının ən əsas nəticələrindən biridir.

İndi də nüvələrin vəziyyəti sabit qaldığı (dəyişmədiyi) halda, molekulda elektronların enerjisini təyin edən (93.6) tənliyinin tədqiqinə keçək. Bu tənlik hidrogen molekulunu üçün ilk dəfə, həyəcanlanma metodunun köməyi ilə Haytler–London tərəfindən həll olunmuşdur.

Hidrogen molekulunu bir-birindən R məsafəsində yerləşmiş a və b nüvələrindən, 1 və 2 elektronlardan ibarətdir (şəkil 46).



Şəkil. 46. Hidrogen molekulunda qarşılıqlı təsir sxemi:
 a və b -nüvələr; 1 və 2- elektronlardır.

Belə sistemin \tilde{H} Hamilton operatoru

$$\tilde{H} = H_a(1) + H_b(2) + V(1,2) + \frac{e^2}{R} + W(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, s_{1z}, s_{2z}) \quad (94.1)$$

olar. Burada 1 və 2 ilə elektronların x_1, y_1, z_1 və x_2, y_2, z_2 fəza koordinatları işarə olunmuşdur,

$$H_a(1) = \frac{\tilde{p}_1^2}{2m} + U(\vec{r}_1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{a1}} \quad (94.2)$$

birinci,

$$H_b(2) = \frac{\tilde{p}_2^2}{2m} + U(\vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{b2}} \quad (94.3)$$

ikinci elektronun Hamilton operatoru,

$$V(1,2) = -\frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (94.4)$$

elektronların nüvələrlə və bir-birilə qarşılıqlı təsir enerjisi; $\frac{e^2}{R}$ – nüvələr

arasındakı qarşılıqlı təsir enerjisi və $W(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, s_{1z}, s_{2z})$ – spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsir operatorudur.

(93.6) tənliyinin (94.1) operatoru əsasında dəqiq həllini tapmaq mümkün deyildir. O, adətən spin-orbital və spin-spin qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda təxmini həll edilə bilər.

Nüvələr arasındakı məsafə R sabit qaldığı qəbul edildiyinə görə (94.1)-də $\frac{e^2}{R}$ həddi additiv sabit kimi elektronların hərəkət halını təyin edən enerjiyə əlavə edilir. Bu baxımdan (93.6)-ya daxil olan E^o enerjisi yalnız elektronların hərəkət enerjisi olar, yəni sükunətdəki molekulun tam enerjisi

$$E = E^o + \frac{e^2}{R}. \quad (94.5)$$

Hamilton operatoru isə

$$\tilde{H} = \tilde{H}_a(1) + \tilde{H}_b(2) + V(1,2) = \tilde{H}_o + V(1,2) \quad (94.6)$$

uyğun Şredinger tənliyi

$$\tilde{H} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, R) = E(R) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) \quad (94.7)$$

olar.

Bu metodda nüvələri bir-birindən xeyli uzaqda ($R \rightarrow \infty$) yerləşdiyi hala uyğun molekulun $\Psi^o(1,2)$ funksiyası sıfırıncı yaxınlaşma qəbul olunur. Bu

zaman $V(1,2) \rightarrow 0$ yaxınlaşdığından sıfırncı yaxınlaşmada Hamilton operatoru

$$\check{H}_o = \check{H}_a(1) + \check{H}_b(2), \quad (94.8)$$

uyğun Şredinger tənliyi

$$H_o \Psi^o(1,2) = (\check{H}_a(1) + \check{H}_b(2)) \Psi^o(1,2) = E_o \Psi^o \quad (94.9)$$

olur. Baxılan yaxınlaşmada molekulda elektronlar bir-birindən asılı olmayaraq hərəkət etdiyindən, (94.9)-un həllini birinci elektronun «a» nüvəsi, ikinci elektronun isə «b» nüvəsi ətrafında hərəkət halını xarakterizə edən $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ və $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$ funksiyalarının hasili şəklində axtarmaq olar:

$$\Psi_I(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_a(\vec{r}_{a1}) \Psi_b(\vec{r}_{b2}). \quad (94.10)$$

$\check{H}_a(1)$ operatoru yalnız $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$, $H_b(2)$ operatoru yalnız $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$ funksiyasına təsir etdiyindən, (94.9) tənliyi

$$\begin{aligned} \check{H}_a(1) \Psi_a(\vec{r}_{a1}) &= E_{a1} \Psi_a(\vec{r}_{a1}), \\ \check{H}_b(2) \Psi_b(\vec{r}_{b2}) &= E_{b2} \Psi_b(\vec{r}_{b2}) \end{aligned} \quad (94.11)$$

sisteminə çevrilir. $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ və $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$ funksiyaları (94.11) sistemindəki tənliklərin həllidirsə, (94.10) funksiyası $E_o = E_{a1} + E_{b2}$ bərabərliyi ödənilədiyi halda (94.9) tənliyinin həlli olur.

Fermionlar üçün seçilməzlik prinsipindən (bax: §81) çıxır ki, birinci elektron «b» nüvəsi, ikinci elektron isə «a» nüvəsi ətrafında da hərəkət edə bilər. Onda H_o və $V(2,1)$ operatorları

$$\begin{aligned} \check{H}_o(2,1) &= \check{H}_a(\vec{r}_{a2}) + H_b(\vec{r}_{b1}) \\ V(2,1) &= -\frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \end{aligned} \quad (94.12)$$

və $H_o(2,1)$ -ə uyğun tənlik

$$\check{H}_o(2,1) \Psi^o(2,1) = E^o \Psi^o(2,1) \quad (94.13)$$

şəklinə düşər. (94.9)-a uyğun olaraq (94.13)-ün həlli

$$\Psi_{II}^o(2,1) = \Psi_a(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b1}) \quad (94.14)$$

hasilı şəklində axtarılır. Bu zaman $\Psi_a(\vec{r}_{a2})$ və $\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ funksiyaları

$$\check{H}_a(2)\Psi_a(\vec{r}_{a2}) = E_{a2}\Psi_a(\vec{r}_{a2}) \quad (94.15)$$

$$\check{H}_b(1)\Psi_b(\vec{r}_{b1}) = E_{b1}\Psi_b(\vec{r}_{b1})$$

sistemini ödəyir və $\Psi_{II}^o(2,1)$ funksiyası $E_o' = E_{a2} + E_{b1}$ şərti daxilində (94.13)-ün həlli olur.

Sıfırıncı yaxınlaşmada molekulun atomları arasındakı qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadığından, molekul o zaman ən kiçik enerjili əsas halda ola bilər ki, ona daxil olan atomların hər biri əsas halda olsun. Başqa sözlə $E_{a1} = E_{b2} = E_{a2} = E_{b1} = E_n^o$ bərabərlikləri ödənilsin və molekulun əsas halının enerjisi

$$E_o = E_{a1} + E_{b2} = E_{a2} + E_{b1} = 2E_n^o = -\frac{2R\hbar}{n^2} = -\frac{e^2}{n^2 a}. \quad (94.16)$$

Beləliklə, \check{H}^o operatorunun $2E_n^o$ məxsusi qiymətinə $\Psi_I^o(1,2)$ və $\Psi_{II}^o(2,1)$ kimi iki məxsusi funksiya uyğun olur, yəni molekulun əsas halı ikiqat cırlaşmış olur. Bu cırlaşma elektronların seçilməzlik prinsipi (onların mübadiləsi) nəticəsi olduğundan belə cırlaşma *mübadilə cırlaşması* adlanır.

Baxılan məsələnin xüsusiyyəti ondan ibarətdir ki, cırlaşmış halı təsvir edən $\Psi_I^o(1,2)$ və $\Psi_{II}^o(2,1)$ funksiyaları müxtəlif operatorların məxsusi funksiyalarıdır. $\Psi_I^o(1,2)$ funksiyası (94.13) tənliyini, $\Psi_{II}^o(2,1)$ funksiyası isə (94.9) tənliyini ödəmir. Buna görə də Ψ_I^o və Ψ_{II}^o funksiyalarının bir-birinə ortoqonal olduğunu iddia etmək olmaz.

$\Psi_I^o(1,2)$ və $\Psi_{II}^o(2,1)$ hallarından hər hansı birində sistemi təsvir edən funksiya, kvant mexanikasının ümumi prinsipinə görə bu iki funksiyanın superpozisiyası şəklində verilir:

$$\Psi^o(1,2) = C_1\Psi_I^o(1,2) + C_2\Psi_{II}^o(2,1). \quad (94.17)$$

Spinləri 1/2 olan zərrəciklər sisteminin ümumi dalğa funksiyası (koordinat və spin funksiyalarının hasili) zərrəciklərin yerdəyişmə (mübadilə) əməliyyatına görə antisimmetrik funksiya (bax: §81) olmalıdır. Koordinat funksiyası simmetrik olduqda spin funksiyası antisimmetrik, koordinat funksiyası antisimmetrik olduqda isə spin funksiyası simmetrik olur. İki fermionlu sistemdə (bax: §83) sistemin tam spini sıfır ($S=0$) bərabədirsə, koordinat funksiyası simmetrik, vahidə ($S=1$) bərabədirsə, antisimmetrik olur. (94.17) funksiyalar çoxluğundan hidrogen molekulunun əsas həli

$$\Psi^S(1,2) = C_1 \{ \Psi_a(\vec{r}_{a1}) \Psi_b(\vec{r}_{b2}) + \Psi_a(\vec{r}_{a2}) \Psi_b(\vec{r}_{b1}) \} \quad (94.18)$$

yaxud

$$\Psi^A(1,2) = C_2 \{ \Psi_a(\vec{r}_{a1}) \Psi_b(\vec{r}_{b2}) - \Psi_a(\vec{r}_{a2}) \Psi_b(\vec{r}_{b1}) \} \quad (94.19)$$

funksiyası ilə təsvir olunmalıdır.

Bura daxil olan C_1 və C_2 sabitləri Ψ^S və Ψ^A funksiyalarının

$$\int \Psi^{+S} \Psi^S dV_1 dV_2 = 1, \int \Psi^{+A} \Psi^A dV_1 dV_2 = 1 \quad (94.20)$$

normalanma şərtlərindən tapılır. Məsələn, Ψ^S üçün olan şərti götürək:

$$\begin{aligned} 1 = \int \Psi^{+S} \Psi^S dV_1 dV_2 &= C_1^2 \left\{ \int \Psi_a^+(\vec{r}_{a1}) \Psi_a(\vec{r}_{a1}) dV_1 \int \Psi_b^+(\vec{r}_{b2}) \Psi_b(\vec{r}_{b2}) dV_2 + \right. \\ &+ \int \Psi_a^+(\vec{r}_{a2}) \Psi_a(\vec{r}_{a2}) dV_2 \int \Psi_b^+(\vec{r}_{b1}) \Psi_b(\vec{r}_{b1}) dV_1 + \\ &\left. + 2 \int \Psi_a^+(\vec{r}_{a1}) \Psi_b(\vec{r}_{b1}) dV_1 \int \Psi_b^+(\vec{r}_{b2}) \Psi_a(\vec{r}_{a2}) dV_2 \right\} \quad (94.21) \end{aligned}$$

Birinci və ikinci hədlərdəki inteqrallar ayrılıqda götürülmüş hidrogen atomunun dalğa funksiyaları üçün yazılmış normalanma şərti üzərinə düşdüyündən vahidə bərabər olur. Üçüncü həddə daxil olan inteqrallar isə inteqrallama dəyişənlərinin yerdəyişməsi ilə fərqlənir və onlar o vaxt sıfırdan fərqli olar ki, $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ və $\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ (və ya $\Psi_a(\vec{r}_{a2})$ və $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$) funksiyaları müştərək fəza oblastında eyni zamanda qiymət alsın, yəni həmin oblastda bir-birini örtsün (şəkil 47-də ştrixlənmiş oblast). Örtmə dərəcəsini xarakterizə edən kəmiyyət S ilə işarə olunur (tam spinlə qarışdırmamalı)

$$S = \int \Psi_a^+(r_{a1}) \Psi_b(r_{b1}) dV_1 = \int \Psi_a^+(\vec{r}_{a2}) \Psi_b(\vec{r}_{b2}) dV_2. \quad (94.21')$$

Beləliklə, (94.21) normalanma şərti

$$1 = 2C_1^2(1 + S^2)$$

şəklinə düşür, buradan

$$C_1 = [2(1 + S^2)]^{\frac{1}{2}}. \quad (94.22)$$

Eyni şəkildə Ψ^A -nin normalanma şərtindən

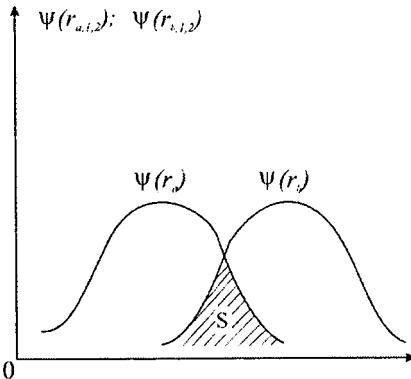
$$C_2 = [2(1 - S^2)]^{\frac{1}{2}} \quad (94.23)$$

alınır. Burada S -in ortaya çıxması (94.10) və (94.14) funksiyalarının bir-birilə ortoqonal olmadığını göstərir. Onlar ortoqonal olsaydı $S=0$ və

$C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ olardı. Başqa sözlə $R=0$ olanda $S=1$, $R \rightarrow \infty$ -da isə $S=0$

olur.

Beləliklə, sıfırıncı yaxınlaşmada hidrogen molekulunun əsas halının enerjisi üçün (94.16), dalğa funksiyası üçün isə (94.18) və (94.19) ifadələri alınır.



Şəkil 47. $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ ilə $\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ (və ya $\Psi_a(\vec{r}_{a2})$ ilə $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$), funksiyalarının birgə dəyişmə oblastının (ştrixlənmiş oblast) sxemi.

İndi də (94.7) tənliyinin həllinə keçək. Sıfırıncı yaxınlaşmanın (94.10) və (94.14) dalğa funksiyaları ortoqonal olmadığından cırlaşmış hallar üçün inkişaf etdirilmiş həyəcanlanma nəzəriyyəsinə bilavasitə bura tətbiq etmək mümkün deyildir. Ona görə də həyəcanlanma nəzəriyyəsinə bir qədər başqa şəkllə salaq.

Həyəcanlanmamış halın dalğa funksiyasına və onun enerjisinə həyəcanlanmanın verdiyi əlavələri uyğun olaraq φ və ε kimi işarə edək:

$$\Psi(1,2) = \Psi^0(1,2) + \varphi, \quad (94.24)$$

$$E = E_0 + \varepsilon.$$

Bu ifadələri (94.7)-də yerinə yazsaq,

$$\left[\tilde{H}_o + V(1,2) \right] \Psi^o + \varphi = (E_o + \varepsilon) (\Psi^o + \varphi) \quad (94.25)$$

alırıq. E_o -a görə V -ni və ε -nu, Ψ^o -a görə φ -ni birinci tərtib kiçik kəmiyyət hesab edib, (94.25)-də $V\varphi$ və $\varepsilon\varphi$ kimi ikinci tərtib kiçik kəmiyyətləri nəzərə almasaq, (94.9) tənliyinə əsasən (94.25) tənliyi

$$(H^o - E^o)\varphi(1,2) = (\varepsilon - V(1,2))\Psi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) \quad (94.26)$$

şəklə düşür.

Həyəcanlanmanın nəzərə alınması elektronların seçilməzlik prinsipi ilə əlaqədar cırılaşmanı aradan götürdüyünə görə (94.26)-dan enerjiyə olan ε əlavəni və Ψ^o -a daxil olan C_1 ilə C_2 əmsalları arasındakı əlaqəni tapmaq olar. Bunun üçün §46-da isbat edilmiş teoremdən istifadə edək. Bu teoremə görə sağ tərəfi olan qeyri-bircins tənliyin həllinin mövcud olması üçün uyğun bircins tənliyin həlli (94.26) tənliyinin sağ tərəfi ilə ortoqonal olmalıdır.

Birinci elektron «a» nüvəsi, ikinci elektron «b» nüvəsinin ətrafında hərəkət etdiyi hala uyğun Ψ_I^o həlli üçün

$$\int \Psi_I^o(1,2) [\varepsilon - V(1,2)] \Psi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) dV_1 dV_2 = 0; \quad (94.27)$$

birinci elektron «b» nüvəsi, ikinci elektron «a» nüvəsi ətrafında hərəkət edən hala uyğun $\Psi_{II}^o(2,1)$ həlli üçün

$$\int \Psi_{II}^o(2,1) [\varepsilon - V(2,1)] \Psi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) dV_1 dV_2 = 0 \quad (94.28)$$

bərabərlikləri ödənməlidir. Burada $V(1,2)$ potensial enerjisi (94.4), $V(2,1)$ isə (94.12) ifadələri ilə verilir.

(94.10), (94.14) və (94.17) ifadələrindən istifadə etsək, (94.27) və (94.28) bərabərlikləri

$$\begin{aligned} (\varepsilon - K)C_1 + (\varepsilon S^2 - A)C_2 &= 0 \\ (\varepsilon S^2 - A)C_1 + (\varepsilon - K)C_2 &= 0 \end{aligned} \quad (94.29)$$

sistemə gətirir. Burada

$$\int \Psi_I^{*o} \Psi_I^o dV_1 dV_2 = 1 = \int \Psi_{II}^{*o} \Psi_{II}^o dV_1 dV_2$$

normalanma şərtləri nəzərə alınmış və

$$K(R) = \int \Psi_I^{\sigma+} V(1,2) \Psi_I^{\sigma} dV_1 dV_2 = \int \Psi_{II}^{\sigma+} V(2,1) \Psi_{II}^{\sigma} dV_1 dV_2, \quad (94.30)$$

$$A(R) = \int \Psi_I^{\sigma+} V(1,2) \Psi_{II}^{\sigma} dV_1 dV_2 = \int \Psi_{II}^{\sigma+} V(2,1) \Psi_I^{\sigma} dV_1 dV_2 \quad (94.31)$$

$$S^2(R) = \int \Psi_I^{\sigma+} \Psi_{II}^{\sigma} dV_1 dV_2 \quad (94.32)$$

işarələri daxil edilmişdir.

Mübadilə effekti nəzərə alınmadıqda

$$K(R) = e^2 \int |\Psi_a(\vec{r}_{a1})|^2 |\Psi_b(r_{b2})|^2 \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} \right) dV_1 dV_2 = \int |\Psi_a(\vec{r}_{a1})|^2 \times \\ \times \frac{e^2}{r_{12}} |\Psi_b(r_{b2})|^2 dV_1 dV_2 - \int |\Psi_a(\vec{r}_{a1})|^2 \frac{e^2}{r_{b1}} dV_1 - \int |\Psi_b(r_{b2})|^2 \frac{e^2}{r_{a2}} dV_2 \quad (94.30')$$

elektronların bir-birilə, birinci elektronun «b» nüvəsi və ikinci elektronun «a» nüvəsi ilə Kulon qarşılıqlı təsir enerjisinin orta qiymətidir.

$$A(R) = e^2 \int \Psi_a^+(\vec{r}_{a1}) \Psi_b^+(\vec{r}_{b2}) \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} \right) \Psi_a(\vec{r}_{a2}) \Psi_b(\vec{r}_{b1}) dV_1 dV_2 = \\ = e^2 \int \frac{1}{r_{12}} \Psi_a^+(\vec{r}_{a1}) \Psi_b(\vec{r}_{b1}) \Psi_b^+(\vec{r}_{b2}) \Psi_a(\vec{r}_{a2}) dV_1 dV_2 - \\ - e^2 S \int \frac{1}{r_{a2}} \Psi_a^+(\vec{r}_{a2}) \Psi_b(\vec{r}_{b2}) dV_2 - e^2 S \int \frac{1}{r_{b1}} \Psi_a^+(\vec{r}_{a1}) \Psi_b(\vec{r}_{b1}) dV_1 \quad (94.31')$$

inteqralı *mübadilə enerjisi* adlanır. O, Pauli prinsipi əsasında sistemin dalğa funksiyasının simmetrik və ya antisimmetrik olması tələbindən elektronların hərəkətindəki korrelyasiya nəticəsində elektronlar və elektronlarla nüvələr arasında meydana çıxan qarşılıqlı təsir enerjisidir. O, qeyd etdiyimiz kimi, təmiz kvant effektidir, klassik analoqu yoxdur və sistemdəki qarşılıqlı təsirin təbiətindən asılı deyildir.

Nəhayət, S -ifadəsi (94.21') ilə verilmiş örtmə inteqralıdır.

C_1 və C_2 əmsalları üçün alınmış (94.29) bircins cəbri tənliklər sisteminin qeyri-trivial (sıfırdan fərqli) həlli olması üçün onların əmsallarından düzəlmiş determinant sıfıra bərabər olmalıdır:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon - K & \varepsilon S^2 - A \\ \varepsilon S^2 - A & \varepsilon - K \end{vmatrix} = 0 \quad (93.33)$$

yaxud

$$\varepsilon - K = \pm(\varepsilon S^2 - A), \quad (93.34)$$

Axırıncı bərabərlikdən ε üçün

$$\begin{aligned} \varepsilon = \varepsilon_1 &= \frac{K + A}{1 + S^2}, \\ \varepsilon = \varepsilon_2 &= \frac{K - A}{1 - S^2}, \end{aligned} \quad (93.34')$$

kimi iki qiymət alınır. (94.29)-da ε əvəzində onun ε_1 kökünün qiymətini yazsaq, $C_1 = C_2$ və (94.17) ilə (94.22)-dən molekulun uyğun halı

$$\Psi^{oS} = C_1(\Psi_I^o(1,2) + \Psi_{II}^o(2,1)) = [2(1 + S^2)]^{\frac{1}{2}}(\Psi_I^o + \Psi_{II}^o) \quad (94.35)$$

simmetrik funksiya ilə, ε_2 kökünün qiymətini yazdıqda isə $C_1 = -C_2$ və molekulun uyğun halı

$$\Psi^{oS} = C_1(\Psi_I^o(1,2) - \Psi_{II}^o(2,1)) = [2(1 - S^2)]^{\frac{1}{2}}(\Psi_I^o - \Psi_{II}^o) \quad (94.36)$$

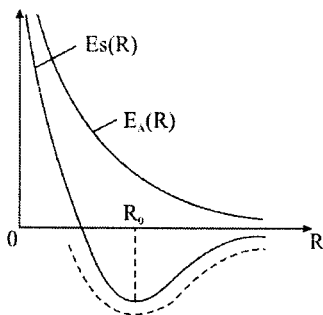
antisimmetrik funksiya ilə təsvir olunur.

Əsas halın $2E_n^o$ enerjisinə (atomlar qarşılıqlı təsirdə olmadıqda) olan ε_1 və ε_2 əlavələr atomlar yaxınlaşdıqda elektronların bir-birilə və nüvələrlə qarşılıqlı təsir nəticəsində meydana çıxan potensial enerjilərdir. ε_1 və ε_2 yaqın ki, atomlararası R məsafəsinin funksiyası olmalıdır. Onlara nüvələrin də qarşılıqlı təsir enerjisini əlavə etsək, molekulun simmetrik Ψ^{oS} və antisimmetrik Ψ^{oS} hallarının tam enerjisi uyğun olaraq

$$E_S(R) = 2E_n^o + \frac{e^2}{R} + \varepsilon_1(R) = 2E_n^o + \frac{e^2}{R} + \frac{K + A}{1 + S^2} \quad (94.37)$$

$$E_A(R) = 2E_n^o + \frac{e^2}{R} + \varepsilon_2(R) = 2E_n^o + \frac{e^2}{R} + \frac{K - A}{1 - S^2}. \quad (94.37')$$

$K(R)$, $A(R)$ və $S(R)$ inteqrallarına daxil olan $\Psi_a(\vec{r}_a)$ və $\Psi_b(\vec{r}_b)$ funksiyaları əvəzində hidrogen atomunun, məsələn, əsas halının $\Psi_{1s}(\vec{r})$ dalğa funksiyasını götürərək, onların R -dən asılılığını hesablamaq olar. Bu iş müəyyən yaxınlaşmada A.Sokolov və b. tərəfindən görülmüşdür. Biz, yalnız $E_S(R)$ və $E_A(R)$ -in R -dən asılılığını nümayiş etdirən əyriləri göstərməklə kifayətlənəcəyik (şəkil 48). Bu əyrilərdən görünür ki, elektronlarının spinləri antiparalel olan atomlar yaxınlaşdıqca $E_S(R)$ enerjisi mənfi qalmaqla əvvəlcə kəçir, bu onların bir-birini cəzb etməsinə uyğun olur.



Şəkil 48. İki hidrogen atomunun simmetrik (E_S) və antisimmetrik (E_A) hallarında qarşılıqlı təsir enerji əyriləri. Qırıq xətlə təcrübə əyrisi verilir.

qalır) molekul əmələ gətirə bilmir. Beləliklə, hidrogen molekulunu yalnız sinqlet halda yaranır.

Hidrogen atomlarının sinqlet və triplet spin hallarında qarşılıqlı təsirin müxtəlif xarakterini keyfiyyətcə də izah etmək olar. Doğrudan da, triplet halı təsvir edən (94.36) koordinat funksiyası nüvələri birləşdirən xəttə perpendikulyar olan və onun ortasında yerləşən müstəvidə

$\Psi_a(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b2}) = \Psi_a(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ (yəni $\Psi_I^o = \Psi_{II}^o$) olduğundan sıfıra bərabər olur. Sinqlet halı təsvir edən (94.35) funksiyası isə həmin müstəvidə ən böyük qiymət alır. Buradan, sinqlet halda elektronların nüvələr arasında olma ehtimalı böyükdür. Elektronlar və nüvələr arasında meydana çıxan qarşılıqlı cazibə qüvvələri dayanıqlı molekulun yaranmasına gətirir. $R < R_o$ -

$R = R_o$ -da minimum və $R < R_o$ -da kəskin artaraq müsbət qiymət alır, bu isə onların bir-birini itələməsinə uyğun olur. $R = R_o$ nöqtəsində əyrinin minimuma malik olması dayanıqlı molekulun yaranmasını təmin edir. Hidrogen atomlarında elektronların spinləri paralel olduqda onlar həmişə bir-birini dəf edir, belə ki, onlar yaxınlaşdıqca $E_A(R)$ enerjisi həmişə müsbət qalaraq kəskin artır, uzaqlaşdıqda isə tədricən sərbəst atomların $2E_n^o$

enerjisinə yaxınlaşır. $E_A(R)$ -in əyrisi minimuma malik olmadığından elektronların spinləri paralel olan iki hidrogen atomu R -in bütün dəyişmə oblastında bir-birini itələdiyinə görə ($E_A^o(R)$ həmişə müsbət

da elektronlar sinqlet halda belə nüvələr arasında ola bilmir və itələnmələri müşahidə olunur. Triplet hala gəldikdə isə elektronların nüvələr arasında olma ehtimalı R -in kiçik qiymətlərində belə çox kiçikdir. Bunun nəticəsində elektronlar arasında məsafənin artması ilə kəskin azalan itələmə qüvvələri meydana çıxır.

$E_s(R)$ enerjisinin minimumu nüvələr arasındakı məsafənin $R_0 = 0,80 \text{ \AA}$

nəzəri qiymətinə uyğundur, onun təcrübi qiyməti $0,74 \text{ \AA}$ -dir. Beləliklə, Haytler–London nəzəriyyəsi keyfiyyətə təcrübəyə uyğun nəticəyə gətirşə də, kəmiyyətə nəzəriyyə ilə təcrübə arasındakı uyğunluq o qədər də kifayətedici deyil. Lakin bir neçə parametrlı variasiya metodundan istifadə etməklə nəzəriyyə ilə təcrübə arasında kifayət qədər dəqiq uyğunluğa gəlmək olur.

§95. Nüvələrarası məsafə sabit qaldıqda molekulun elektron hallarının təsnifi

Atomda olduğu kimi, molekulun elektron hallarının klassifikasiyası, uyğun hallarda hərəkət inteqrallarının qiymətinin verilməsi ilə aparılır. Hərəkət inteqrallarının sayı isə elektronların hərəkət etdiyi sahənin və fəzanın simmetriyası ilə təyin olunur.

Məlum olduğu kimi, molekulada elektronların hərəkət halını təyin edən \tilde{H}_e Hamilton operatoru ilə kommutasiya edən bütün digər operatorların məxsusi qiymətləri sistemin stasionar hallarının enerjisi ilə eyni zamanda dəqiq ölçülə bilir. Atomda elektronlara təsir edən sferik simmetrik (nüvə nöqtəvi yük hesab edildikdə) sahədən fərqli olaraq, iki atomlu molekulda elektronlara təsir edən sahə silindrik simmetriyaya malikdir. Simmetriya oxu kimi iki nüvəni birləşdirən ox götürülür və adətən z oxu simmetriya oxu boyunca yönəldilir.

Molekulu simmetriya oxu (buna molekul oxu da deyilir) ətrafında φ bucağı qədər döndərsək (fırlatsaq), elektronların nüvələrlə və bir-biri ilə qarşılıqlı təsir enerjiləri və \tilde{H}_e Hamilton operatoru dəyişmir. Başqa sözlə, elektronların tam hərəkət miqdarı momentinin simmetriya oxu üzrə proyeksiyası hərəkət inteqralı olur. Spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alınmadıqda, elektronların tam orbital və tam spin momentlərinin molekul oxu boyunca proyeksiyaları ayrılıqda saxlanılır.

Molekulda elektron sisteminin stasionar halları, atomda olduğu kimi, elektronların tam orbital hərəkət miqdarı momentinin və L_z proyeksiyasının məxsusi qiymətlərinə görə bir-birindən fərqləndirilir. Bu momentin molekul oxu boyunca proyeksiyasının mütləq qiyməti $L_z = \hbar A$ kimi təyin olunur. Burada $A=0, 1, 2, \dots$ qiymətlərini alır. A -nın müxtəlif qiymətlərinə uyğun

elektron halları yunan hərfləri ilə işarə edilir: $A=0$ -a uyğun hal Σ , $A=1$ -ə, uyğun hal Π , $A=2$ -yə, uyğun hal Δ , $A=3$ -ə, uyğun hal Φ və i.a. (bu işarələr atomun S, P, D, \dots hallarının işarələrinə uyğun seçilir).

Yuxarıda dediyimiz kimi A -nın qiyməti L_z -in mütləq qiymətini təyin edir. Lakin sistemin stasionar hallarının enerjisi hərəkət miqdarı momentinin z oxuna nəzərən istiqamətindən asılı olmadığından $L_z = \hbar A$ və $L_z = -\hbar A$ üçün enerjinin qiyməti eyni olur. Deməli, molekulun elektron halları (L_z -in qiymətinə görə) ikiqat cırlaşmış olur.

Molekulda elektron halları S tam spinin qiyməti ilə də fərqləndirilir. Tam spinin $2S+1$ proyeksiyasına uyğun halların hamısı eyni enerjiyə malik olur. Spin-orbital qarşılıqlı təsir nəzərə alındıqda elektron hallarının tam spinin proyeksiyasına görə cırlaşması aradan götürülür və $2S+1$ hal bir-birinə çox yaxın yerləşmiş bir qrup təşkil edir. Beləliklə, $2S+1$ ədədi molekulun elektron hallarının *multipletliyini* təyin edir. Multipletliyin tərtibini göstərən $2S+1$ ədədi A -nın verilmiş qiymətinə uyğun hərfin solunda yuxarıda yazılır (^{2S+1}A). $2S+1$ ədədi vahidə bərabər olanda uyğun hal *singlet*, iki olanda *doublet*, üç olanda *triplet* və i.a. adlanır. Məsələn, iki eyni atomdan ibarət hidrogen molekulu yalnız elektronların tam spini sifra bərabər olanda, yəni $^1\Sigma$ halında dayanıqlı sistem təşkil edir.

\tilde{H}_e operatoru ilə kommutasiya edən ikinci operator molekul oxundan keçən istənilən müstəviyə görə elektronların koordinatlarını əks etdirən (güzgü əksi) \tilde{P} operatorudur. Baxılan müstəvinin z və y oxlarından keçdiyini qəbul etsək, bu əksə görə elektronların z və y koordinatları işarəsini dəyişmir. x koordinatları isə dəyişir ($x \rightarrow -x$ -ə keçir). Lakin bu çevrilmədə kinetik enerji operatoru və koordinatlardan $(x, -x)^2$ kimi kvadratik asılı olan qarşılıqlı təsir operatoru dəyişikliyə uğramır. Deməli, \tilde{P} operatoru \tilde{H}_e operatoru ilə kommutasiya edir, onların məxsusi qiymətləri eyni zamanda müəyyən qiymətə malikdir. Molekulda elektron stasionar hallar A -nın və spinin proyeksiyasının məxsusi qiymətlərindən başqa \tilde{P} operatorunun $P = \pm 1$ məxsusi qiymətləri ilə də səciyyələnir. Lakin qeyd edək ki, yuxarıdakı güzgü əksi zamanı orbital hərəkət miqdarı momenti operatorunun \tilde{L}_z proyeksiyası \tilde{P} operatoru ilə kommutasiya etmir. Doğrudan da, \tilde{L}_z -in

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

ifadəsindən görünür ki, \tilde{P} -nin təsiri x -i $-x$ -ə keçirsə də y koordinatının işarəsini dəyişmir, yəni bu əksə görə \tilde{L}_z operatoru invariant qalır. Ona

görə də yeganə bir $L_z=0$ -a uyğun haldən başqa, digər stasionar hallar eyni zamanda L_z və \tilde{P} -nin məxsusi qiymətləri ilə xarakterizə edilə bilmir. Molekulun oxundan keçən müstəviyə görə ardıcıl iki güzgü əksi zamanı $\tilde{P}^2\psi = P^2\psi = \psi$ -yə gətirdiyindən, $P^2=1$ və $P=\pm 1$ alınır. \tilde{P} əslində sistemin $L_z=0$ ($A=0$)-a uyğun stasionar halının dalğa funksiyası $P=1$ qiymətində işarəsini dəyişmir, $P=-1$ -də isə işarəsini dəyişir. Bu iki elektron halı, uyğun olaraq, $\sum^{2S+1} +$ və $\sum^{2S+1} -$ kimi işarə olunur.

İndi də fərz edək ki, baxılan molekul nüvələri eyni olan ikiatomlu molekuldur. Belə molekulun təsviri zamanı koordinat başlanğıcını nüvələrarası $\vec{R}(\vec{R}||\vec{z})$ məsafəsinin ortasında yerləşdirsək, elektronların bütün koordinatlarını inversiya edən, yəni \vec{r}_i -ləri $-\vec{r}_i$ -lərə çevirən \tilde{P}_i operatoru \tilde{H}_e ilə kommutasiya edir. Belə çevrilmə molekulda elektronların yerdəyişməsinə, yəni mübadiləsinə ekvivalentdir. Mübadilə operatorunun məxsusi qiymətləri isə ± 1 -ə bərabərdir (bax: §81). $P_i=1$ -də uyğun hal cüt funksiya, $P_i=-1$ -də isə tək funksiya ilə təsvir olunur. Buradan cüt hallar g , tək hallar isə u hərfi ilə işarə olunur. Bu işarələr A -nın qiymətinə uyğun hərflərin sağında aşağıda yazılır. Məsələn, $L_z=0$ -a uyğun hallar \sum_g^{\pm} və \sum_u^{\pm} kimi işarə olunur. \tilde{P}_i inversiya operatoru \tilde{L}_z ilə kommutasiya etdiyindən A -nın 1,2 və i.a. qiymətlərinə uyğun hallar da tək və ya cüt ola bilər. Onlar $\Pi_g, \Pi_u, \Delta_g, \Delta_u$ və Φ_g, Φ_u ($2S+1$ vuruğu sadəlik üçün buraxılıb) kimi yazılır.

Hidrogen molekuluna gəldikdə isə onun yalnız elektronlarının tam spini sıfır, \tilde{P} güzgü əksində işarəsini dəyişməyən və elektronların koordinatlarının inversiyasına görə cüt funksiya ilə təsvir olunan \sum_g^+ halı dayanıqlı haldır. Spini $S=1, S_z=0, \pm 1$ uyğun \sum_u^{\pm} triplet hallarında molekul atomlara parçalanır.

Ümumiyyətlə hər hansı təbiətli molekulun yaranması zamanı sistemin bu və ya başqa simmetriyaya malik olmasının olduqca böyük rolu vardır.

İkiatomlu molekulun əksəriyyəti üçün bütün mümkün olan hallardan elələri üstünlük təşkil edir ki, onu xarakterizə edən dalğa funksiyası bütün simmetriya çevrilmələrinə görə invariant qalsın.

§96. İkiatomlu molekulun rəqsi və fırlanma hərəkətlərinin enerji spektrləri

Adiabatik yaxınlaşma metodunun ikinci mərhələsinə—elektron sisteminin verilmiş halında molekulun rəqsi və fırlanma hərəkətlərinin tədqiq-

qinə keçək. Molekulun nüvələrinin hərəkəti ilə bağlı olan bu hərəkəti (93.12) tənliyi ilə təsvir olunur və elektronların hərəkət enerjisi $E^o(R) = E_o$ bu tənləkdə potensial enerji rolunu oynayır.

Nüvələrin nisbi hərəkətini təsvir etmək məqsədilə ətalət mərkəzi sisteminə keçək:

$$\vec{r} = \frac{M_1 \vec{R}_1 + M_2 \vec{R}_2}{M_1 + M_2}, \quad \vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2 \quad (96.1)$$

Onda nisbi hərəkəti təsvir edən tənlik (93.12)-dən (bax: §39)

$$\left[-\frac{1}{2MR^2} \frac{\partial}{\partial R} (R^2 \frac{\partial}{\partial R}) + \frac{\tilde{L}^2}{2MR^2} + E_o(R) \right] \Phi(\vec{R}) = E \Phi(\vec{R}) \quad (96.2)$$

şəklində yazılar, burada

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

sistemin gətirilmiş kütləsi, M_1 və M_2 isə nüvələrin kütləsidir.

$E_o(R)$ enerjisi iki nüvə arasındakı məsafənin yalnız mütləq qiymətinə, sistemin hərəkət miqdarı momentinin kvadratı operatoru \tilde{L}^2 yalnız bucaqlardan asılı olduğu üçün \tilde{L}^2 sistemin $\tilde{H}_H = T_H + E_o(R)$ Hamilton operatoru ilə kommutasiya edir, yəni onlar ümumi məxsusi funksiyalara malikdir. Ona görə də $E_o(R)$ -in (96.2) tənliyinə gətirdiyi bütün dəyişikliklər yalnız radial funksiyanın analitik ifadəsində öz əksini tapır. Buna görə də (96.2) tənliyinin həlli,

$$\Phi(\vec{R}) = R(R)Y(\theta, \varphi) = \frac{u(R)}{R}Y(\theta, \varphi). \quad (96.3)$$

şəklində axtarıla bilər. Burada $Y(\theta, \varphi)$ – \tilde{L}^2 operatorunun məxsusi funksiyalarıdır:

$$\tilde{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = h^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (96.4)$$

(96.3) və (96.4) bərabərlikləri əsasında $u(R)$ funksiyası üçün

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{d^2 u(R)}{dR^2} + \left[E_o(R) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2MR^2} \right] u(R) = Eu(R) \quad (96.5)$$

tənliyi alımr.

$$W_l(R) = E_o(R) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2MR^2} \quad (96.6)$$

effektiv potensial daxil edək. O, sferik simmetrikdir. $l = 0$ -da $R = R_o$ nöqtəsində ən böyük mənfi (minimum) qiymətə malikdir və l -in çox da böyük olmayan qiymətlərində molekulun dayanıqlığı təmin edir (şəkil 49).

Molekulun dayanıqlı halından $x=R-R_o$ kənara çıxmaları o qədər böyük deyilsə, onu R_o və ya $x=0$ nöqtəsi ətrafında x -in üstlərinə görə sıraya ayırmaq olar:

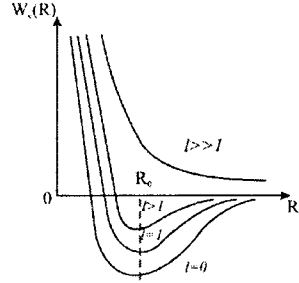
$$W_l(R) = W_l(0) + \frac{x}{1!} W_l'(0) + \frac{x^2}{2!} W_l''(0) + \dots \quad (96.7)$$

$R = R_o$ -da $W_l(R)$ minimum olduğundan $W_l'(0) = 0$, $W_l''(0) > 0$ olar. $W_l''(0) = m\omega_l^2$ (elastiklik əmsalı) kimi yeni parametr daxil edilsə, (96.5) tənliyi

$$u''(x) + \frac{2M}{\hbar^2} \left(E' - \frac{m\omega_l^2 x^2}{2} \right) u(x) = 0 \quad (96.8)$$

şəklə düşər. Burada

$$\begin{aligned} E' &= E^0 - W_l(R_o), \\ W_l(R_o) &= E_o(R_o) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}. \end{aligned} \quad (96.9)$$



Şəkil 49. İki atomlu molekulun rəqsi və fırlanma hərəkətləri arasındakı əlaqə.

və $I = MR_o^2$ – molekulun ətalət momentidir.

(96.8) tənliyi xətti harmonik ossilyatorun tənliyidir (bax: §35). Xətti ossilyatorun enerjisi kvantlanır və onun spektri

$$E'_k = \hbar\omega_l \left(k + \frac{1}{2} \right) \quad (96.10)$$

ifadəsi ilə verilir, burada $k=0, 1, 2, \dots$ kimi tam müsbət qiymətlər alır.

(96.9) və (96.10)-dan ikiatomlu molekulun tam enerjisi

$$E = E' + W_l(R_o) = E_o(R_o) + \frac{e^2}{R_o} + \hbar\omega_l \left(k + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}. \quad (96.11)$$

hidrogen molekulunun baxılan səviyyəsi üçün bu ifadə

$$\begin{aligned} E_{nkl} &= E_n^o(R_o) + \frac{e^2}{R_o} + \hbar\omega_l \left(k + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} = \\ &= E_n^o(R_o) + \frac{e^2}{R_o} + W_l(R_o) \end{aligned} \quad (96.12)$$

şəklinə düşür, burada $E_n^o = E_n^o(R)$ -in analitik ifadəsi (94.37) ilə verilmişdir.

Alınmış (96.11) və (96.12) ifadələri təxmini ifadələrdir. (96.11)-də ikiatomlu molekulun tam enerjisi elektronların $E_n^o(R)$ hərəkət enerjisi ilə nüvvələrin rəqsi enerjisi və molekulun bütövlükdə fırlanma enerjisinin additiv cəminə bərabərdir. Burada bu üç hərəkət növü arasındakı korrelyasiya nəzərə alınmır. Bu onunla əlaqədardır ki, (96.11) ifadəsi çıxarılanda $x = R - R_o$ -in yüksək tərtibləri ilə mütənəsb olan hədləri və R -in l -dən asılılığı nəzərə alınmamışdır. Ona görə də (96.11) və ya (96.12) ifadələri k və l -in yalnız kiçik qiymətlərində doğrudur.

k -nın $k \gg 1$ qiymətlərində rəqsi hərəkətin amplitudu kifayət qədər böyük ola bilər ki, o da atomlararası rabitəni qırıb molekulu dağıda bilər. Eyni sözləri fırlanma hərəkəti haqqında da demək olar. l -in kifayət qədər böyük qiymətlərində fırlanma hərəkəti zamanı meydana çıxan mərkəzdənqaçma qüvvələri də molekulu parçalaya bilər (şəkil 49-da $k \gg 1$, $l \gg 1$ əyrisi).

(96.12)-yə daxil olan $E_n^o(R)$ hidrogen molekulunun dayanıqlı tarazlıq halına uyğun $R = R_o$ məsafəsi və $W_l(R)$ -in ikinci tərtib törəməsinin

$R = R_0$ -dakı qiyməti, yuxarıda gördüyümüz kimi, nəzəri hesablanır. Bu kəmiyyətlər təcrübədən də məlumdur. Deməli, nəzəriyyəni təcrübə ilə müqayisə etmək olar.

R_0 -ı molekulun fırlanma spektrlərindən təyin etmək olar, belə ki, fırlanma hərəkətinin iki qonşu səviyyəsi arasındakı

$$E_{l+1} - E_l = \frac{\hbar^2}{I}(l+1)$$

məsafəsi $I = mR_0^2$ -dan (ətalət momenti) asılıdır. Təcrübi ölçülər $\frac{\hbar^2}{2I}$ üçün

$\frac{\hbar^2}{2I} = 1,15 \cdot 10^{-14}$ *erq* qiymətini alır. Buradan $R_0^{lac} = 0,74 \text{ \AA}$, onun nəzəri

qiyməti isə $R_0^{nəz} = 0,72 \text{ \AA}$ -dır.

Molekulun rəqsi hərəkətinin ω_l -tezliyi $W_l(R)$ effektiv potensialının ikinci tərtib törəməsi ilə təyin olunur. O, təcrübədə molekulun rəqsi spektrlərindən tapılır. Təcrübədə $\hbar\omega_l$ üçün $\hbar\omega_l = 8,75 \cdot 10^{-13}$ *erq* qiyməti alınır. Buradan $\omega_l^{lac} = 1,28 \cdot 10^{14} \text{ san}^{-1}$, nəzəri qiyməti isə $\omega_l^{nəz} = 1,29 \cdot 10^{14} \text{ san}^{-1}$ -dir.

Molekulun dissosiasiya enerjisi əsas ($k=0, l=0$) halda olan molekulun iki izolə edilmiş atoma parçalamğa lazım olan enerji başa düşülür. Hidrogen molekulunun əsas halının enerjisi (96.12)-dən

$$E_{s00} = E_s^0(R_0) + \frac{\hbar\omega_l}{2}$$

olduğundan dissosiasiya enerjisi $D = -E_{s00}$ olar. D üçün təcrübədə $D^{lac} = 4,73 \text{ eV}$, nəzəriyyədə isə $D^{nəz} = 4,69 \text{ eV}$ qiymətləri alınır. Bu müqayisədən görünür ki, nəzəri nəticələr təcrübədə ölçülən kəmiyyətlərə kifayət qədər yaxındır. Bu da kvant nəzəriyyəsi prinsiplərinin doğruluğuna dəlalət edir.

Yuxarıda gördük ki, nüvələrin nisbi hərəkətini təsvir edən $\Phi(R)$ funksiya (96.3) ifadəsi ilə verilir. Hidrogen molekulunda hər iki atomun nüvəsi protondur. Zərrəciklərin seçilməzlik prinsipinə görə molekulda nüvələrin mübadiləsi $\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$ fərqlinin işarəsini dəyişir. \vec{R} məsafəsi $-\vec{R}$ ilə əvəz olunur və sferik $Y(\theta, \varphi)$ funksiyası $(-1)^l$ vuruğuna vurulur (bax: §15). Deməli, (96.3) funksiyası nüvələrin yerdəyişməsi zamanı

$$\Phi(R) \rightarrow \Phi_{kl}(-\vec{R}) = (-1)^l \Phi_{kl}(\vec{R})$$

kimi dəyişir, yəni o, l -in çüt qiymətlərində simmetrik, l -in tək qiymətlərində isə antisimmetrik olur.

Hidrogen molekulunda nüvələrin spinləri paraleldirsə, onların tam spini vahid ($S=1$), $\Phi(R)$ koordinat dalğa funksiyası antisimmetrik (spin funksiyaları simmetrik) olur. Belə hidrogen ortohidrogen adlanır və o, yalnız $l=1, 3, 5, \dots$ fırlanma hərəkəti hallarında ola bilər. Nüvələrin spinləri antiparalel, tam spini sıfıra bərabər olduqda ($S=0$) isə $\Phi(R)$ koordinat funksiyası simmetrik (spin funksiyası antisimmetrik) olur. Belə hidrogen parahidrogen adlanır və o yalnız $l=0, 2, 4, \dots$ fırlanma hərəkəti hallarında ola bilər. Bu səbəbdən onların optik xassələri və dissosiasiya enerjiləri fərqlənir.

Spinləri paralel olan iki zərrəcikli sistemin mümkün olan hallarının sayı, spinləri antiparalel olan sistemin hallarının sayından üç dəfə çox olduğundan, otaq temperaturunda adi hidrogen qazı 25% parahidrogen və 75% ortohidrogen qazlarının qarışığından ibarətdir.

Temperatur aşağı düşdükcə, parahallar əsas hal olduğundan, qarışıqda parahidrogenin faizi artmağa başlayır və mütləq sıfıra yaxın bütün hidrogen parahidrogenə çevrilir. Belə alınmış təmiz parahidrogen çox dayanıqlı olur və qeyri-tarazlıqdakı qarışıqda üç həftəyə yaxın öz dayanıqlığını saxlaya bilər. Təmiz ortohidrogen almaq mümkün olmamışdır.

Hidrogen molekulunda nüvələrdən biri deuterium (D_2) olarsa, proton ilə deuterium eyni zərrəciklər olmadığından molekulun nüvə funksiyası nüvələrin yerdəyişməsinə görə nə simmetrik və nə də antisimmetrik olmalıdır. Belə molekul l -in istənilən qiymətinə uyğun olan hallara malik ola bilər. Buradan çıxır ki, H_2 molekulunu ilə HD molekulunun spektrləri bir-birindən fərqlənməlidir. Bu fərq təcrübədə, doğrudan da, müşahidə olunur və beləliklə, kvant mexanikasının əsas prinsiplərindən biri – eyni zərrəciklərin seçilməzlik prinsipi bir daha təsdiq edilmiş olur.

§97. İkiatomlu molekulun şüalanma spektrləri

§96-da göstərdik ki, adiabatik yaxınlaşmada molekulun tam enerjisi üç bir-birindən asılı olmayan enerjilərin additiv cəminə bərabərdir. Tam enerji üçün (96.11) və ya (96.12) ifadələrini nüvələrarası R məsafənin R_0 ətrafında kiçik dəyişmələri üçün almışdıq. Molekul, şüaburaxma və şüaudma prosesləri zamanı öz fərdiliyini saxlayırsa, həmin düsturda ümumiliyi pozmadan R_0^{-1} ilə əvəz etmək olar. Onda (96.12) düsturu

$$E_{nkl}(R) = E_n(R) + E_k^r + E_l^f \quad (97.1)$$

kimi yazılar. Burada

$$E_n(R) = E_{ns}^o + \frac{e^2}{R} \quad (97.2)$$

nüvələrin Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi daxil olmaqla elektronların hərəkət enerjisi,

$$E_l^f = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad (97.3)$$

molekulun bütövlükdə fırlanma enerjisi ($I = MR^2$ – molekulun ətalət momenti, $\frac{\hbar}{2I}$ – fırlanma sabitidir) və

$$E_k^r = \hbar\omega_l \left(k + \frac{1}{2} \right) \quad (97.4)$$

molekulun daxilində nüvələrin rəqsi enerjisidir.

k kvant ədədi, l -in verilmiş qiymətində rəqsi hərəkət hallarının enerjisinin artması istiqamətində düzülüşünü təmin edən ədəddir, o, rəqs kvant ədədi adlanır.

Nüvələrin $W_l(x)$ effektiv potensialının ikinci törəməsinin $x = 0$ ($R = R_0$) nöqtəsindəki qiyməti ilə təyin olunan ω_l^r rəqs tezliyi $\frac{1}{\sqrt{M}}$ ilə

mütənasib olduğundan qonşu rəqs səviyyələri arasındakı ΔE_l^r fərqi $\frac{1}{\sqrt{M}}$,

(97.3)-dən qonşu fırlanma səviyyələri arasındakı ΔE_l^f fərqi $\frac{I}{M}(I = MR^2)$

ilə mütənasibdir, elektronların qonşu hərəkət hallarının enerjiləri arasındakı ΔE_{el} fərqi isə ümumiyyətlə M -dən asılı deyildir. Elektron kütləsinin proto-

nun kütləsinə olan $\frac{m}{M}$ nisbətinin 10^{-3} tərtibində olduğunu nəzərə alsaq,

$$\Delta E^{el} \gg \Delta E^r \gg \Delta E^f \quad (97.5)$$

olur. Buradan çıxır ki, nüvələrin rəqsi hərəkəti elektron səviyyələrini onlara

nisbətən sıx yerləşmiş səviyyələrə, fırlanma hərəkəti isə öz növbəsində rəqsi hərəkətin enerji səviyyələrini daha sıx yerləşmiş səviyyələrə parçalayır.

ΔE^r fərqi ΔE^{el} -dan və ΔE^f fərqi isə ΔE^r -dən min dəfələrlə kiçik olduğundan molekulyar spektrlər üç növ olur: 1) yalnız fırlanma hərəkətinin xarakterinin dəyişməsi ilə əlaqədar olan – fırlanma (rotasiya) spektrləri; 2) fırlanma və rəqsi hərəkətlərin dəyişməsi ilə əlaqədar olan – fırlanma-rəqs (rotasiya-vibrasiya) spektrləri və 3) elektronların hərəkət hallarının dəyişməsi nəticəsində molekulun fırlanma və rəqsi hərəkət hallarının dəyişməsi hesabına yaranan molekulun elektron spektrləridir.

Molekulun kifayət qədər kiçik həyəcanlanmaları nəticəsində yalnız fırlanma spektri müşahidə oluna bilər. Molekulun fırlanma hərəkəti (96.4) ilə təyin olunan $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sferik funksiyaları ilə təsvir olunduğundan, fırlanma enerji səviyyələri arasında baş verə biləcək keçidlər l kvant ədədi üçün §42-də tapılmış seçmə qaydası ilə seçilir. Bu seçmə qaydasına görə yalnız elə keçidlər mümkündür ki, onlar üçün $\Delta l = \pm 1$ şərti ödənilsin.

$$\text{Bu keçidlərdə şüalanan tezliklər } \omega_{l,l+1} = \frac{E_l - E_{l+1}}{\hbar} \text{ və } \omega_{l,l-1} = \frac{E_l - E_{l-1}}{\hbar}$$

kimi təyin olunur. Beləliklə, fırlanma spektrlərində $\omega_{l,l+1}$ və $\omega_{l,l-1}$ tezliklərə uyğun iki budaq müşahidə olunur.

Elektron halları dəyişmədiyi halda, şüalanan fırlanma-rəqsi spektrləri ilə tanış olaq. Xətti ossilyatorun nəzəriyyəsiindən məlumdur ki, k rəqs kvant ədədinin yalnız $\Delta k = \pm 1$ dəyişməsinə uyğun keçidlər mümkündür.

Şüalanma spektri yuxarı E_k rəqs səviyyələrindən aşağı E_{k-1} səviyyələrinə keçidlərlə əlaqədardır. l -kvant ədədi $l+1$ və $l-1$ kimi iki istiqamətdə dəyişdiyindən fırlanma-rəqsi spektrlərində şüalanan tezliklər (97.1)-(97.4)-dən

$$\omega = \frac{E_k - E_{k-1}}{\hbar} + \frac{E_l - E_{l'}}{\hbar} = \omega^r + \frac{\hbar}{2I} [l(l+1) - l'(l'+1)] \quad (97.6)$$

Baxılan halda fərz olunur ki, bu keçidlər zamanı molekulun ətalət momenti dəyişmiş, yəni l' -in $l+1$ və $l-1$ dəyişmələrində ω^r sabit qalır.

$l' = l+1$ -də spektrin birinci budağının tezlikləri

$$\omega_1 = \omega^r - \frac{2\hbar}{2I}(l+1), \quad (97.7)$$

l' -in $l-1$ -də ikinci budağın tezlikləri

$$\omega_2 = \omega^r + \frac{2\hbar}{2I}l \quad (97.8)$$

kimi təyin olunur. İkinci budaqda l sıfıra bərabər ola bilməz. Onda $l' = -1$ olardı. Bu işə mümkün deyil, çünki l' müsbət kəmiyyəti təyin edir.

ω^r -in verilmiş qiymətində ω_1 və ω_2 tezliklərinin yerləşmə ardıcılığına baxsaq, ω_1 tezliyi $\omega^r - \frac{\hbar}{I}$ qiymətindən başlayaraq azalmağa, ω_2 tezliyi isə $\omega^r + \frac{\hbar}{I}$ -dən başlayaraq artmağa başlayır. Ona görə də çox vaxt $\omega_1 = \omega^-$ və $\omega_2 = \omega^+$ kimi işarə edirlər. Hər iki spektrin xətləri arasındakı məsafə $\frac{\hbar}{I}$ -yə, budaqların xətləri arasındakı məsafə isə $\frac{2\hbar}{I}$ -yə bərabərdir. ω^- tezliklərinə uyğun spektr xətlərinin çoxluğuna P budaq, ω^+ tezliklərinə uyğun spektr xətlərinin, çoxluğuna isə R budaq deyilir.

Molekulun quruluşunun öyrənilməsində fırlanma-rəqs spektrlərinin böyük əhəmiyyəti vardır. Onların vasitəsilə molekulların ətalət momentini, qazın izotop tərkibini təyin etmək mümkündür, belə ki, müxtəlif izotoplardan təşkil olunmuş molekulların ətalət momentləri müxtəlifdir. Bu tezliklər spektrin infraqırmızı hissəsində yerləşir.

Nəhayət molekulda elektron enerji səviyyələri arasında baş verən keçidlərə uyğun şüalanma spektrinin təhlilinə keçək. Bu spektrin xarakteri yuxarıda baxdığımız infraqırmızı spektrdən kəskin fərqlənir.

Bu spektrin şüalanma tezlikləri (97.1)-dən

$$\omega = \frac{E_{nk} - E_{n'l'k'}}{\hbar} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} + \frac{E_k - E_{k'}}{\hbar} + \frac{E_l - E_{l'}}{\hbar}, \quad (97.9)$$

yaxud (97.3) və (97.4)-dən

$$\omega = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} + \omega_k^r \left(k + \frac{1}{2} \right) - \omega_{k'}^r \left(k' + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar}{2I} l(l+1) - \frac{\hbar}{2I'} l'(l'+1) \quad (97.10)$$

kimi təyin olunur. Qeyd edək ki, $\omega_k^r \neq \omega_{k'}^r$ və $l \neq l'$ -dir. ω^r və molekulun ətalət momenti $I = MR^2$ molekulun elektron halları ilə təyin olunur. Bu halların dəyişməsi ω^r və I -nin də dəyişməsinə gətirir.

Elektron halları arasındakı keçidlərdə molekulun enerjisinin dəyişməsi

kifayət qədər böyük olduğundan, elektron spektrində şüalanan tezliklər spektrin görünən hissəsində yerləşir. k və k' kvant ədədlərinin verilmiş qiymətinə uyğun spektr xətlərinin çoxluğu *zolaq* adlanır. Zolaq özü üç budaqdan təşkil olunur. Bu budaqlar l' kvant ədədinin $l' = l + 1$, $l' = l$ və $l' = l - 1$ qiymətlərinə uyğundur. Yuxarıda dediyimiz kimi $\Delta l = l - l' = -1$ -ə uyğun budaq R , $\Delta l = 1$ -ə uyğun budaq P , $\Delta l = 0$ -a uyğun sıfırıncı budaq isə Q -budağı adlanır. Q -budağını təşkil edən tezliklər fırlanma səviyyələri arasındakı keçidlərin hesabına yox, atomun daxilində baş verən keçidlər zamanı molekulun ətalət momentinin dəyişməsi hesabına şüalanır.

$l' = l - 1$ -ə uyğun R budağının tezlikləri (97.10)-dan

$$\omega_2 = \omega^+ = \omega_{nk} + Bl^2 + Cl \quad (97.11)$$

olar. Burada

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar} + \omega_k \left(k + \frac{1}{2} \right) - \omega_{k'} \left(k' + \frac{1}{2} \right), \quad (97.12)$$

$$B = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{I - I'}{I \cdot I'}, \quad C = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{I + I'}{I \cdot I'}$$

R -budağı yuxarı səviyyələrdən aşağı səviyyələrə olan keçidlərin nəticəsidir. O, *müsbət budaq* da adlanır.

$l' = l + 1$ -ə uyğun ikinci P -budağın tezlikləri

$$\omega_1 = \omega^- = \omega_{nk} + B(l+1)^2 - C(l+1) \quad (97.13)$$

kimi təyin olunur. Bu budaq aşağı səviyyələrdən yuxarı səviyyələrə olan keçidlərin nəticəsidir. O, *mənfi budaq* da adlanır.

Nəhayət $l' = l$ -ə uyğun Q -budağının tezlikləri

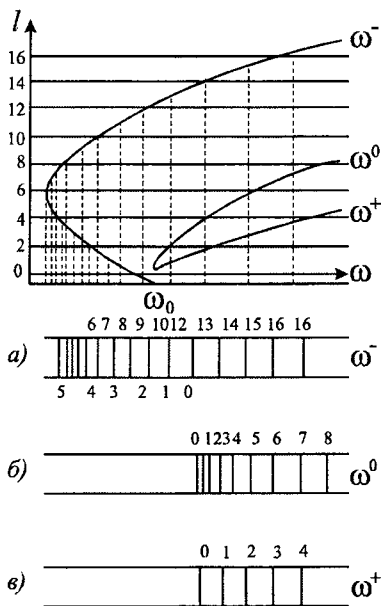
$$\omega^0 = \omega_{nk} + B(l^2 + 1) \quad (97.14)$$

olur.

(97.11), (97.13) və (97.14)-dən görünür ki, hər üç budağın tezlikləri l -kvant ədədinin kvadratı ilə mütənəsbdir. Tezliklərin spektrdə yerləşmə qaydasını müəyyən etmək üçün onları qrafik təsvir edək. Bunun üçün ordinat oxunda l -in qiymətləri, absis oxunda isə ω -nın qiymətləri göstərilir (şəkil 50). Şəkildə göstərilən parabolalar $l > l' (B > 0)$ halına uyğundur.

Bu diaqram vasitəsilə çox asanlıqla təcrübədə müşahidə olunan tezlikləri almaq olar. l -in müxtəlif qiymətlərinə uyğun üfüqi xətlər ilə parabola-

nın kəsişdiyi nöqtələrin üfqi oxla proyeksiyasını götürsək, tezliklərin müşahidə olunan qiymətini alarıq (bax: şəkil 50 a, b, c).



Şəkil 50. Molekulların zolaqlı spektrləri:

ω^+ – müsbət R budağı; ω^- – mənfi P budağı, ω_0 – Q budağı.

olunur, bəzən də Q -budağı ümumiyyətlə müşahidə olunmur.

Diagramdan görünür ki, molekulun elektron spektrlərində ω_{nk} elektron-rəqs tezliyi ilə fırlanma tezliklərinin toplanması nəticəsində spektrdə bir xətt əvəzinə soldan-küçük tezliklər tərəfdən kəskin məhdudlanan, sağdan isə yüksək tezliklər tərəfdən sərhədi yayılmış bütöv zolaq alınır.

$I < I'(B < 0)$ halında isə parabola əks istiqamətə çevrilmiş olur. Onda sağdan yüksək tezliklər tərəfdən kəskin məhdudlanan, soldan isə kiçik tezliklər tərəfdən isə sərhədi yayılmış bütöv zolaq alınır.

$I = I'(B = 0)$ halında isə $\omega^0 = \omega_{nk}$ olduğundan spektr ω_{nk} tezliyinə uyğun xətlərdən ibarət olur və fırlanma spektrinə uyğun zolaqlar müşahidə olunmur.

Qeyd edək ki, yuxarıdakı qanunauyğunluqlardan kənarə çıxmalar da müşahidə olunur. Elektron səviyyələri cırlaşmış olduqda spektrdə üçdən çox budaqlar müşahidə

§98. Kimyəvi rabitə (valentlik)

Kimyəvi rabitənin, yəni valentliyin kvant mexanikası baxımından izahına keçək. Valentlik dedikdə bir elementin atomunun digər elementlərin bir neçə atomu ilə birləşərək molekul əmələ gətirmə xassəsinə deyilir. Hər bir atom müəyyən valentliyə malikdir. Atomlar birləşərək molekul əmələ gətirəndə valentlik qarşılıqlı doymalıdır, yəni baxılan atomun hər bir kimyəvi rabitəsi (valentliyi) ikinci atomun kimyəvi rabitəsinə uyğun olmalıdır.

Elementlərin kimyəvi xassələrinin tədqiqində kvant mexanikasının ilk müvəffəqiyyəti heteropolyar rabitənin nəzəri izahı olmuşdu. Heteropolyar rabitənin nəzəriyyəsinə (*Kossel nəzəriyyəsinə*) görə heteropolyar kimyəvi birləşmə, atomların xarici təbəqələrindəki elektronların reaksiyada iştirak

edən atomlar arasında yenidən paylanması nəticəsidir və heteropolyar rabitənin sayı, yəni atomun valentliyi reaksiya zamanı bir atomun digər atoma verdiyi və ya ikincinin birincidən aldığı elektronların sayına bərabərdir. Elektronları verən atomun valentliyi müsbət, alan atomun valentliyi mənfi hesab olunur.

Beləliklə, kimyəvi rabitə müxtəlif atomlara məxsus olan elektronların ümumiləşməsi nəticəsində yaranır. Atomlar o vaxt reaksiya girir ki, yaranacaq sistemin (molekulun) enerjisi atomların enerjiləri cəmindən az olsun. Enerjinin azalması isə molekulun elektrik örtüyündə elektrik yükünün yenidən paylanması nəticəsində baş verir və bu atomlararası fəzada elektron buludunun sıxlığı artır. Axırncısı isə mübadilə enerjisi hesabına elektronların hərəkətində spinlərin korrelyasiyası nəticəsi olur.

Kvant mexanikasının prinsipləri əsasında yalnız heteropolyar rabitəni yox, homeopolyar rabitənin də nəzəri əsaslarını vermək mümkün olmuşdur. Bu, ilk dəfə H_2 hidrogen molekulu timsalında Haytler-Londona müyəssər olmuşdur (bax: §94). Haytler-London nəzəriyyəsi müasir *kovalent* (homeopolyar) rabitənin əsasını təşkil edir. Bu nəzəriyyəyə görə hidrogen molekulu yalnız valent elektronların spinlərinin bir-birini kompensasiya etməsi nəticəsində yaranır, yəni molekulda elektron sisteminin tam spini sifra bərabər $S = S_1 + S_2 = 0$ olur və hidrogen molekulu $^1\Sigma_g^+$ halında yaranır.

Hidrogen molekulu üçün alınmış nəticəni ümumiləşdirərək iddia etmək olar ki, istənilən sistemdə kovalent rabitə valent elektronların spinlərinin kompensasiyası nəticəsində yaranır. Bu səbədən kovalent rabitə bəzən *spin-rabitə* də adlanır.

Buradan bir nəticə olaraq çıxır ki, kimyəvi birləşmələrdə hər bir kimyəvi rabitə spinləri antiparalel olan və aralarında mübadilə qüvvələri (mübadilə enerjisi) təsir edən bir cüt elektronun vahid sistemdə birləşməsi (çütləşməsi) nəticəsidir.

Elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsirin mübadilə xarakterli olması nəticəsində kimyəvi rabitənin gücü elektronların dalğa funksiyalarının örtmə dərəcəsindən asılı (bax: §94) olur. Ona görə də kimyəvi qüvvələr atomlar arasındakı məsafə artdıqca kəskin zəifləyir.

Atomların kimyəvi xassələrini onların dolmamış xarici elektron örtüklərindəki çütləşməmiş (неиспаренный) elektronlar təyin edir. Atomun valentliyi belə çütləşməmiş elektronların sayı ilə təyin olunur. Başqa sözlə, atomun kimyəvi valenliyinin ədədi qiyməti onun spininin iki mislinə bərabərdir.

Homeopolyar birləşmə yarananda valent elektronlar hər iki atoma eyni dərəcədə aid olan bir sistemdə birləşir və atomların xarici dolmamış örtükləri dolmağa çalışır. Başqa sözlə, elektronlar elə çütləşir ki, onların spinləri qarşılıqlı kompensasiya etsin və molekulun tam spini sifra bərabər olsun. Əsas halda tam spini sifra bərabər olan molekul daha dayanıqlı olur. Lakin bu iddiadan kənar çıxımlar da müşahidə olunur. Məsələn, O_2

molekulunun əsas halı $^3\Sigma_1(S=1)$, NO molekulunun əsas halı $^2\Pi_1(S=1/2)$ və i.a. olur.

Atomların dolmuş təbəqə və örtükləri arasında həmişə itələmə qüvvələri meydana çıxır. Bu faktın ion (heteropolyar) rabitə üçün mühüm əhəmiyyəti vardır.

Bildiyimiz kimi, ion rabitə zamanı atomlardan biri elektronunu (və ya bir neçə elektronunu) digər atoma verərək müsbət, elektronu alan atom isə mənfi iona çevrilir. Bu zaman hər iki atomun xarici təbəqə və ya örtükləri dolur. Atomlar molekulun tərkibinə müsbət və mənfi ionlar kimi daxil olduğundan, onlar arasında Kulon qarşılıqlı cəzibə qüvvələri təsir edir. Lakin ionlar bir-birinə yaxınlaşdıqda kiçik məsafələrdə, dolmuş elektron təbəqələri (örtükləri) hesabına onlar arasında itələmə qüvvələri meydana çıxır və bu iki qüvvənin təsiri nəticəsində molekulun dayanıqlığı təmin olunur.

Beləliklə, atomlar kovalent rabitə nəticəsində o vaxt molekul yarada bilər ki, atomlardan birinin müəyyən istiqamətdə yönəlmiş elektronu, digər atomun spini birincinin əksinə yönəlmiş elektronla mübadilədə iştirak etsin.

Yuxarıda qeyd etdik ki, kimyəvi rabitə doyma xarakterlidir, yəni hər bir atom sonlu sayda digər atomları özünə birləşdirə bilər. Bu onunla əlaqədardır ki, atomun xarici təbəqəsində elektronların sayı məhduddur. Onlardan bir qismi bir-birilə rabitədə olur. Eyni bir kvant halında olan iki elektronun spinləri bir-birinin əksinə yönəlmiş olur və onlar kimyəvi rabitədə iştirak etmir. Kimyəvi rabitə xarici təbəqədə çütləşməmiş elektronların varlığı nəticəsində meydana çıxır. Hər bir atom xarici təbəqədə spinləri sərbəst yönəlmiş elektronların sayı qədər kovalent rabitədə iştirak edə bilər. Bununla da atomun bir, iki və i.a. valentli olması müəyyən olunur.

Qeyd edək ki, eyni bir atom müxtəlif valentliyə malik ola bilər. Bu, onun hansı (əsas və ya həyəcanlanmış) halda olmasından asılıdır.

Bu baxımdan dövrü sistemin müxtəlif qruplarında elementlərin hansı valentliyə malik ola biləcəyi haqqında qısa məlumat verək.

Birinci qrup elementləri atomlarının xarici örtüyünün elektron quruluşu (konfigurasiyası) $1s$ -dir. Atomun bu halda spini $1/2$ -ə bərabərdir (daxili örtüklərdə spinlər qarşılıqlı kompensasiya edilmiş olur). Birinci qrupun elementləri kimyəvi reaksiyalarda, demək olar ki, həmişə birvalentli olur. Onların reaksiyalarda vahiddən böyük valentlikdə iştirak etməsi üçün qapalı örtükdəki elektronlardan birini daha yuxarıda yerləşən örtüyə (səviyyəyə) keçirmək lazımdır. Bu qrup elementlərin belə, ən yaxın örtüyü xeyli uzaqda (enerji vahidlərində) yerləşdiyinə görə həyəcanlanmış atom dayanıqlı molekul yarada bilmir.

İkinci qrup elementlərin atomlarının xarici örtüyünün elektron quruluşu $2s$ -dir. Onların əsas halda spini sıfır ($s=0$) bərabərdir və adi şəraitdə kimyəvi reaksiyalarda iştirak edə bilmir. Lakin bu qrupun atomlarında elek-

tron quruluşu $1s^1p$ olan dolmamış örtük $2s$ örtüyünə kifayət qədər yaxın yerləşdiyindən belə halda olan atomların spini vahidə ($s=1$), valentliyi isə ikiyə bərabər olur və onlar kimyəvi reaksiyalarda elə bu valentliyi nümayiş etdirir.

Üçüncü qrup elementlərin atomlarının xarici örtüyünün elektron quruluşu $2s^1p$ -dir. Atomlarının əsas halda spini $1/2$, valentliyi vahidə bərabər olur. Lakin dolmuş $2s$ örtüyündən elektronu ona kifayət qədər yaxın yerləşən $1s^2p$ örtüyünə keçirməklə atomu asanlıqla həyəcanlandırmaq olur. Bu örtükdə atomun spini $3/2$, valentliyi isə 3-dür. Ona görə də atomlar kimyəvi reaksiyalarda bir və üç valentlə iştirak edir. Bunu da qeyd etmək ki, atomun sıra sayı böyükcə, onların bir valentliyi daha güclü bürüzə verir.

Dördüncü qrup elementlərin atomlarının xarici örtüyünün elektron quruluşu $2s^2p$, spini vahidə bərabərdir. Buna yaxın həyəcanlanmış halın quruluşu isə $1s^3p$ -dür. Bu halın spini 2-yə bərabərdir. Bu qrup elementlərin atomları ya 2, və ya 4 valentli olur. Üçüncü qrupda olduğu kimi, qrupun başlanğıc elementlərinin valentliyi 4, sıra sayı artdıqca iki valentlilik daha ehtimallı olur.

Beşinci qrup elementlərin atomlarının xarici örtüyünün elektron konfigurasiyası $2s^3p$, spini $3/2$, valentliyi 3-ə bərabərdir. Buna yaxın həyəcanlanmış hal sonra gələn təbəqədə yerləşdiyindən aralarındakı enerji fərqi böyükdür. Lakin atomu sonra gələn s -örtüyünə qədər həyəcanlandırsaq, örtüyün elektron konfigurasiyası $1s^3p^1s$ spini $5/2$, valentliyi 5 olur. Təcrübə göstərir ki, bu qrupun atomları belə həyəcanlanmış halda da dayanıqlı birləşmə yarada bilər. Beləliklə, bu qrupun elementləri 3 və 5 valentli olur.

Altıncı qrup elementlərin atomlarının əsas halı $2s^4p$ -dür. p -örtüyündəki iki elektronun spinləri bir-birini kompensasiya etdiyindən, atomların əsas halda spini 1, valentliyi 2-yə bərabərdir. Bir dəfə p -örtükdən, ikinci dəfə isə s -örtükdən bir elektron, sonrakı təbəqənin s və p -örtüyünə keçirilsə, atom $2s^3p^1s$ və $1s^3p^1s^1p$ kimi iki müxtəlif həyəcanlanmış hal kəsb edə bilər. Bu hallarda atom 4 və 6 valentli olur. Bu qrupda iki valentli oksigendən başqa qalan atomlar yüksək valentə malik ola bilər.

Yeddinci qrup elementlərin atomlarının xarici örtüyünün elektron quruluşu $2s^5p$, spini $1/2$, valentliyi vahiddir (p -səviyyəsində dörd elektronun spinləri ikişər kompensasiya olunur.). Lakin bu qrupun elementləri spinləri $3/2$, $5/2$, $7/2$, valentliyi 3, 5, 7 olan uyğun $2s^4p^1s$, $2s^4p^1s^1p$ və $1s^3p^1s^2p$ həyəcanlanmış hallarda olduqda da dayanıqlı birləşmələr yarada bilər. Qrupun birinci elementi olan bir valentli ftordan başqa digər elementlərin atom-

ları yüksək valentliyə malik ola bilər.

Nəhayət xarici s və p örtükləri dolmuş səkkizinci qrup elementlərin atomlarının əsas halı $^2s^6p$, spin $s=0$ və valentliyi sıfırdır. Sonrakı təbəqə xeyli uzaqda yerləşdiyindən atomun yuxarıdakı təbəqədəki örtüyə keçid ehtimalı sıfırdır. Bu qrupun atomları kimyəvi reaksiyalarda iştirak etmir və qrup elementləri təsirsiz qazlar təşkil edir.

Atomlar molekül əmələ gətirəndə onların dolmuş örtüklərinin elektron sıxlığı dəyişmiş, dolmamış örtüklərin elektron sıxlığı isə kəskin dəyişikliyə uğrayır. Heteropolyar rabitədə valent elektronların hamısı bir atomdan digərinə keçir və molekül valent elektronların sayına bərabər elektrik yükünə malik müsbət və mənfi ionlardan təşkil olunur. Birinci qrupun elementlərinin valentliyi müsbətdir (onlar elektronu özlərindən digər atoma verir). Qrupdan-qrupa keçdikcə atomların müsbət valentliyi zəifləyir, mənfi valentliyi (elektronu qəbul etmək) güclənir. Yeddinci qrup elementlərinə isə mənfi valentlik daha çox xasdır.

Homeopolyar rabitədə molekül təşkil edən atomların valent elektronları atomlararası fəzada ən çox elektron sıxlığı yaratmaqla hər iki atoma aid olur və neytral atomlar şəklində molekulda birləşir.

§99. Van-der-Vaals qüvvələri

Kimyəvi rabitəni yaradan və təsir radiusu 1 \AA tərtibində olan qüvvələrdən başqa neytral atomlar və molekul arasında nisbətən böyük məsafələrdə yeni təbiətli xüsusi qüvvələr də təsir edir. Bu qüvvələr *Van-der-Vaals qüvvələri* adlanır.

Onlar, məsələn təsirsiz qazların atomları arasında qarşılıqlı təsiri, onların bərk və maye halına keçməsinə təmin edir; bərk cisimlərin səthində molekulaların adsorbsiyasına, diqqətlə cilalanmış səthli iki cismi çox kiçik məsafəyə qədər yaxınlaşdıqda onların yapışmasına səbəb olur və i.a.

Bu qüvvələrin təbiətini aşkarlamaq üçün bir-birindən kimyəvi rabitə qüvvələrini təsir radiusuna nisbətən böyük məsafədə yerləşmiş iki neytral atoma baxaq. Neytral atomda elektrik yükünün orta hesabla sferik-simmetrik paylandığını qəbul edək. Belə atom orta dipol momentinə malik olmur. Lakin, ən sadə hidrogen atomu üçün \vec{d} dipol momenti operatorunun ixtiyari hala uyğun \vec{d}_{mn} matrisa elementini hesablasaq, qeyri-diaqonal elementlərin sıfırdan fərqli (\vec{d}_{mn} -diaqonal elementləri yəqin ki, sıfır olar) olduğunu görürük. Bu faktı əyani olaraq, atomda elektronların kvant-mexaniki hərəkəti zamanı dipol momentinin ani yaranıb-itməsi nəticəsində onun orta qiymətinin sıfıra bərabər olması kimi başa düşmək olar. Başqa sözlə, elektronların kvant-mexaniki hərəkəti dipol momentinin ani yaran-

masına və bu səbəbdən də iki atom arasında dipol qarşılıqlı təsirin meydana çıxmasına səbəb olur.

Bu qarşılıqlı təsir enerjisi kvant mexanikasında həyəcanlanma nəzəriyyəsi vasitəsi ilə hesablanı bilər. Doğrudan da, həyəcanlanma operatoru olaraq iki dipolun qarşılıqlı təsir operatoru

$$\check{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, R) = \frac{1}{R^3} \left(\check{d}_1, \check{d}_2 - \frac{(\check{d}_1 \vec{R})(\check{d}_2 \vec{R})}{R^2} \right)$$

götürək, burada $\vec{d}_1 = -e\vec{r}_1$, $\vec{d}_2 = -e\vec{r}_2$ – elektronların dipol momentləri, \vec{r}_1 və \vec{r}_2 – elektronların uyğun atomların mərkəzindən olan məsafəsi \vec{R} – nüvələrarası məsafədir. Həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasında baxılan həyəcanlanmaya uyğun enerji

$$E^{(1)} = V_{n_1 n_2, n_1 n_2} = \frac{e^2}{R^3} \int \Psi_{n_1 n_2}^{o*} \left[\vec{r}_1 \vec{r}_2 - \frac{(\vec{r}_1 \vec{R})(\vec{r}_2 \vec{R})}{R^2} \right] \Psi_{n_1 n_2}^o dV_1 dV_2$$

olar. Burada $\Psi_{n_1 n_2}^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ – dalğa funksiyasının

$$\Psi_{n_1 n_2}^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_{n_1}^o(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}^o(\vec{r}_2)$$

ifadəsini nəzərə alsaq,

$$\int \Psi_{n_1}^{o*}(\vec{r}_1) \vec{r}_1 \Psi_{n_1}(\vec{r}_1) dV_1 = \int \Psi_{n_2}^*(\vec{r}_2) \vec{r}_2 \Psi_{n_2}(\vec{r}_2) dV_2 = 0$$

və buradan da

$$E^{(1)} = 0$$

alınır.

Həyəcanlanma nəzəriyyəsinin ikinci yaxınlaşmasında bu təsire uyğun enerji

$$E^{(2)} = \frac{e^4}{R^6} \sum_{n_1' n_2'} \frac{1}{E_{n_1 n_2} - E_{n_1' n_2'}} \left\{ \int \Psi_{n_1' n_2'}^{o*} \left[\vec{r}_1 \vec{r}_2 - \frac{(\vec{r}_1 \vec{R})(\vec{r}_2 \vec{R})}{R^2} \right] \Psi_{n_1 n_2}^o \right\}^2 dV_1 dV_2$$

olar. Burada cəm bütün həyəcanlanmış hallar üzrə gedir, n_1, n_2, n'_1, n'_2 – uyğun halların kvant ədədlər toplusunu göstərir.

Sistemin əsas halının enerjisini $E_{n_1 n_2}^o$ qəbul etsək, ona ikinci tərtib əlavə həmişə mənfi olur (bax: §46). İntegrallama və cəmləmə əməliyyatları aparıldıqdan sonra alınan sabiti C ilə işarə etsək,

$$E^{(2)} = -\frac{C}{R^6}$$

olar. Alınmış ifadə Van-der-Vaals qarşılıqlı təsir qanununu ifadə edir. Bu ifadə atomların təbiətindən asılı olmayaraq bütün atomlar (və eləcə də molekullar) arasında meydana çıxan cazibə qüvvələrinin potensial enerjisini ifadə edir. Qüvvələrin özləri isə atomlararası məsafənin

$$F = -\frac{\partial E^{(2)}(R)}{\partial R} \sim \frac{1}{R^7}$$

qanunu ilə azalır.

Yuxarıdakı hesablamalardan çıxır ki, bu qüvvələr də kvant təbiətlidir. Klassik nəzəriyyə baxımından onlar başa düşülmür, çünki atomlar orta dipol momentinə malik deyildir.

Sistemi təşkil edən atomlar s halında olmazsa, onlar ani kvadrupol momentinə də malik ola bilər. Van-der-Vaals dipol qarşılıqlı təsirdən əlavə atomlar arasında $\frac{1}{R^5}$ ilə mütənasib olan kvadrupol qarşılıqlı təsir də meydana çıxır. Atomlar haqqında söylənilən fikirlər molekullar üçün də təxmini doğru hesab edilə bilər.

ӘДӘБИҮАТ

1. *Блохинцев Д.И.* Основы квантовой механики. "Высшая школа", Москва, 1961.
2. *Соколов А.А., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М.* Квантовая механика. "Наука", Москва, 1962.
3. *Соколов А.А., Тернов И.М., Жуковский В.Ч.* Квантовая механика. "Наука", Москва, 1979.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. "Наука", Москва, 1974.
5. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Курс теоретической физики. Квантовая механика. Книга 2, "Наука", Москва, 1972.
6. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. "Наука", Москва, 1972.
7. *Балашов В.В., Долина В.К.* Курс квантовой механики. Изд.-во Московского Университета, 1982.
8. *Елютин Н.В., Кривченко В.Д.* Квантовая механика. "Наука", Москва, 1976.
9. *Федорченко А.М.* Основы квантовой механики. "Высшая школа", Киев, 1979.
10. *Соколов А.А., Тернов И.М.* Квантовая механика и атомная физика. "Просвещение", Москва, 1970.
11. *Френкель Я.И.* Волновая механика. Часть вторая, ГТТИ, Ленинград, Москва, 1934.
12. *Альберт-Мессиа.* Квантовая механика, том 1, "Наука", Москва, 1978.
13. *Альберт-Мессиа.* Квантовая механика, том 2, "Наука", Москва, 1979.
14. *Дирак Д.П.* Принципы квантовой механики. "Наука", Москва, 1979.
15. *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Госизд. физмат литературы, Москва, 1960.
16. *Джавадов А.* Квантовая механика (на азербайджанском языке). Баку, "Маариф", 1975.
17. *Савельев И.В.* Основы теоретической физики. Том 2, "Наука", Москва, 1977.
18. *Энрико Ферми.* Квантовая механика. "Мир", Москва, 1965.
19. *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. "Мир", Москва, 1968.
20. *Паули В.* Общие принципы волновой механики. Гостехиздат, Москва, 1947.
21. *Бете Г.* Квантовая механика. "Мир", Москва, 1965.
22. *Зоммерфельд А.* Волновая механика. Гос. Технико-Теоретическое изд., Ленинград, 1933, Москва.
23. *Бом Д.* Квантовая теория. Физматгиз, Москва, 1961.
24. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике, том 1 и 2, "Мир", Москва, 1974.
25. *Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А.* Курс теоретической физики, том 2, Физматгиз, Москва, 1962.
26. *Мултановский В.В., Васильевский А.С.* Курс теоретической физики. Квантовая механика. "Просвещение", Москва, 1991.
27. Проблемы теоретической физики. Том 1, изд. Ленинградского Университета, 1974.
28. *Эффект Мессбауэра.* Сборник статей. Изд.-во иностранной литературы. Москва, 1962.
29. *Бете Г.* Квантовая механика простейших систем. Л.М.ОНТИ, 1935.

MÜNDƏRİCAT

Ön söz	3
--------------	---

I HİSSƏ. QEYRİ-RELYATİVİSTİK KVANT MEXANİKASI

I fəsil. Kvant mexanikasına giriş

§1. Kvant mexanikasının meydana çıxma səbəbləri	5
§2. De-Broyl dalğaları və onların faza və qrup sürətləri	11
§3. Mikrozməciklərin (de-Broyl dalğalarının) difraksiyası	15

II fəsil. Kvant mexanikasının riyazi əsasları

§4. Dalğa funksiyası və onun fiziki mahiyyəti	19
§5. Superpozisiya prinsipi	23
§6. Operatorlar və onların əsas xassələri	27
a) Operator anlayışı.....	27
b) Kvant mexanikasında istifadə olunan operator.....	31
§7. Operatorlar üzərində əməliyyatlar	34
a) Xətti operatorların toplanması.....	34
b) Xətti operatorların vurulması	36
§8. Ermit operatorların məxsusi funksiyaları və onların xassələri	41
§9. Hamilton operatoru	47
§10. Fiziki kəmiyyətin orta qiymətinin zamana görə törəməsi	52
§11. Koordinat və impuls operatorları, onların məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları	55
A) Koordinat təsviri (x-təsviri).....	56
a) Koordinat operatoru, onun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları	56
b) İmpuls operatoru, onun məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları	58
B) İmpuls təsviri (p-təsviri).....	64
c) Koordinat və impuls operatorları arasında kommutativ münasibətlər	66
§12. Enerji və zaman operatorları, onların məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları	67
§13. Hərəkət miqdarı momenti operatoru və onun xassələri	70
§14. \vec{L}^2 və \vec{L}_z operatorlarının məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları	76
§15. Cütlük. Halın cütlüyü	87
§16. Qeyri-müəyyənlik münasibəti (prinsipi)	91
§17. Müxtəlif sahələrdəki hərəkət üçün Şredinger tənliyi	95
§18. Stasionar hallar	102
§19. Kvant tənliklərindən klassik tənliklərə keçid	108

III fəsil. Təsvir nəzəriyyəsi elementləri

§20. Dalğa funksiyası müxtəlif təsvirlərdə	115
§21. Operatorlar müxtəlif təsvirlərdə	120
§22. Matrisalar üzərində əməliyyatlar	128
a) Matrisaların toplanması	128

b) Matrisaların vurulması.....	129
§23. Unitar çevrilmələrin elementar nəzəriyyəsi	137
§24. Matrisa şəklində verilmiş operatorların məxsusi qiymətləri, məxsusi funksiyaları və fiziki kəmiyyətlərin orta qiyməti.....	144
§25. Şredinger, Heyzenberq və qarşılıqlı təsir (Dirak) təsvirləri.....	148
a) Şredinger təsviri.....	149
b) Heyzenberq təsviri.....	151
c) Qarşılıqlı təsir təsviri.....	153
§26. Sıxlıq matrisası, sistemin halının sıxlıq matrisası ilə təsviri.....	156
§27. Sıxlıq matrisasının ödədiyi tənlik və onun müxtəlif təsvirləri	164
§28. Sıxlıq matrisası üçün Şredinger, Heyzenberq və qarşılıqlı təsir təsvirləri.....	167
§29. Ket- və bra-vektorlar	169

II HİSSƏ. QEYRİ-RELYATİVİSTİK KVANT MEXANİKASININ BƏZİ TƏTBİQLƏRİ

IV fəsil. Birölçülü hərəkətlərin tədqiqi

§30. Zərrəciyin potensial çəpərdən keçməsi	173
a) Potensial divar	175
b) Düzbucaqlı potensial çəpər	179
§31. Düzbucaqlı potensial çuxurda zərrəciyin hərəkəti	184
§32. Kvaziklassik yaxınlaşma metodu	189
§33. İxtiyari şəkilli potenseal çəpərdən zərrəciyin keçməsi (tunel effekti)	198
§34. Soyuq emissiya	201
§35. Xətti harmonik ossilyator (koordinant təsvirində)	206
§36. Ritsin variasiya metodu	221
§37. Harmonik ossilyator enerji təsvirində	230
§38. Xətti harmonik ossilyator N-təsvirində	234

V fəsil. Üçölçülü fəzada hərəkət

§39. Sferik simmetrik (mərkəzi) sahədə hərəkət	242
§40. Kulon sahəsində hərəkət	249
a) $E < 0$ halında təhlili	252
b) Rotator	263
c) Radial və bucaq paylanma funksiyaları	265
q) $E > 0$ halının təhlili.....	268
§41. Hidrogenəbənzər atomların şüalanma (udulma) spektirləri və Seçmə qaydası	271
a) Seçmə qaydası	271
b) Şüalanma (şüaudma) spektrləri	275
§42. Atomun maqnit momenti	280
§43. Sferik simmetrik potensial çuxurda zərrəciyin hərəkəti (üçölçülü izotrop harmonik ossilyator).....	283
§44. Periodik sahədə hərəkət	289
§45. Yüklü zərrəciyin bircins elektrik sahəsində hərəkəti	297

VI fəsil. Həyəcanlanma nəzəriyyəsi və onun bəzi tətbiiqləri

§46. Stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsi	301
a) stasionar hallar cırlaşmamış olduqda	302
b) stasionar hallar cırlaşmış olduqda	309
§47. Qeyri-stasionar həyəcanlanma nəzəriyyəsi (kvant keçidləri nəzəriyyəsi).....	312

§48. Anharmonik ossilyator.....	318
§49. Ştark effekti.....	324
§50. Şüalanma nəzəriyyəsi	331
a) Eynşteyn əmsalları.....	331
b) Sərbəst elektromaqnit sahəsi.....	335
c) Şüalanmanın yarım klassik nəzəriyyəsi.....	337
ç) İkinci kvantlanma metodu	345
d) Şüalanmanın kvant nəzəriyyəsi.....	354
e) Dipol, maqnit-dipol və kvadrupol spontan şüalanması.....	360
§51. Dipol, maqnit-dipol və kvadrupol şüalanması üçün seçmə qaydaları.....	364
§51a. Messbauer effekti	367

VII fəsil. Səpilmənin kvant nəzəriyyəsi

§52. Səpilmənin effektiv kəsiyi	370
§53. Səpilmə amplitudu	372
§54. Elastik səpilmə	377
§55. Parsial dalğalar metodu. Parsial effektiv kəsik	381
§56. Qeyri-elastik səpilmə	389
§57. Fotoeffekt	392
§58. Kompton effekt	400
§59. Dispersiyanın kvant nəzəriyyəsi.....	406

III HİSSƏ. RELYATİVİSTİK KVANT MEXANİKASI

VIII fəsil. Dirak nəzəriyyəsi

§60. Şredinger nəzəriyyəsinin çətinlikləri	420
§61. Pauli tənliyi	423
§62. Kleyn-Qordon-Fok tənliyi	430
§63. Spini sıfır olan elektronun nüvə sahəsindəki hərəkəti	438
§64. Dirak tənliyi	443
§65. Dirak tənliyinin kovariant şəkli	447
§66. Kəsilməzlik tənliyi. Ehtimal sıxlığı və ehtimal cərəyanı sıxlığı	450
§67. Dirak nəzəriyyəsində spin problemi	452
§68. Dirak matrisalarının tenzor ölçüsü və fiziki mahiyyəti.....	454
§69. Zərrəciyin sərbəst hərəkəti üçün Dirak tənliyinin həlli	460
§70. Dirak nəzəriyyəsində mənfi tam enerjili hallar. Pozitron (antizərrəcik).....	467
§71. Tam moment operatoru və onun xassələri	470
§72. \vec{J}^2 və \vec{J}_z operatorlarının məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları	472
§73. Hərəkət miqdarı momentlərinin vektoru toplanması	481
§74. Dirak tənliyinin müxtəlif yaxınlaşmaları	487
§75. Relyativistik elektronun ($v < c$) nüvənin Kulon sahəsində hərəkəti	494
a) Relyativistik düzəliş	496
b) Spin-orbital qarşılıqlı təsirə uyğun düzəliş.....	497
v) Kontakt qarşılıqlı təsirə uyğun düzəliş.....	498
q) Spekrin incə quruluşu.....	500
ğ) İfrat incə quruluş	503

IX fəsil. Maqnit və elektrik sahələrində hərəkət

§76. Elektronun biricins maqnit sahəsində hərəkəti	507
§77. Normal Zeyeman effekti	510

+ §78.	Anomal Zeyeman effekti	516
§79.	Paşen-Bak effekti	523
+ §80.	Lemb sürüşməsi	523

IV HİSSƏ. ÇOXSAYLI ZƏRRƏCİKLƏRDƏN İBARƏT SİSTEMLƏR

X fəsil. Eyni zərrəciklərdən ibarət sistemlər

§81.	Eyni zərrəciklər üçün seçilməzlik prinsipi	531
§82.	İki eyni fermiondan ibarət sistemin dalğa funksiyası	539
§83.	Helium atomunun qeyri-relyativistik kvant nəzəriyyəsi	545
§84.	Helium atomunun əsas halı	556
§85.	Helium atomunun həyəcanlanmış halları	561
§86.	Xartri-Fok metodu. Özünə uzlaşan sahə metodu	567
§87.	Mübadilə enerjisi	576
§88.	Mürəkkəb atomların elektron quruluşu	579
§89.	Bir optik elektronlu atomların kvant nəzəriyyəsi	586
§90.	Atomların rentgen spektirləri (xarakteristik spektirlər)	596
§91.	Kimyəvi elementlərin dövrü (Mendelejev) sistemi	600
§92.	Statistik Tomas-Fermi metodu	607

XI fəsil. Molekulların kvant nəzəriyyəsi

§93.	Adiabatik yaxınlaşma metodu	616
§94.	Hidrogen molekulunun kvant nəzəriyyəsi	621
§95.	Nüvələrarası məsafə sabit qaldıqda molekulun elektron hallarının təsnifi	633
§96.	İkiatomlu molekulun rəqsi və fırlanma hərəkətlərinin enerji spektrləri	635
§97.	İkiatomlu molekulun şüallanma spektrləri	640
§98.	Kimyəvi rabitə (valentlik)	645
§99.	Van-der-Vaals qüvvələri	649
Ədəbiyyat		652

Çapa imzalanmışdır: 29.05.2007.
Formatı 60x84 1/16. Sifariş №91
Həcmi 41 ç.v. Sayı 350.

Bakı Universiteti nəşriyyatı,
Bakı ş., AZ 1148, Z.Xəlilov küçəsi, 23.