Д. И. МЕНДЕЛЕЈЕВИН ЕЛЕМЕНТЛӘРИН ДӨВРИ СИСТЕМИ

Дөврләр	ГРУПЛАР I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII		
1	H 1 1,0079 $1s^1$ ҺИДРОҜЕН						(H)			He 2 4,00260 $1s^2$ ҺЕЛИУМ
2	Li 3 6,94 $2s^1$ ЛИТИУМ	Be 4 9,01218 $2s^2$ БЕРИЛЛИУМ	B 5 10,81 $2p^1$ БОР	C 6 12,011 $2p^2$ КАРБОН	N 7 14,0067 $2p^3$ [illegible]	O 8 15,999 $2p^4$ ОКСИҜЕН	F 9 18,998403 $2p^5$ ФЛУОР			Ne 10 20,179 $2p^6$ НЕОН
3	Na 11 22,98977 $3s^1$ НАТРИУМ	Mg 12 24,305 $3s^2$ МАГНЕЗИУМ	Al 13 26,98154 $3p^1$ АЛУМИНИУМ	Si 14 28,085… $3p^2$ СИЛИСИУМ	P 15 30,9… $3p^3$ ФОСФОР	S 16 32,06 $3p^4$ КҮКҮРД	Cl 17 35,453 $3p^5$ ХЛОР			Ar 18 39,948 $3p^6$ АРҜОН
4	K 19 39,098 $4s^1$ КАЛИУМ	Ca 20 40,08 $4s^2$ КАЛСИУМ	Sc 21 44,9559 $3d^14s^2$ СКАНДИУМ	Ti 22 47,90 $3d^24s^2$ ТИТАН	V 23 50,9415 $3d^34s^2$ ВАНАДИУМ	Cr 24 51,996 $3d^54s^1$ ХРОМ	Mn 25 54,9380 $3d^54s^2$ МАНГАН	Fe 26 55,847 $3d^64s^2$ ДӘМИР	Co 27 58,9332 $3d^74s^2$ КОБАЛТ	Ni 28 58,70 $3d^84s^2$ НИКЕЛ
	Cu 29 63,54 $3d^{10}4s^1$ МИС	Zn 30 65,38 $4s^2$ СИНК	Ga 31 69,72 $4p^1$ ГАЛЛИУМ	Ge 32 72,59 $4p^2$ ҜЕРМАНИУМ	As 33 … $4p^3$ АРС…	Se 34 78,96 $4p^4$ СЕЛЕН	Br 35 79,904 $4p^5$ БРОМ			Kr 36 83,80 $4p^6$ КРИПТОН
5	Rb 37 85,467 $5s^1$ РУБИДИУМ	Sr 38 87,62 $5s^2$ СТРОНСИУМ	Y 39 88,9059 $4d^15s^2$ ИТТРИУМ	Zr 40 91,22 $4d^25s^2$ СИРКОНИУМ	Nb 41 92,9064 $4d^4$… НИОБИУМ	Mo 42 95,94 $4d^55s^1$ МОЛИБДЕН	Tc 43 98,9062 $4d^55s^2$ ТЕХНЕСИУМ	Ru 44 101,07 $4d^75s^1$ РУТЕНИУМ	Rh 45 102,9055 $4d^85s^1$ РОДИУМ	Pd 46 106,4 $4d^{10}5s^0$ ПАЛЛАДИУМ
	Ag 47 107,868 $5s^1$ КҮМҮШ	Cd 48 112,41 $5s^2$ КАДМИУМ	In 49 114,82 $5p^1$ ИНДИУМ	Sn 50 118,69 $5p^2$ ГАЛАЈ	Sb 51 … $5p^3$ СТИБИУМ	Te 52 127,6 $5p^4$ ТЕЛЛУР	I 53 126,9045 $5p^5$ ЈОД			Xe 54 131,30 $5p^6$ КСЕНОН
6	Cs 55 132,9054 $6s^1$ СЕЗИУМ	Ba 56 137,33 $6s^2$ БАРИУМ	La-Lu 57–71 ★	Hf 72 178,49 $5d^26s^2$ ҺАФНИУМ	Ta 73 180,9479 $5d^3$… ТАНТАЛ	W 74 183,85 $5d^46s^2$ ВОЛФРАМ	Re 75 186,207 $5d^56s^2$ РЕНИУМ	Os 76 190,2 $5d^66s^2$ ОСМИУМ	Ir 77 192,22 $5d^76s^2$ ИРИДИУМ	Pt 78 195,09 $5d^96s^1$ ПЛАТИН
	Au 79 196,9665 $5d^{10}6s^1$ ГЫЗЫЛ	Hg 80 200,59 $6s^2$ ҸИВӘ	Tl 81 204,37 $6p^1$ ТАЛЛИУМ	Pb 82 207,2 $6p^2$ ГУРҒУШУН	Bi 83 208,9… $6p^3$ ВИСМ…	Po 84 [209] $6p^4$ ПОЛОНИУМ	At 85 [210] $6p^5$ АСТАТ			Rn 86 [222] $6p^6$ РАДОН
7	Fr 87 [223] $7s^1$ ФРАНСИУМ	Ra 88 226,0254 $7s^2$ РАДИУМ	Ac-(Lr) 89–103 ★★	Ku 104 [261] $6d^27s^2$ КУРЧАТОВИУМ	(Ns) 105 [261] $6d^37s^2$ (НИЛСБОРИУМ)					

★ ЛАНТАНОИДЛӘР

La 57 138,9055 $5d^16s^2$ ЛАНТАН	Ce 58 140,12 $4f^26s^2$ СЕРИУМ	Pr 59 140,9077 $4f^36s^2$ ПРАЗЕОДИУМ	Nd 60 144,24 $4f^46s^2$ НЕОДИУМ	Pm 61 [145] $4f^56s^2$ ПРОМЕТИУМ	Sm 62 150,4 $4f^66s^2$ САМАРИУМ	Eu 63 151,96 $4f^76s^2$ ЕВРОПИУМ	Gd 64 157,25 $4f^75d^16s^2$ ГАДОЛИНИУМ
Tb 65 158,9254 $4f^96s^2$ ТЕРБИУМ	Dy 66 162,50 $4f^{10}6s^2$ ДИСПРОЗИУМ	Ho 67 164,9304 $4f^{11}6s^2$ ҺОЛМИУМ	Er 68 167,26 $4f^{12}6s^2$ ЕРБИУМ	Tm 69 168,9342 $4f^{13}6s^2$ ТУЛИУМ	Yb 70 173,04 $4f^{14}6s^2$ ИТТЕРБИУМ	Lu 71 174,967 $5d^16s^2$ ЛУТЕСИУМ	

★★ АКТИНОИДЛӘР

Ac 89 [227] $6d^17s^2$ АКТИНИУМ	Th 90 232,0381 $6d^27s^2$ ТОРИУМ	Pa 91 231,0359 $5f^26d^17s^2$ ПРОТАКТИНИУМ	U 92 238,029 $5f^36d^17s^2$ УРАН	Np 93 237,0482 $5f^46d^17s^2$ НЕПТУНИУМ	Pu 94 [244] $5f^67s^2$ ПЛУТОНИУМ	Am 95 [243] $5f^77s^2$ АМЕРИСИУМ	Cm 96 [247] $5f^76d^17s^2$ КУРИУМ
Bk 97 [247] $5f^86d^17s^2$ БЕРКЛИУМ	Cf 98 [251] $5f^{10}7s^2$ КАЛИФОРНИУМ	Es 99 [254] $5f^{11}7s^2$ ЕЈНШТЕЈНИУМ	Fm 100 [257] $5f^{12}7s^2$ ФЕРМИУМ	Md 101 [258] $5f^{13}7s^2$ МЕНДЕЛЕВИУМ	(No) 102 [255] $5f^{14}7s^2$ (НОБЕЛИУМ)	(Lr) 103 [256] $5d^17s^2$ (ЛОУРЕНСИУМ)	

А.И.МУХТАРОВУН "ШӘҺРӘТ" ОРДЕНИ ИЛӘ ТӘЛТИФ ЕДИЛМӘСИ ҺАГГЫНДА

АЗӘРБАЈЧАН РЕСПУБЛИКАСЫ ПРЕЗИДЕНТИНИН ФӘРМАНЫ

Азәрбајчанда елмин вә тәһсилин инкишафындакы хидмәтләринә көрә Абдулла Ибраһим оғлу Мухтаров "Шөһрәт" ордени илә тәлтиф едилсин.

Һејдәр ӘЛИЈЕВ,
Азәрбајчан Республикасынын президенти

Бакы шәһәри, 23 декабр 1998-чи ил

Азәрбајчан Республикасынын көркәмли физики, Азәрбајчанда нәзәри физиканын баниси, нәзәри физика елминин тәдрисиндә вә инкишаф етдирилмәсиндә бөјүк рол ојнамыш профессор, Республика Елмләр Академијасынын мүхбир үзвү, әмәкдар елм хадими Мухтаров АбдуллаИбраһим оғлунун 1998-чи ил декабр ајынын 24-дә 80 јашы тамам олду.

Абдулла мүәллимин дүнја елминә вердији төһфә онун квант електродинамикасынын јаранма дөврүндә тәклиф етдији ријази методдур. Бу метод чох бөјүк нүфуза малик монографијалара дахил едилиб вә квант електродинамикасы үзрә ихтисаслашан мүтәхәссисләрә тәдрис едилир. Методун ән бөјүк үстүнлүјү ондадыр ки, тәбиәтдә вә тәчрүбәдә мүшаһидә олуна билмәјән просесләрин гадаған олунмасыны әввәлчәдән шәрһ етмәјә имкан верир. Абдулла мүәллим бу методун тәтбиги илә бир чох просесләрин тәчрүбәдә мүшаһидә олунмамасыны изаһ етмишдир. Абдулла мүәллим бүтүн бу елми хидмәтләринә көрә «Шөһрәт» ордени илә тәлтиф едилмишдир. О, инди дә 50 ил бундан әввәлки енержи илә елм вә тәдрислә мәшғул олур.

Абдулла Ибраһимоғлуна чан сағлығы вә јени уғурлар арзулајырыг!

С.А.ҺАЧЫЈЕВ
Азәрбајчан Республикасы ЕА-нын мүхбир үзвү, физика-ријазијјат елмләри доктору, профессор.

А.И. МУХТАРОВ

КВАНТ МЕХАНИКАСЫ

АЛИ МӘКТӘБЛӘР ҮЧҮН ДӘРС ВӘСАИТИ

Азәрбајчан Республикасы Тәһсил Назирлији тәрәфиндән тәсдиг едилмишдир.

"МААРИФ" НӘШРИЈЈАТЫ
БАКЫ — 1999

Р ә ' ј в е р ә н л ә р : Азәрбајҹан ЕА-нын академики
Н.А. ГУЛИЈЕВ
Азәрбајҹан ЕА-нын мүхбир үзвү
С.А. ҺАЧЫЈЕВ

Е л м и р е д а к т о р : физика-ријазијјат елмләри доктору,
профессор *Р.Х. МУРАДОВ*

А.И. Мухтаров
Квант механикасы. Али мәктәбләр үчүн дәрс вәсаити. Бакы: "Маариф" нәшријјаты, 1999. — 608 сәһ., шәкилли.

Дәрс вәсаити әсасән республиканын университетләринин физика факүлтәләринин тәләбәләри үчүн "Квант механикасы" фәнни үзрә тәклиф олунмуш програма ујғун јазылмышдыр.

$$M\frac{1604030000-11}{M\ 652-99}1999$$

ӨН СӨЗ

Али тәһсил мүәссисәләринин тәләбәләри үчүн тәклиф олунан "Квант механикасы" курсу мүәллифин узун илләр Бакы Дөвләт Университетиндә охудуғу мүһазирәләр әсасында јазылмышдыр.

Квант механикасы мүасир физика, кимја вә биоложи елмләрин әсасыны тәшкил едир. О, елементар зәррәчикләрин, атомларын вә молекулларын мүхтәлиф һәрәкәт формаларынын табе олдуғу ганунаујғунлуглары өјрәнир вә микроаләмдә кедән физики, кимјәви, биоложи вә с. просесләри тәдгиг етмәклә онларын маһијјәтини ајдынлашдырмаг үчүн елми әсас верир.

Тәбиәтдә кедән һәр бир просес вә баш верән һәр бир һадисә елементар зәррәчикләрин, атомларын, молекулларын вә онларын бирләшмәләринин мүхтәлиф һәрәкәт формаларынын тәзаһүрү олдуғундан, микроаләмдә баш верән просесләрин кедишини тәсвир едән ганунаујғунлуглары макросистемләрдә кедән аналожи просесләр үчүн үмумиләшдирмәклә, квант механикасы, ахырынчыларын табе олдуғу ганунаујғунлуглары ашкар етмәјә имкан верир.

Бу бахымдан квант механикасынын әсас ганун вә принсипләрини билмәк тәбиәт елмләри саһәсиндә ишләјән орта вә али мәктәб мүәллимләри вә елми ишчиләри үчүн чох вачибдир. Буну нәзәрә алараг мүәллиф, охучулара тәклиф олунан "Квант механикасы" китабында квант механикасынын әсас ганун вә принсипләрини мүмкүн гәдәр кениш вә садә дилдә шәрһ етмәјә чалышмышдыр.

Китабда гејри-релјативистик вә релјативистик квант механикасынын әсас принсипләри шәрһ олунур вә онларын мүхтәлиф мәсәләләрин һәллинә тәтбиги верилир.

Бурада мүхтәлиф тәбиәтли харичи саһәләрин тә'сиринә мә'руз галмыш бир вә чох зәррәчикли квант системләрин һәрәкәтини өјрәнмәк үчүн истифадә олунан стасионар вә гејри-стасионар һәјәчанланма методу, квази-классик метод, Ритсин вариасија методу, Хартри-Фокун өзүнә узлашан саһә методу, статистик Томас-Ферми методу, адиабатик јахынлашма методу кими тәхмини методлар кениш шәрһ олунур вә онларын бә'зи тәтбигләри верилир.

Гејри-релјативистик нәзәријјәнин әсасыны тәшкил едән Шрединкер тәнлији потенсиал чәпәрдән кечән, потенсиал чухурда, сферик симметрик вә Кулон саһәләриндә һәрәкәт едән зәррәчик вә еләчә дә хәтти вә үчөлчүлү оссилјатор үчүн дәгиг һәлл едилир; шүаланма нәзәријјәси, фото вә Комптон еффектләр, дисперсија, һелиум атому, мүрәккәб (ағыр) атомлар вә ики атомлу молекулун физики хассәләринин тәһлилиндә исә онун һәлли үчүн јухарыда садаладығым тәхмини методлардан истифадә олунур.

Китабда релјативистик квант механикасынын әсасыны тәшкил едән Дирак нәзәријјәсинин мүфәссәл шәрһи верилмишдир. Онун васитәсилә релјативистик електронун нүвә саһәсиндәки һәрәкәти, аномал Зејеман еффекти, Лемб сүрүшмәси кими мәсәләләр әтрафлы шәрһ едилмишдир.

Мүәллиф орта вә али мәктәбләрдә ишләјән мүәллимләрдән, физика, кимја вә биолокија саһәләриндә чалышан елми ишчиләрдән вә китабла марагланан дикәр охучулардан китаб һаггында өз фикирләрини билдирмәји хаһиш едир. Фајдалы тәклифләр миннәтдарлыгла гәбул олуначаг вә кәләчәкдә нәзәрә алыначагдыр.

Китаб нәшрә һазырланаркән өз тәнгиди гејдләри вә фајдалы мәсләһәтләри илә онун кејфијјәтинин јахшылашмасына көмәк етмиш академик Нәриман Гулијевә, Азәрб. ЕА мүхбир үзвү Сабир Һачыјевә, проф. Рәсул Мурадова мүәллиф өз дәрин миннәтдарлыгыны билдирир. Китабын һазырланмасында әмәк сәрф едән Елмира Бағырова тәшәккүр едир.

I һиссә

ГЕЈРИ-РЕЛЈАТИВИСТИК КВАНТ МЕХАНИКАСЫ

I ФӘСИЛ

КВАНТ МЕХАНИКАСЫНА КИРИШ

§ 1. КВАНТ МЕХАНИКАСЫНЫН МЕЈДАНАЧЫХМА СӘБӘБЛӘРИ

Кечән әсрин 80—90-чы илләринә гәдәр тәбиәтдә мүшаһидә олунан физики һадисәләр классик физика адланан Нјутон механикасы вә Максвел електродинамикасы ганунлары әсасында изаһ олунурду. О дөврә көрә бизи әһатә едән аләм madди зәррәчикләрдән (атом вә молекуллардан) тәшкил олунмуш маддәдән вә саһәләрдән (мәсәлән, електромагнит саһәси, гравитасија саһәси вә с.) ибарәтдир.

Классик физика бахымындан madди зәррәчик вә саһә бир-бириндән тәбиәтчә кәскин фәргләнән madди варлыгдыр. Зәррәчик фәзада локализә олунур, саһә исә бу хассәјә малик дејил.

Madди нөгтә кими гәбул едилән зәррәчијин һәрәкәти Нјутон механикасынын ганунларына табедир, онун һалы һәр анда вәзијјәтини тә'јин едән үч координатын вә сүр'әтинин (импулсун) верилмәси илә тапылыр. Зәррәчијин координатларынын вә импулсунун замандан асылылыгынын тапылмасы (бу асылылыг Нјутон вә ја Һамилтон тәнликләринин һәлли илә тапылыр) онун һәрәкәти һаггында там мә'лумат алмаға имкан верир.

Атом вә молекуллардан тәшкил олунмуш макроскопик чисимләрин хассәләри исә атом вә молекулларын һәрәкәт ганунлары илә мүәјјән олунур. Башга сөзлә, макрочисимләрин хассәләрини тапмаг үчүн ону тәшкил едән вә бир-бири илә гаршылыглы тә'сирдә олан атом вә молекулларын һәр бири үчүн Нјутон һәрәкәт тәнлији јазылмалы вә алынан диференсиал тәнликләр системи һәлл едилмәли иди.

Принсипчә ријази јеринә јетирилә билмәјән бу проблем макрочисимләрин хассәләрини өјрәнмәк үчүн статистик методлардан истифадәси илә әвәз олунду. Беләликлә, статистик физика јаранмаға вә инкишаф етмәјә башлады.

Саһәнин тәсвири исә хејли мүрәккәб бир мәсәләдир. Онун һалыны тә'јин етмәк үчүн бахылан анда фәзанын һәр бир нөгтәсиндә онун интенсивлик векторунун (мәсәлән, електромагнит саһәси үчүн електрик вә магнит интенсивлик векторларынын) гијмәт вә истигамәтини билмәк, јә'ни сонсуз сајда кәмијјәтләри вермәк лазымдыр.

Беләликлә, саһәјә далғавары просес кими бахылырды вә әксәр оптик һадисәләр (ишығын дифраксијасы, интерференсијасы вә һәтта дүзхәтт бојунча јајылмасы) ишығын далғавары тәбиәтинә малик олмасы бахымындан јахшы изаһ олуна билирди. Ишығын тәбиәтинә олан бу бахыш Максвел тәрәфиндән електромагнит нәзәријјәси јарадыландан сонра даһа да мөһкәмләнди вә о көстәрди ки, ишыг електромагнит далғаларынын хүсуси шәклидир.

Лакин, XIX әсрин сонунда вә XX әсрин әввәлләриндә микроаләмдә (атом вә молекулларда) кедән физики һадисәләрин һәртәрәфли вә дәриндән өјрәнилмәси көстәрди ки, классик физика бу һадисәләрин изаһында бөјүк чәтинликләрлә вә зиддијјәтләрлә гаршылашыр. Микроаләмдә кедән һадисәләр классик физика бахымындан изаһ олуна билмир вә онларын изаһы үчүн тамамилә јени принсипләр ахтарыб тапмаг лазымдыр.

О вахтлар физикләрин гаршысында ики әсас проблем — маддәнин һәгиги микроскопик гурулушуну ајдынлашдырмаг вә madди зәррәчикләрин бир-бири илә вә електромагнит саһәси илә гаршылыглы тә'сир ганунуну тапмаг проблемләри дурурду.

Маддәнин атомар гурулуша малик олмасы тәсәввүрләринин мөһкәмләнмәси илә јанашы електромагнит шүаланма һаггындакы биликләрин дәринләшмәси просеси баш верирди. 1895-чи илдә чох гыса далғалы ренткен шүаларынын кәшфи вә онларын кристаллардан дифраксијасы ишығын далғавары тәбиәтә малик олмасы тәсәввүрләрини даһа да мөһкәмләндирди. Лакин ишығын чисимләр тәрәфиндән удулмасы, бурахылмасы вә сәпилмәси просесләринин тәчрүби олараг һәртәрәфли өјрәнилмәси вә алынан нәтичәләрин классик нәзәријјәнин көмәји илә изаһ едилмә чәһдләри тәчрүбә илә нәзәријјә арасында илк зиддијјәтләри мејдана чыхарды.

Маддә илә таразлыгда олан електромагнит шүаланмада (истилик шүаланмасы) вә ја мүтләг гара чисмин шүаланмасында интенсивлијин тезлијә көрә пајланмасы (спектрал сыхлығы) өјрәнилән заман классик физика илк һәллединмәз чәтинликлә гаршылашды. Спектрал сыхлыг үчүн классик физиканын үмуми принсипләри әсасында алынмыш нәзәри дүстур, тәчрүби нәтичәләри там изаһ едә билмәди. Бу чәтинлији һәлл етмәк үчүн 1900-чу илдә Планк шүаланманын маддә илә классик гаршылыглы тә'сир ганунундан имтина етмәли олду. Планк фәрз етди ки, шүаланманын маддә тәрәфиндән удулуб бурахылмасы, классик физикада иддиа олундуғу кими, арасыкәсилмәдән јох, дискрет енержи порсијалары вә ја *ишыг квантлары* шәклиндә баш верир. Планка көрә квантын енержиси ε шүаланманын тезлији ν илә мүтәнасибдир. $\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$, мүтәнасиблик әмсалы h – Планк сабити адланыр. Ону ујғун шәкилдә сечмәклә ($h = 6{,}63\cdot 10^{-34}$ *Ч.сан*). Планк спектрал сыхлыг үчүн бүтүн температур областында тәчрүбә илә јахшы ујғунлуг верән ашағыдакы ифадәни алмышды:

$$\rho(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1\right)^{-1}; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05\cdot 10^{-34}\ \textit{Ч.сан.},$$

бурада ω – ишығын даирәви тезлији, T – мүтләг температурдур.

Фотоеффект вә сонралар Комптон еффект һадисәләриндә мүшаһидә олунан ганунаујғунлуглар да классик физика чәрчивәсиндә изаһ едилә билмәди. Фотоеффект – маддәнин үзәринә дүшән ишығын ондан електронлары гопарыб чыхармасы һадисәсинә дејилир. Тәчрүбә көстәрир ки, чыхан електронларын сајы ишығын интенсивлији илә мүтәнасибдир; електронларын сүр'әти исә интенсивликдән јох, јалныз ишығын тезлијиндән асылыдыр; һәр истәнилән тезликли ишыг фотоеффект јарада билмир (фотоеффектин гырмызы сәрһәдди) вә електронларын чыхыш аны ишығын дүшмә аны илә ејнидир.

Ишығын далғавары просес олдуғу вә маддә тәрәфиндән кәсилмәдән удулдуғу гәбул едилсә, фотоеффектин садаланан үч хассәсини изаһ етмәк мүмкүн олмур. Доғрудан да, бу һалда електронун сүр'әти интенсивликдән асылы олмалы, истәнилән тезликли шүалар фотоеффект јаратмалы (енержини кәсилмәдән удан електрон кифајәт гәдәр енержи топлајандан сонра маддәдән кәнара чыхар) вә електронун чыхыш аны ишығын дүшмә аны үзәринә дүшмәмәли иди.

Фотоеффектдә мүшаһидә олунан ганунаујғунлуглары изаһ етмәк үчүн Ејнштејн, Планкдан ирәли кедәрәк фәрз етди ки, јалныз ишығын удулуб бурахылмасы просесләри дискрет характер дашымыр, ишығын өзү дә дискрет гурулуша маликдир, о квантлардан – фотонлардан ибарәтдир вә һәмин квантлар $\varepsilon = h\nu$ енержисиндән башга һәрәкәти истигамәтиндә јөнәлмиш $p = \frac{\varepsilon}{c}$ импулсуна да маликдир. Ејнштејнә көрә фотонун корпускул (зәррәви) характеристикалары олан енержи ε вә импулс p илә онун (ишығын) далғавары характеристикалары олан тезлик ν вә далға узунлуғу λ

$$\varepsilon = h\nu = \hbar\omega$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \left(\left|\vec{k}\right| = \frac{2\pi}{\lambda}\right) \qquad (1.1)$$

мүнасибәтләри илә бағлыдыр. Бурада $\omega = 2\pi\nu$, ν – хәтти тезлик, k – далға әдәдидир.

Бу фәрзијјә әсасында Ејнштејн фотоеффектдә мүшаһидә олунан тәчрүби ганунлары чох асанлыгла изаһ едә билди: ишыг енержиси $h\nu$ олан фотон сели шәклиндә һәрәкәт едир. Фотон, мәсәлән, металын електрону үзәринә дүшдүкдә о, фотону бүтөвлүкдә удур вә $h\nu$ гәдәр енержи алыр. Металы тәрк етмәк үчүн исә електрон A гәдәр чыхыш иши көрмәлидир. Бурадан чыхан електронун кинетик енержиси

$\frac{mv^2}{2} = h\nu - A$ олур. Һәр метал үчүн A сабит кәмијјәт олдуғундан електронун кинетик енержиси (сүр'әти) јалныз ишығын тезлијиндән асылы олур вә фотоеффектин гырмызы сәрһәдди үчүн $\frac{mv^2}{2} = 0$ шәртиндән $h\nu_s = A$ алыныр. Демәли, фотоеффекти јалныз $h\nu \geq A$ шәртини өдәјән ишыг јарада биләр. Бүтүн бу иддиалар тәчрүбәдә там тәсдиг олунмушду.

Ишығын фотонлар селиндән ибарәт олмаг фәрзијјәси Комптон еффектини дә там изаһ етмәјә имкан верир. Комптон еффект – рентген шүаларынын атомда зәиф бағланмыш (сәрбәст) електронлардан сәпилмәси һадисәсидир. Комптон сәпилмәдә сәпилән шүанын далға узунлуғу λ', дүшән шүанын далға узунлуғу λ-дан бөјүк олур вә бу $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ фәрги дүшән шүанын тезлијиндән асылы олмајыб, јалныз сәпилмә бучағы θ (шүанын дүшмә вә сәпилмә истигамәтләри арасындакы бучаг) илә тә'јин олунур: $\Delta\lambda = \frac{\hbar}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}$ (бурада $\lambda = \frac{\hbar}{mc}$ – Комптон далға узунлуғу адланыр, m – електронун сүкунәт күтләси, c – ишыг сүр'әтидир). Сәпилән хәттин интенсивлијинә кәлдикдә исә о, ағыр атомлар тәрәфә кетдикчә зәифләјир.

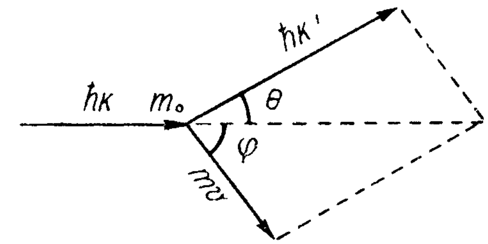
Фотона енержи вә импулсу (1.1) илә тә'јин едилмиш зәррәчик, ишығын сәрбәст електрондан сәпилмәсинә исә ики зәррәчијин тоггушма нәтичәси кими бахсаг, јухарыдакы һәр ики факт асанлыгла изаһ олунур. Доғрудан да, зәррәчикләрин тоггушма просесиндә енержи вә импулс сахланыр. Електронун атомдакы сүр'әти υ, c ишыг сүр'әтиндән чох кичик олдуғундан, биринчи јахынлашмада башланғычда ону сүкунәтдә гәбул етмәк олар ($E_o = m_o c^2$, $\vec{p}_o = 0$). Фотонун башланғыч вә сон енержиләрини $\hbar\omega$ вә $\hbar\omega'$, импулсларыны $\hbar\vec{k}$ вә $\hbar\vec{k}'$, тәпмә електронун енержисини E, импулсуну $\vec{p}$ илә ишарә етсәк (шәкил 1), сахланма ганунлары

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

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

кими јазылыр, бурадан исә асанлыгла, $\Delta\lambda$ үчүн јухарыдакы ифадә алыныр. Сәпилмә спектрал хәттинин интенсивлијинин азалмасы исә фотонун атомдакы електронла јох, бүтөв атомла тоггушма нәтичәси олур. Мә'лумдур ки, белә еластики тоггушмада фотонун тезлији дәјишмир.

Беләликлә, електромагнит шүаланма (ишыг) икилик характеринә — далға-зәррәчик (корпускул) дуализминә маликдир. Дифраксија вә интерференсија һадисәләриндә ишыг өзүнү далғавары просес, таразлыгдакы шүаланмада, атомун шүаудма вә шүабурахма просесләриндә, фотоеффект



Шәкил 1. Ишығын сәрбәст електрондан сәпилмәси (Комптон еффекти).

вә Комптон еффект һадисәләриндә исә өзүнү зәррәчикләр (фотонлар) сели кими апарыр. Ишыг нә классик зәррәчикләр селидир, нә дә классик далғаларын суперпозисијасыдыр. Фотонларын гәфәсдән сәпилмәсиндә екранда алынан дифраксија мәнзәрәси о заман изаһ олунур ки, сәпилмә просесиндә гәфәс ајры-ајры јарыглар шәклиндә јох, бүтөвлүкдә иштирак етсин, јә'ни ишыг гәфәсдән далғалар кими сәпилсин, екрана исә зәррәчикләр сели кими дүшсүн, башга сөзлә, ејни бир просесдә ишыг һәм далға, һәм дә зәррә хассәләринә малик олсун.

Классик нәзәријјәнин гаршылашдығы икинчи нөв чәтинликләр маддәнин гурулушу проблеми илә әлагәдардыр. Классик нәзәријјәјә көрә бүтүн маддәләр атом вә молекул адланан корпускуллардан тәшкил олунмушдур. Електронун кәшфи, кимјәви елементләрин атомларынын мүрәккәб тәркибли (α, β вә γ) радиоактив шүалар бурахмасы фактларындан алынырды ки, атом мүрәккәб гурулуша маликдир. Атомун нејтраллығы, α вә β - шүаларынын исә, ујғун олараг мүсбәт вә мәнфи електрик јүкү дашымасы, атомда бу јүкләрин пајланма ганунуну танмаг, јә'ни онун гурулушуну мүәјјән етмәк проблемини гаршыја гојду.

Атомун илк модели Ч.Томсон тәрәфиндән тәклиф олунмушду. Томсона көрә атомда мүсбәт јүк онун бүтүн һәчми боју кәсилмәдән бәрабәр пајланыр, мәнфи јүкләр исә онун дахилиндә (дәниздә өзбашына бурахылмыш гајыг кими) хаотик һәрәкәт едир.

Радиоактивлијин кәшфи, дикәр тәрәфдән, алимләрә атомун гурулушуну тәдгиг етмәк үчүн күчлү васитә верди. Радиоактив елементләрин бурахдығы јүксәк енержили α -зәррәчикләр (онлар һидрокен атомундан тәхминән дөрд дәфә ағырдыр) атомун гурулушуну өјрәнмәк үчүн зонд ролуну ојнады. α -зәррәчикләри мүхтәлиф елементләрин атомларындан сәпмәк јолу илә Резерфорд атомун мүасир моделини гура билди. Резерфорда көрә атом, мәркәзиндә јерләшмиш кичик өлчүлү (10^{-13}—10^{-12} см) мүсбәт јүклү нүвәдән вә онун әтрафында фырланан мәнфи јүклү електронлардан ибарәтдир. Атомун, демәк олар ки, бүтүн күтләси онун нүвәсиндә топланмышдыр.

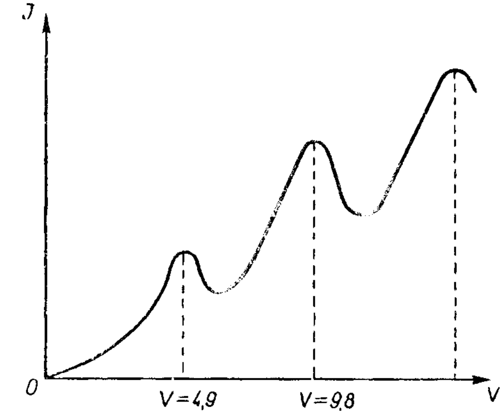
Јарандығы илк күндән атомун Резерфорд модели мүһүм чәтинликләрлә гаршылашды. Електронлар илә нүвә арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сирдән башга, онларын електромагнит саһәси илә гаршылыглы тә'сирини дә нәзәрә алсаг, Лоренсин електрон нәзәријјәсинә көрә, нүвә әтрафында тә'чиллә һәрәкәт едән (сүрәтләнән һәрәкәт һәмишә тә'чилли һәрәкәтдир) електрон тезлији фырланма тезлијинә бәрабәр електромагнит далғалары шүаландырмалыдыр. Бунун нәтичәсиндә онун кинетик енержиси тәдричән азалар вә нүвәјә јахынлашараг онун үзәринә дүшәр — атом дајаныглы олмаз. Дикәр тәрәфдән исә, маддәнин бурахма вә удма спектрләри кәсилмәз (бүтөв) спектр оларды. Тәчрүбә көстәрир ки, атом дајаныглыдыр вә атомларын (маддәнин) бурахма вә удма спектрләри хәттидир. Мәсәлән: ән садә атом олан һидрокен атомунун спектриндә мүшаһидә олунан спектрал хәтләрин тезликләри $\nu = R(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2})$ дүстуру илә тә'јин олунур, бурада R – Ридберг сабити, n вә m исә там мүсбәт әдәдләрдир ($m > n$).

Атомун гурулушу илә әлагәдар зиддијјәтләри һәлл етмәк үчүн мәшһур Данимарка алими Нилс Бор ишыг квантларынын мөвчуд олмасы һипотезини тамамлајан ики постулат ирәли сүрдү (1913). Биринчи постулата көрә атомар системләр јалныз мүәјјән стасионар вә ја квант һалларында ола биләр, бу һалларда системин енержиси E_1, E_2, ... , E_n ... кими дискрет гијмәтләр алыр вә електронларын һәрәкәтинә бахмајараг атом бу һалларда енержи шүаландырмыр. Атом јалныз бир стасионар һалдан дикәринә кечдикдә, бу һалларын енержиләри фәргинә бәрабәр енержи удур вә ја бурахыр. Енержини ја ишыг кванты шәклиндә шүаландырыр вә ја да тоггушдуғу башга системә вермәклә итирир. Икинчи постулата көрә кечид заманы бурахылан вә ја удулан квантын ν тезлији, Борун $\nu = \frac{E_n - E_m}{h}$ тезликләр гајдасы илә тә'јин олунур. Бурада E_n, E_m — n вә m нөмрәли стасионар һалларын енержиси, h — Планк сабитидир.

Бу ики постулат, даирәви вә еллиптик орбитләрин квантланмасы гајдалары илә бирликдә һидрокен атомунун стасионар һалларынын енержисини һесабламаға, Ритсин комбинасија принсипини, Франк–Һерс тәчрүбәләринин нәтичәләрини вә атомар системләрин спектрләринин хәттилијини изаһ етмәјә имкан верди.

Доғрудан да, Франк–Һерс тәчрүбәсиндә електронлар чивәнин бухарындан кечдикдә дөврәдә кәркинлик артдыгча әввәл чәрәјан шиддәти артыр. Сүр'әтләнән електронларын енержиси 4,9 *еВ*, 9,8 *еВ*, 13,8 *еВ* вә и.а. гијмәтләрә чатдыгда чәрәјан шиддәти бирдән-бирә кәскин азалыр. Бу она дәлаләт едир ки, електронлар чивә атомлары илә тоггушдугда атомлар, енержинин јухарыда көстәрилән гијмәтләриндә ону (енержини) бүтөвлүкдә гәбул едәрәк һәјәчанланыр. Енержисини итирмиш електронларын јаратдығы чәрәјан исә кәскин зәифләјир (шәкил 2). Бу да чивә атомларынын енержисинин јалныз сычрајышла дәјишдијинә дәлаләт едир.

Лакин Бор нәзәријјәси там квант нәзәријјәси дејилди. Бор нәзәријјәсиндә електронун атомдакы һәрәкәти Нјутон һәрәкәт тәнликләри илә тәсвир олунурду, онун һәллиндән алынмыш сонсуз сајла трајекторијалар-



Шәкил 2. Франк вә Һерс тәчрүбәсинин нәтичәси.

дан, орбитләрин квантланмасы гајдалары (емпирик дахил едилмиш) әсасында стасионар орбитләр сечилирди. Орбит анлајышы исә квантланма гајдалары илә биркә мөвчуд ола билмәз. Зәррәчијин трајекторија бојунча һәрәкәти дедикдә елә һәрәкәт баша дүшүлүр ки, һәр истәнилән анда онун координат вә импулсу мә'лум олсун вә онлар замана көрә кәсилмәдән дәјишсин. Онда зәррәчијин енержисинин сычрајышла дәјишмәсиндән данышмаг олмаз, чүнки трајекторија бојунча һәрәкәтдә енержи һәмишә кәсилмәдән дәјишмәлидир.

Бор нәзәријјәси спектрал хәтләрин интенсивлијини һесабламаг, үмумијјәтлә бүтүн сәпилмә просесләрини тәдгиг етмәк, стасионар һалда олан електронун енержи шүаландыра билмәмәси сәбәбләрини ајдынлашдырмаг, мүрәккәб атомларын стасионар һалларыны һесабламаг вә и.а. кими мәсәләләрин һәллиндә арадан галдырыла билмәјән чәтинликләрлә растлашды.

§ 2. ДЕ-БРОЈЛ ДАЛҒАЛАРЫ ВӘ ОНЛАРЫН ФАЗА ВӘ ГРУП СҮР'ӘТЛӘРИ

Бор нәзәријјәсиндә мејдана чыхан чәтинликләри һәлл етмәк мәгсәди илә де-Бројл ишығын тәбиәтиндә мүшаһидә олунан далға-зәррә дуализминин мадди зәррәчикләр үчүн дә доғру олдуғуну иддиа едән һипотез ирәли сүрдү (1924). Бу һипотезә көрә зәррәчикләр корпускул хассәләрлә јанашы далғавары хассәләрә дә малик олмалыдыр. Башга сөзлә, далға-зәррә дуализми микрообјектләрин үмуми хассәләрини ифадә едир вә о, мадди зәррәчикләр үчүн дә доғру олмалыдыр.

Де-Бројлу бу фикрә кәтирән һәндәси оптика илә Нјутон механикасы арасындакы охшарлыг олмушду. Мә'лумдур ки, классик механиканын мадди нөгтә, трајекторија, һәрәкәт сүр'әти, $U(x,y,z)$ потенсиаллы саһәдә һәрәкәт анлајышларына һәндәси оптикада ујғун олараг, далға пакети, шүа, груп сүр'əти вə сындырма əмсалы $n(x,y,z)$ олан мүһитдə һəрəкəт ан-лајышлары гаршы гојулур. Классик механикада тə'сир адланан $S = \int_a^b \mathcal{L} dt$ интегралы ($\mathcal{L}$ механики системин Лагранж функсијасыдыр) истəнилəн механики системин ики a вə b нөгтəлəри арасындакы һəгиги һəрəкəти үчүн екстремал гијмəт алыр, јə'ни һəрəкəтин һəгиги трајекторијасы бојунча онун вариасијасы сыфыр олур: $\delta S = 0$ (əн кичик тə'сир принсипи). Һəндəси оптикада да шүа вариасија принсипи илə тə'јин олунур. Бу принсип Ферма принсипи адланыр. Ферма принсипинə көрə ишыг ики a вə b нөгтəлəрини бирлəшдирəн јоллардан (шүалардан) елəсини сечир ки, о јолда ишыгын јајылма мүддəти əн кичик олсун, јə'ни шүанын оптик јолунун узунлуғу вə јахуд онун, јолун башланғыч вə сонундакы фазалар фərги $\Delta\varphi = \varphi_b - \varphi_a = \int_a^b \frac{ds}{\lambda}$ минимум олсун. Бурадан исə чыхыр ки, оптик јол бојунча $\Delta\varphi$-нин вариасијасы сыфра бəрабəрдир: $\delta(\Delta\varphi) = 0$, бурада s оптик јолун узунлуғу, λ далға узунлуғудур.

Һəндəси оптика ишыгын бүтүн хассəлəрини (мəсəлəн, интерференсија, дифраксија) изаһ едə билмədијинə көрə далға оптикасы (мејдана чыхыр вə чох гыса далғалар үчүн далға оптикасынын ганунаујғунлуглары һəндəси оптиканын ганунаујғунлуглары үзəринə дүшүр, јə'ни һəндəси оптика далға оптикасынын лимит һалы олур. Классик механиканын тəтбигиндəки мəһдудијјəт (атомун дахилиндəки һəрəкəтə тəтбиг олуна билмəмəси), де-Бројлун фикринчə, маддəнин һəр чүр һəрəкəтинə тəтбиг олуна билəн вə лимит һалында, јə'ни гыса далғалар үчүн классик механикаја кечəн јени механиканын — дalғавары механиканын мөвчуд олмамасы илə əлагəдардыр.

Бу мүддəа əсасында де-Бројл енержиси E, импулсу $\vec{p}$ олан зərрəчијин сəрбəст һəрəкəтини

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

мүстəви монохроматик далға илə əлагəлəндирмəји тəклиф етмишдир. Де-Бројла көрə далғанын характеристикалары олан ω тезлији вə $\vec{k}$ далға вектору илə зərрəчијин характеристикалары олан E енержиси вə $\vec{p}$ импулсу арасындакы рабитə, Ејнштејнин ишыг квантлары (фотонлары) үчүн тəклиф етдији (1.1) дүстурларына охшар дүстурларла верилмəлидир:

$$E = \hbar\omega,$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \text{вə ја} \quad |\vec{p}| = \frac{2\pi}{\lambda}\hbar. \qquad (2.2)$$

Бурада λ — далға узунлуғудур вə (2.2)-дə икинчи дүстур де-Бројл дүстуру адланыр.

(2.2)-дəн истифадə едиб, (2.1)-дə ω вə $\vec{k}$-ны E вə $\vec{p}$ илə əвəз етсəк

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

аларыг. Зərрəчијин E, $\vec{p}$ характеристикалары илə тə'јин олунан (2.3) далғалары де-Бројл далғалары адланыр.

Вакуумда јајылан (2.1) ишыг далғалары илə зərрəчијин сəрбəст һəрəкəтинə ујғун (2.3) де-Бројл далғалары арасындакы заһири охшарлыға бахмајараг, онларын тəбиəти вə амплитудларынын хассəлəри арасында һеч бир үмумилик јохдур. Она көрə дə, (2.3) далғаларынын физики маһијјəти (мə'насы) оптик далғаларын физики маһијјəти илə ејни дејилдир. Бу мəсəлəјə биз §4-дə тохунаҹағыг. Инди исə де-Бројл далғаларынын хассəлəри илə таныш олаг.

Де-Бројл далғаларынын фаза сүр'əтини тə'јин едəк. Фаза сүр'əти фазанын $\omega t - \vec{k}\vec{r} = \frac{1}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r}) = \text{const}$ гијмəтинин фəзада јердəјишмə сүр'əтинə бəрабəрдир. Садəлик үчүн x охуну далғанын јајылма истигамəтиндə јөнəлтсəк, υ_ϕ фаза сүр'əти $Edt - pdx = 0$ тəнлијиндəн тə'јин олунар:

$$\upsilon_\phi = \frac{dx}{dt} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{\upsilon} > c. \qquad (2.4)$$

Бурадан көрүнүр ки, де-Бројл далғаларынын υ_ϕ фаза сүр'əти ишыг сүр'əтиндəн бөјүкдүр. Бу һеч дə нисбилик нəзəријјəсинин тəлəблəринə зидд дејилдир. Фаза сүр'əти төчрүбəдə өлчүлə билмир. Ону өлчмəкдəн өтрү бүтүн фəза бојунча јајылмыш мүстəви далғанын фəзанын һəр һансы бир нөгтəсиндə фазасынын гијмəтини гејд едиб, ахырынчынын фəзада јердəјишмəсини мүшаһидə етмəк лазымдыр. Белə бир əмəлијјаты бир далға һалында апармаг мүмкүн дејилдир. Ону фəзада ејни заманда јајылан ики вə икидəн чох далғалар үчүн (далғаларын интерференсијасы) апармаг олар. Бу исə груп сүр'əти анлајышына кəтирир (ашағы бах). Дикəр тəрəфдəн, фаза сүр'əти мүһитдə нə сигналын јајылма сүр'əти, нə дə енержинин дашынма сүр'əтини характеризə етмир, јə'ни о, елə бир физики мə'наја малик дејилдир.

Сəрбəст һəрəкəт һалында белə де-Бројл далғаларынын υ_ϕ фаза сүр'əти k далға əдəдиндəн асылыдыр:

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

(бурада m_o – зәррәчијин сүкунәтдәки күтләсидир). Бу исә де-Бројл далғаларынын, ишығ далғаларындан фәргли олараг (ишығ далғалары үчүн $\upsilon_\phi = c$), бош фәзада да дисперсијаја уғрадығыны көстәрир.

Инди дә де-Бројл далғаларынын груп сүр'әтини тапаг. Бунун үчүн далға әдәди чох кичик $k_o - \Delta k \le k \le k_o + \Delta k$ интервалында гијмәт алан далға групунун x истигамәтиндә һәрәкәт етдијичи фәрз едәк. Онларын интерференсија етмәләри нәтичәсиндә алынан јекун далға (далға пакети)

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

шәклиндә олар. $k - k_o$ фәрги чох кичик олдуғундан $\omega(k)$-ны $\Delta k = k - k_o$-ын үстләринә көрә сыраја ајыраг

$$\omega(k) = \omega(k_o) + (\frac{d\omega}{dk})_o \Delta k + \frac{1}{2}(\frac{d^2\omega}{dk^2})_o (\Delta k)^2 + \ldots$$

Онда k-ны $k = k_o + k - k_o = k_o + \Delta k$ шәклиндә јазыб, $A(k)$-нын k-ја көрә зәиф дәјишдијини нәзәрә алсаг,

$$\Psi(x,t) = A(k_o) e^{-i\omega_o t + ik_o x} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{-i[(\frac{d\omega}{dk})_o t - x]\Delta k} dk =$$

$$= 2A(k_o) \frac{\sin\left[(\frac{d\omega}{dk})_o t - x\right]\Delta k}{(\frac{d\omega}{dk})_o t - x} e^{-i\omega_o t + ik_o x} = A(x,t) e^{-i\omega_o t + ik_o x}$$

алынар, бурада $\omega_o = \omega(k_o)$, Δk-нын кичик олмасы һесабына x вә t-јә көрә олдугча јаваш дәјишән $A(x, t)$ кәмијјәтинә монохроматик далғанын амплитуду кими бахмаг олар. О, $x = (\frac{d\omega}{dk})_o t$ нөгтәсиндә ән бөјүк (максимум), ондан кәнарда исә сыфра јахын гијмәт алыр. Амплитудун бу максимум гијмәти фәзада, јәгин ки,

$$\upsilon_{\text{гр}} = \frac{x}{t} = \frac{d\omega}{dk}$$

сүр'әти илә јерини дәјишәр. Бу сүр'әт далға групунун биркә јајылма сүр'әти олуб, груп сүр'әти адланыр. Де-Бројл далғалары үчүн

$$\upsilon_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\sqrt{c^2p^2 + m_o^2c^4} = \frac{c^2p}{E} = \upsilon$$

олур, бурада υ–зәррәчијин һәрәкәт сүр'әтидир.

Демәли, де-Бројл далғаларынын груп сүр'әти микрозәррәчијин фәзада һәрәкәт сүр'әти үзәринә дүшүр. Дикәр тәрәфдән, зәррәчијин өлчүләри сонлу олдуғундан она гаршы гојулан далғанын өлчүләри мәһдуд олмалыдыр. Бурадан чыхыр ки, биринчи бахышда микрозәррәчијә тезликләри бир-биринә чох јахын де-Бројл далғаларынын топлусу, јә'ни далға пакети кими бахмаг олар. Лакин бу иддиа күндәлик мүшаһидәјә зиддир. Де-Бројл далғалары һәтта бош фәзада дисперсијаја уғрадығындан, белә пакет чох гыса бир мүддәтдә (мәсәлән, електрон үчүн тәхминән 10^{-26} *сан*-дан сонра) фәзада јајылараг дағылар. Микрозәррәчик исә һәрәкәти заманы фәрдилијини вә локаллығыны сахлајыр.

Беләликлә, микрозәррәчик нә мүстәви де-Бројл далғасы вә нә дә онлардан тәшкил олунмуш далға пакети илә ејниләшдирилә билмәз, јә'ни де-Бројл далғаларына, классик мә'нада, һәр һансы мүһитдә јаранан вә јајылан реал далғалар кими бахмаг олмаз.

§ 3. МИКРОЗӘРРӘЧИКЛӘРИН (де-БРОЈЛ ДАЛҒАЛАРЫНЫН) ДИФРАКСИЈАСЫ

Микрозәррәчикләрин зәррә хассәләри чохдан мә'лум иди. Мәсәлән, онлар дојмуш бухарла долу Вилсон камерасындан кечдикдә јолунда тәсадүф олунан молекуллары ионлашдырыр, јаранмыш ионлар конденсасија мәркәзи ролуну ојнајыр вә үзәринә ифрат дојмуш бухары конденсасија етдирир. Әмәлә кәлмиш дамчылар зәнчири назик хәтт (из) шәклиндә мүшаһидә олунур. Галын лајлы фотолөвһә үзәринә сүртүлмүш емулсијада да микрозәррәчикләр буна охшар изләр бурахыр. Демәли, бурада микрозәррәчикләр, ади һиссәчикләр кими, трајекторија бојунча һәрәкәт едир.

Де-Бројлун һипотези доғрудурса, микрозәррәчикләр далғавары хассәләрә дә малик олмалыдыр. Һәр бир һипотез кими, бу һипотез дә јалныз тәчрүбәдә тәсдиг олунандан сонра доғру һесаб олуна биләр.

Башга сөзлә микрозәррәчикләр үчүн дифраксија вә интерференсија һадисәләри мүшаһидә олунмалыдыр. Оптикадан билдијимиз кими ишығ далғаларынын дифраксија етмәси үчүн онларын далға узунлуғу јарығын вә ја дифраксија гәфәси сабитинин өлчүләри тәртибиндә олмалыдыр. Де-Бројл далғаларынын дифраксија гәфәсини мүәјјән етмәк үчүн онларын далға узунлуғунун тәртибини тапаг.

(2.2) мүнасибәтләринә көрә де-Бројл далғасынын далға узунлуғу

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}. \tag{3.1}$$

Зәррәчијин сүр'әтинин $\upsilon < c$ олдуғуну гәбул етсәк (јә'ни релјативистик ефектләри нәзәрә алмасаг),

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m\upsilon} \qquad (3.2)$$

олар. Зәррәчијин електростатик саһә васитәси илә сүр'әтләндирилдијини гәбул етсәк, онун сүр'әти саһәнин потенсиалы V илә тә'јин олунар

$$\frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{eV}{300}. \qquad (3.3)$$

υ-нин (3.3)-дән тапылмыш гијмәтини (3.2)-дә јазсаг,

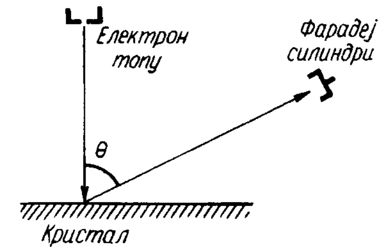
$$\lambda = \sqrt{\frac{4\pi^2\hbar^2}{me}}\sqrt{\frac{150}{V}} \qquad (3.4)$$

аларыг. Бурадан көрүнүр ки, микрозәррәчијин күтләси m вә сүр'әтләндиричи потенсиал V бөјүк олдугча, она ујғун де-Бројл далғасынын далға узунлуғу кичик олур. Квант механикасында апарылан мүлаһизәләр адәтән електрон мисалы үзәриндә гурулдуғундан (3.4) дүстуруну електрон далғалары үчүн (m_e=$9\cdot10^{-28}$ *г*, e=$4{,}8\cdot10^{-10}$ ел.стат.ваһид, $\hbar$=$1{,}054\cdot10^{-27}$ *ерг.сан*) јазаг:

$$\lambda_e \approx \sqrt{\frac{150}{V}}\ \mathring{A}. \qquad (3.5)$$

Башга зәррәчијә ујғун (протона, нејтрона, атома, молекул вә и.а.) далғанын узунлуғу исә $\lambda = \lambda_e \frac{m_e}{M}$ (бурада M — ујғун зәррәчијин күтләсидир) дүстуру илә тапылыр. V=150 *еВ* оланда $\lambda_e \approx 1\,\mathring{A}$, V=10^4*еВ* оланда исә $\lambda_e \approx 0{,}122\,\mathring{A}$ вә и.а. олур. Беләликлә, електрон далғаларынын далға узунлуғу, рентген шүаларынын далға узунлуғу кими ангстрем ($\mathring{A}$) тәртибиндәдир. Демәли, рентген шүалары үчүн дифраксија гәфәси ролуну ојнајан вә гәфәс сабити $\mathring{A}$ тәртибиндә олан кристал маддәләр електронларын дифраксијасыны мүшаһидә етмәк үчүн јахшы васитә (гәфәс) ола биләр.

Електронларын дифраксијасы илк дәфә Девис вә Чермер (1927) тәҹрүбәләриндә електронларын монокристаллардан сәпилмәси өјрәнилән заман мүшаһидә олунмушду. Девис вә Чермер тәҹрүбәсинин схеми шәкил 3-дә верилмишдир.



Шәкил 3. Електронларын дифраксијасыны нүмајиш етдирән тәҹрүбәнин схеми.

Електрон топундан чыхан електрон дәстәси кристалын сәтһинә перпендикулјар истигамәтдә јөнәлдилир вә мүхтәлиф θ буҹаглары алтында сәпилмиш електронларын интенсивлији галванометр васитәсилә өлчүлүр. Тәҹрүбәдә көтүрүлмүш енержиләрдә (~50 *еВ*) електронларын кристалын дәринликләринә кирмә һаллары чох сејрәк тәсадүф едилдијиндән беләсәпилмәјә мүстәви дифраксија гәфәсиндән сәпилмә кими бахмаг олур. Бу һалда дифраксија максимумларынын вәзијјәти

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

Вулф–Брегг дүстуру илә тә'јин олунур; бурада d — мүстәви гәфәсин сабити, θ — сәпилмә буҹағы, n — дифраксија максимумларынын тәртибидир. Алынмыш дифраксија мәнзәрәси бу дүстура там ујғун олмушду.

Електронлар, рентген шүаларына охшар олараг, назик метал лөвһәләрдән вә ја олдугча кичик кристаллардан ибарәт назик тоз тәбәгәсиндән кечдикдә дә дифраксијаја уғрајыр. Сәпилән електронларын јолуна дүшән дәстәнин истигамәтинә перпендикулјар фотолөвһә гојулса, фотолөвһәдә бир-бирини әвәз едән гаранлыг вә ишыг консентрик золаглар ардычыллығындан ибарәт дифраксија мәнзәрәси алыныр. Бу үсулла електронларын дифраксијасы, бир-бириндән асылы олмајараг, П.С.Тартаковски вә Ҹ.П.Томсон (1928) тәрәфиндән мүшаһидә едилмишди.

Електрона ади классик зәррәчик кими бахмагла електронларын вердији дифраксија мәнзәрәсини изаһ етмәк мүмкүн дејилдир. Доғрудан да, фәрз едәк ки, биз, мүстәви дифраксија гәфәсинин јалныз бир јарығындан кечән (онун галан јарыглары бу вә ја башга бир васитә илә бағланмышдыр) електронлар дәстәсинин мүхтәлиф буҹаглар алтында пајланмасыны мүшаһидә едирик. Електронлар классик механиканын ганунларына ујғун олараг мүәјјән трајекторијалар үзрә һәрәкәт етмиш вә јарығын кәнарлары илә гаршылыглы тә'сирдә олмамыш олсајды, гаршыда гојулмуш фотолөвһәдә јарығын шәклини тәкрар едән ләкә алынарды. Әслиндә исә електронлар јарығын атомлары илә гаршылыглы тә'сирдә олур. Атомлар хаотик истилик һәрәкәти етдијиндән гаршылыглы тә'сир тәсадүфи характер дашыјар вә сәпилән електронларын фотолөвһәдә пајланмасы тәсадүфи кәмиjjәтләрин пајланма ганунуна уjғун олараг Гаусс пајланмасы шәклиндә оларды. Лакин, јухарыда дедијимиз кими, фотолөвһәдә әсл дифраксија мәнзәрәси алыныр, јә'ни ишыг вә гаранлыг консентрик золаглар ардычыл олараг бир-бирини әвәз едир.

Бәлкә електронлар, трајекторијаларын һамысы үзрә јох, Бор нәзәријјәсиндә олдуғу кими, јалныз мүәјјән шәкилдә сечилмиш трајекторијалар бојунча һәрәкәт едәрәк дифраксија мәнзәрәси јарадыр. Белә олмуш олсајды, ики јарыгдан алынан дифраксија мәнзәрәси, јарыглардан нөвбә илә бири бағландыгда алынан ики мәнзәрәнин топлусу оларды. Чүнки, јарыгларын бириндән кечән електрон өз трајекторијасы бојунча һәрәкәт едиб, гаршыдакы екрана дүшәр вә она икинчи јарығын тә'сири олмаз, белә ки, һәр бир електрон јарыгларын јалныз бириндән кечир. Лакин, електрон дәстәси үчүн ики јарыгдан алынан дифраксија мәнзәрәси там мә'насы илә оптикада мүшаһидә олунан уjғун дифраксија мәнзәрәсинә охшајыр. Башга сөзлә, бир јарыгдан кечән електрона икинчи јарығын тә'сири олур. Бу исә јалныз далғалара хас олан хассәдир.

Дифраксија мәнзәрәси бәлкә дә електронларын бир-бири илә гаршылыглы тә'сир нәтичәси вә јахуд чохлу сајда електронларын ејни заманда тәчрүбәдә иштиракы нәтичәсидир, ајры-ајры електронлар исә өзләрини тамамилә башга чүр апарыр.

1949-чу илдә Л.Биберман, Н.Сушкин вә В.Фабрикант ардычыл бурахылан електронлар арасындакы заман фасиләсини хејли бөјүк көтүрәрәк, онлары дифраксија гурғусундан бир-бир бурахмышдылар. Һәр електрон фотолөвһәдә дүшдүјү нөгтәдә бурахдығы ләкә илә гејдә алынырды. Тәчрүбәдә мүшаһидә олунмушду ки, гурғудан аз сајда електронлар кечдикдә онларын фотолөвһәдә бурахдығы ләкәләр, пис атычынын атдығы күлләләрин һәдәфдә сәпәләнмәсинә охшар олараг пәракәндә сәпәләнир (пајланыр), лакин, тәчрүбәни узун мүддәт давам етдириб, гурғудан чохлу сајда електрон бурахдыгда фотолөвһәдә дифраксија мәнзәрәси алыныр вә һеч дә електрон дәстәләри васитәсилә алынан дифраксија мәнзәрәсиндән фәргләнмир.

Бу тәчрүбәләр көстәрир ки, електрон далғавары хассәләрә маликдир вә онунла мүәјјән бир далғавары просес бағлыдыр. Лакин, јухарыда дедијимиз кими, електрону һәр һансы бир реал далға (далға пакети) илә ејниләшдирмәк олмаз, чүнки, бу һалда јалныз бир електрон бүтүн дифраксија мәнзәрәсини вермиш оларды. Тәчрүбәдә електрон фотолөвһәнин јалныз бир нөгтәсинә дүшүр вә һәмин нөгтәдә ләкә бурахыр, дифраксија мәнзәрәси исә бу һадисәнин кифајәт гәдәр чохлу сајда тәкрар олунмасы нәтичәси олур, башга сөзлә, микрозәррәчикләрин далғавары хассәләри, фотонлар һалында олдуғу кими, статистик характер дашыјыр. Ајрылыгда көтүрүлмүш електрон вә ја онларын аз мигдары үчүн исә далғави хассәләр әјани шәкилдә мүшаһидә олунмур.

Бүтүн бу дедикләримиз јалныз о заман нисбәтән баша дүшүлә биләр ки, електронун ади классик һиссәчикдән фәргләндијини вә бу фәргин онларын фотолөвһәдә бурахдығы ләкәләрин вәзијјәтинин классик механика ганунларындан тамамилә фәргли ганунларла тә'јин едилдијини гәбул едәк. Доғрудан да, јухарыда шәрһ олунан дифраксија тәчрүбәләриндән чыхыр ки, електронун фотолөвһәјә дүшдүјү нөгтәнин вәзијјәти, классик һиссәчијин дүшдүјү нөгтәнин вәзијјәтини мүәјјән едән Нјутон механикасы ганунлары илә јох, статистик ганунларла тә'јин олунмалыдыр.

Марағлы бурасыдыр ки, електрон (вә ја истәнилән башга микрозәррәчик), фотонлара охшар олараг, ејни бир тәчрүбәдә өзүнү һәм далға вә һәм дә зәррәчик кими апарыр. Електронлар јарыгдан кечдикдә онларын далға хассәләри бүрузә верир, белә ки јарығын архасында дифраксија мәнзәрәси алыныр. Јарыгдан сонра гојулмуш екрана дүшдүкдә исә онун зәррә (корпускул) хассәләри мејдана чыхыр, белә ки електронлардан һәр бири екранын мүәјјән бир нөгтәсинә дүшүр. Демәли, електрон јарыгдан "далға" кими кечир, екранда исә "зәррәчик" кими гејдә алыныр. Лакин бу һеч дә електронун әввәлчә далға, сонра исә зәррәчик олмасы демәк дејилдир.

Демәли електрон, еләчә дә башга микрозәррәчикләр нә "тәмиз" далға вә нә дә классик мә'нада "тәмиз" зәррәчикдир. Онун һәрәкәти ејни заманда далға вә зәррә хассәләри илә характеризә олунур. Верилмиш шәраитдән асылы олараг, бу вә ја башга дәрәчәдә онун далға вә ја зәррә хассәләри мејдана чыхыр. Она көрә дә далға-зәррә дуализминә микрозәррәчијин мүхтәлиф шәраитдә мүхтәлиф хассәләри нүмајиш етдирән потенсиал имканы кими бахмаг лазымдыр. Беләликлә, микрозәррәчик јалныз өзүнәмәхсус хассәләрә малик, бир-биринә там әкс олан бу ики мәфһуму өзүндә бирләшдирән бир варлыгдыр, јә'ни микрозәррәчијә әјани модел гаршы гојмаг мүмкүн дејилдир.

II ФӘСИЛ

КВАНТ МЕХАНИКАСЫНЫН РИЈАЗИ ӘСАСЛАРЫ

§ 4. ДАЛҒА ФУНКСИЈАСЫ ВӘ ОНУН ФИЗИКИ МАҺИЈЈӘТИ

Јухарыда (§2) көстәрдик ки, енержиси E, импулсу $\vec{p}$ олан һәр бир сәрбәст зәррәчијә (2.3) ифадәси илә верилмиш $\Psi(x,t)^{*}$ де-Бројл далғасы гаршы гојулур. Координатлардан вә замандан асылы олан вә бахылан далғанын амплитуду ролуну ојнајан бу функсија далға функсијасы вә ја садәчә Ψ-функсија адланыр. Јалныз сәрбәст зәррәчијин далға функсијасы (2.3) кими садә шәклә маликдир. Иxтијари $V(x,t)$ потенсиал саһәдә һәрәкәт едән зәррәчијә уjғун Ψ-функсијанын аналитик ифадәси мүрәккәбдир вә о, $V(x,t)$ - јә уjғун саһәнин тәбиәти илә тә'јин олунур.

* x илә системин бүтүн координатлар чохлуғу ишарә олунур: бирзәррәчикли систем үчүн $x \to x,y,z$ чохлуғуну, N– зәррәчикли систем үчүн исә $x_1,y_1,z_1,\ldots,x_N,y_N,z_N$ чохлуғуну ифадә едир.

Ψ-функсијанын физики маhијјәтини дәрк етмәк мәгсәди илә јухарыда биз ону далға пакети кими көстәрмәк вә ја да зәррәчијин һәрәкәтини пакетин һәрәкәти илә әвәз етмәјә чәһд көстәрдик. Лакин бу мүмкүн олмады, чүнки пакетләр фәзада јајылараг дағылыр. зәррәчикләр исә белә хассәјә малик дејилдир.

Електронларын дифраксијасы тәчрүбәләри илә таныш олдугда күрдүк ки, кристалдан сәпилән електронун фотолөвһәнин бу вә ја башга нөгтәсинә дүшмәси hадисәси тәсадүфи характер дашыјыр. Јалныз белә hадисәләрин чохлу сајда тәкрары дифраксија мәнзәрәсини верир. Бу исә көстәрир ки, електронларын фотолөвһәдә пајланмасы статистик ганунлара табедир вә бу пајланма hәр hансы пајланма функсијасы васитәсилә характеризә олунмалыдыр. Бүтүн бунлары нәзәрә алараг Макс Борн Ψ-функсијаны статистик мә'налановырмағы тәклиф етмишди (1926-чы ил). М.Борна көрә бахылан анда фәзанын hәр hансы бир јериндә де-Бројл далғасынын $|\Psi(x,t)|^2$ интенсивлији зәррәчијин hәмин јердә олма еhтималы илә мүтәнасибдир. Башга сөзлә, $|\Psi(x,t)|^2 dV$ кәмијјәти зәррәчијин t анында (x) нөгтәси әтрафында көтүрүлмүш $dV = dxdydz = (dx)$ елементар фәза hәчминдә олма еhтималы илә мүтәнасиб олмалыдыр:

$$dW(x,t) \sim |\Psi(x,t)|^2 dV \tag{4.1}$$

вә ја

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

бурада $\Psi^*(x,t)$—Ψ-функсијаја комплекс гошма функсијадыр, C—мүтәнасиблик әмсалыдыр.

Беләликлә, Ψ-функсијанын өзү үмумијјәтлә комплекс кәмијјәтдир вә hеч бир физики мә'наја малик дејилдир, јалныз онун модулунун квадраты $|\Psi(x,t)|^2$ физики мә'на кәсб едир. Она көрә дә Ψ-функсијанын тәсвир етдији саһә классик физикада мә'лум олан електромагнит вә акустик саһәләр кими реал саһәләрдән кәскин фәргләнир. Де-Бројл далғалары саһәси ријази мәфhумдан башга бир шеј дејилдир.

Ψ-функсијанын статистик мә'насындан алыныр ки, онун үчүн ашағыдакы мүнасибәтләр өдәнилмәлидир.

1) Зәррәчијин фәзанын мүхтәлиф јерләриндә олма hадисәләри бир-бирини инкар едән hадисәләр олдуғундан, онун t анында фәзанын hәр hансы бир нөгтәсиндә олма hадисәси лабүд hадисәдир (лабүд hадисәнин еhтималы ваhидә бәрабәрдир) вә онун еhтималы, еhтималларын топланмасы теореминә әсасән, (4.1) бәрабәрлијиндән бүтүн фәза үзрә көтүрүлмүш

$$\int dW(x,t) = \int W(x,t)dV = C\int \Psi'^*(x,t)\Psi'(x,t)(dx) = 1 \tag{4.2}$$

интегралы илә тә'јин олунур. (4.2) бәрабәрлији еhтималын **нормаланма шәрти** адланыр. Бу шәрти өдәјән далға функсијаларына **нормаланмыш функсијалар** дејилир.

2. Нормаланмыш функсијалар үчүн (4.1) бәрабәрлијини

$$dW = w(dx) = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)(dx) \tag{4.3}$$

кими јазмаг олар, бурада $\Psi(x,t) = \sqrt{C}\Psi'(x,t)$ вә

$$w = \Psi^*\Psi = |\Psi|^2 \tag{4.4}$$

еhтимал сыхлығы адланыр.

3. (4.2) нормаланма шәртиндән чыхыр ки, Ψ далға функсијасы модулу ваhидә бәрабәр олан $e^{i\alpha}$ вуруг дәгиглији илә тә'јин олунур, бурада α – координатларын вә заманын ихтијари һәгиги функсијасыдыр:

$$\Psi' = e^{i\alpha}\Psi \tag{4.5}$$

бурадан

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

олдуғундан, бу вуруг квант механикасында алынан нәтичәләрә hеч бир тә'сир көстәрмир.

4. Бә'зи hалларда далға функсијасы модулунун квадраты $|\Psi|^2$ сонсуз узагда көтүрүлмүш нөгтәдә сыфра бәрабәр олмур. Бу заман $\int|\Psi|^2(dx)$ интегралы дағылыр вә $|\Psi(x,t)|^2$ ифадәси зәррәчијин t анында (x) нөгтәсиндә олма еhтималы сыхлығыны характеризә етмир. Онун мүхтәлиф нөгтәләрдә көтүрүлмүш гијмәтләринин нисбәти сонлу галдығындан, бу нисбәт мүәјјән мә'на кәсб едир вә о **нисби еhтимал** адланыр.

Јухарыда далға функсијасынын физики маhијјәтини ајдынлашдырдыгда фәрз етмишдик ки, квант механики систем јалныз бир зәррәчикдән тәшкил олунмушдур. Чохлу зәррәчикләр системини тәсвир едән Ψ-функсија үчүн дә квант механикасында hәмин физики мә'на сахланыр. Ахырынчы hалда далға функсијасы N зәррәчијин координатларындан вә замандан асылы олур (фәрз олунур ки, зәррәчикләрин hамысы үчүн заманын кедиши ејнидир):

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

Онда

$$dW=\left|\Psi(x,t)\right|^2 (dx_1)(dx_2)...(dx_N) \qquad (4.6)$$

ифадәси биринчи зәррәчијин $(dx_1)=dx_1dy_1dz_1$ елементар һәчминдә, икинчи зәррәчијин $(dx_2)=dx_2dy_2dz_2$ елементар һәчминдә вә и.а. ејни заманда олма еһтималыны ифадә едир. (4.6) еһтималы мә'лум оларса, шәрти еһтимал анлајышындан истифадә едәрәк, башга зәррәчикләрин истәнилән вәзијјәтләриндә, мәсәлән, биринчи зәррәчијин (dx_1), һәчминдә олма еһтималы

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

шәклиндә олар. Буна охшар ифадәләр дикәр зәррәчикләр үчүн дә јазыла биләр.

Мүрәккәб системләрин далға функсијасы үчүн дә (4.2)–(4.5) шәртләри өдәнилир. Мәсәлән, онларын нормаланма шәрти

$$\int\Psi^*\Psi d(x)=\int\Psi^*\,(x_1y_1z_1,...,x_Ny_Nz_N,t)\;\Psi(x_1,...,z_N,t)(dx_1)...(dx_N)=1 \qquad (4.7)$$

олур. Бу вә буна охшар интегралларын һесабланмасы үчүн $3N$ дәјишәндән асылы функсијанын ифадәси мә'лум олмалы, јә'ни $3N$ өлчүлү фәзада онун гијмәти верилмәлидир. Белә фәзалар физики реаллыг олмајыб, ријази мәфһумдур. $3N$ өлчүлү координатлар фәзасы **конфигурасија фәзасы** адланыр. Беләликлә (4.6) вә (4.7) ифадәләринә, ујғун олараг, конфигурасија фәзасында верилмиш еһтимал вә нормаланма шәрти кими бахмаг лазымдыр.

Зәррәчикләр системинин далға функсијасынын дахил едилмәси, ону електромагнит вә акустик далғалара охшар реал далғалары тәсвир едән бир функсија кими мә'наландырмағын гејри-мүмкүн олдуғуну әјани шәкилдә нүмајиш етдирир. Доғрудан да, реал фәзада јајылан далғавары просес үч дәјишән координатла вә заманла характеризә олунур. Мүрәккәб системин далға функсијасы исә $3N$ координатдан асылы олдуғундан, о, өлчүсү $3N$ олан фәзада јајылан далғаны тәсвир едәр. Белә далғаларын һәгигәтән мөвчуд олдуғуна һөкм вермәк, конфигурасија фәзасынын реаллығыны гәбул етмәк вә ја да бир зәррәчикли систем илә зәррәчикләр системинин далға функсијаларынын ејни бир физики мә'наја малик олмасы иддиасындан әл чәкмәк лазым оларды. Бунларын һәр икиси исә тәчрүби фактлара там зиддир.'

Әксәр һалларда бир зәррәчикдән ибарәт квант механики системин Ψ-функсијасынын аналитик ифадәсини тапмаг мүмкүн олур (IV–X фәсилләрә бах). N гаршылыглы тә'сирдә олан зәррәчикләр системини тәсвир едән далға функсијасынын аналитик ифадәсини тапмаг мәсәләси исә һәлә индијә гәдәр үмуми шәкилдә һәлл олунмамышдыр. Лакин фәрз етсәк ки, зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сир кифајәт гәдәр зәифдир вә биринчи јахынлашмада системә гаршылыглы тә'сирдә олмајан

зәррәчикләр системи кими бахмаг олар, онда системин Ψ-функсијасынын тапылмасы мәсәләси, бир зәррәчикли системин далға функсијасынын тапылмасы мәсәләсинә кәтирилир.

Гаршылыглы тә'сирдә олмајан зәррәчикләр системиндә i-чи зәррәчијин (dx_i), k-чы зәррәчијин (dx_k) вә и.а. елементар фәза һәчмләриндә олма һадисәләри асылы олмајан һадисәләр олдуғундан, белә һадисәләрин ејни заманда мүшаһидә олунма еһтималы, еһтималларын вурулмасы теореминә көрә, онларын ајрылыгда мүшаһидә олунма еһтималлары һасилинә бәрабәрдир:

$$dW= dW_1\, dW_2...\, dW_N. \qquad (4.8)$$

Дикәр тәрәфдән (4.1)-ә көрә i-чи зәррәчијин (dx_i) елементар һәчмдә олма еһтималы

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

бәрабәр олдуғундан (i=1,2,...,N), (4.8) ифадәсини

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

шәклиндә јазмаг олар. Бу ахырынчы ифадәдән көрүнүр ки, N гаршылыглы тә'сирдә олмајан зәррәчикләр системинин далға функсијасыны

$$\Psi(x,t)=\Psi_1(x_1,t)\;\Psi_2(x_2,t)...\;\Psi_N(x_N,t) \qquad (4.9)$$

шәклиндә јазмаг олар.

§ 5. СУПЕРПОЗИСИЈА ПРИНСИПИ

Оптикада вә акустикада далғаларын интерференсијасы вә далға пакетләринин әмәлә кәлмәси, билдијимиз кими, суперпозисија принсипинә әсасән изаһ олунур. Дифраксија золагларынын вә ја һәлгәләринин бахылан нөгтәдәки интенсивлији һәмин нөгтәјә дүшән далғаларын хәтти суперпозисијасынын нәтичәси кими һесабланыр. Истәнилән тәбиәтли далғалар үчүн доғру олан бу принсипи де-Бројл далғалары үчүн дә сөјләмәк олар.

Оптикада вә акустикада суперпозисија принсипи бир һипотез кими гәбул олунур. Квант механикасында исә ону далға функсијасынын статистик мә'насындан бир нәтичә кими чыхармаг олур. Бу ахырынчы иддиа үзәриндә мүфәссәл дајанаг.

Бор нәзәријјәси илә танышлыг көстәрди ки, микросистемләрин һалы һәм кәсилмәдән вә һәм дә дискрет дәјишә биләр. Мулаһизәләримизин садәлији хатиринә фәрз едәк ки, бахылан микросистемин һалы дискрет дәјишир вә онлары 1,2,3,... n кими нөмрәләмәк олар. Де-Бројлун тәклифинә көрә далғавары механикада (квант механикасында) микросистемә координат вә замандан асылы $\Psi(x,t)$ -далға функсијасы гаршы гојулур. Системин далға функсијасы мә'лум оларса, о, бахылан систем һаггында там мә'лумат алмаға, јә'ни, сонра көрәчәјимиз кими, онун енержисини, импулсуну, һәрәкәт мигдары моментини вә системин һалыны тә'јин едән башга физики кәмијјәтләри һесабламаға имкан верир. Бу мә'нада Ψ -функсија системин һалыны там вә биргијмәтли тә'јин едир, јә'ни мүәјјән бир функсијаја системин јеканә бир һалы ујғун кәлир. Бу иддиаја әсасән, системин ала биләчәк 1,2,3,... n һаллар ардычыллығына ујғун далға функсијалар чохлуғуну Ψ_1, Ψ_2,..., Ψ_N вә системин бу һалларынын еһтималларыны W_1, W_2,..., W_N илә ишарә едәк.

Системин бу һалларын һансына малик олдуғу бизә мә'лум олмаја да биләр. Үмумијјәтлә, бу елә дә мүһүм дејилдир. Вачибдир ки, систем мүмкүн олан һалларын һәр һансы биринә малик олсун. Системин мүәјјән һала малик олмасыны һадисә адландырсаг, онун 1,2,... n һалларында олма һадисәләр ардычыллығы бир-бирини инкар едән һадисәләр чохлуғу тәшкил едир. Еһтималларын топланмасы теореминә әсасән, системин јухарыдакы һалларын һәр һансы бириндә (фәрги јохдур һансында) олма еһтималы, һалларын һәр биринә ајрылыгда малик олма еһтималлары чәминә бәрабәрдир:

$$W=W_1+W_2+\ldots+W_N. \tag{5.1}$$

Белә һадисә лабүд һадисә олдуғундан, бу чәм ваһидә бәрабәр олмалыдыр:

$$W=\sum_i W_i=1. \tag{5.1'}$$

Белә W еһтималы **там еһтимал** адланыр.

Бурадан, системин там еһтималла верилән һалына ујғун далға функсијасыны тапмаг мәсәләси мејдана чыхыр. Көстәрәк ки, бу функсијаны (5.1)-ә әсасән ашағыдакы кими јазмаг олар:

$$\Psi(x,t)=C_1\Psi_1(x,t)+C_2\Psi_2(x,t)+\ldots+C_N\Psi_N(x,t)=\sum_i C_i\Psi_i(x,t), \tag{5.2}$$

бурада C_1, C_2, ... — ихтијари сабитләрдир.

Функсијанын бу шәклә малик олачағыны електронларын дифраксијасы тәчрүбәләриндән дә баша дүшмәк олар. Бундан өтрү електронларын ики јарыгдан дифраксијасына бахаг. Сәпилән електронун онун јолуна перпендикулјар гојулмуш екранын мүәјјән бир нөгтәсинә дүшмә еһтималы, јухарыдакы мүлаһизәләрә көрә, бу јарыглардан јајылан далғаларын һәмин нөгтәдә јаратдыглары $\Psi=\Psi_1+\Psi_2$ јекун амплитуду илә тә'јин олунар: $W\sim|\Psi(x,t)|^2$, белә ки, бахылан нөгтәјә дүшән електрон ја биринчи вә ја икинчи јарыгдан кечмиш олур.

(5.2)-дән там еһтималлы һалын еһтимал сыхлығы үчүн

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

там еһтимал үчүн исә

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

алынар.

Далға функсијасынын статистик мә'насына әсасән (5.3)-дә биринчи чәм алтындакы интеграл, i һалына малик системин бахылан фәзанын һәр һансы бир нөгтәсиндә олма еһтималыны ифадә едир. Јәгин ки, белә һадисә лабүд һадисәдир вә онун еһтималы ваһидә бәрабәрдир:

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

Һәмин ифадәнин икинчи чәми алтындакы интеграл исә, буна охшар олараг, i вә k һалларында олан системин ејни заманда фәзанын һәр һансы бир нөгтәсиндә олма еһтималыны характеризә едәр. Лакин систем ејни заманда ики мүхтәлиф һалда ола билмәдијиндән, јәгин ки, белә еһтимал сыфра бәрабәрдир:

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

(5.4) мүнасибәти Ψ_i -функсијасынын нормаланма шәрти, (5.5) мүнасибәти исә ортогоналлыг шәрти адланыр. Бу ики шәрти

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

кими дә јазмаг олар. (5.6) мүнасибәти далға функсијаларынын ортонормаллыг шәрти адланыр, бурада

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

Кронекер символудур.

(5.3) мүнасибәтилә верилән там еһтималын лабүд һадисәнин еһтималы олдуғуну нәзәрә алсаг, (5.4) вә (5.5)-ә әсасән

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

алырыг. (5.1) вә (5.8) бәрабәрликләринин мүгајисәсиндән чыхыр ки,

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

системин i һалынын (һалында олма) еһтималыдыр.

C_i әмсаллары үчүн бу сон иддианын доғру олдуғуну гәбул етсәк, (5.2) илә верилмиш $\Psi(x,t)$ функсијасы там еһтималлы һалын далға функсијасы олур вә (5.2) бәрабәрлијинин өзү исә квант механикасында *суперпозисија принсипи* адланыр.

Системин һалы кәсилмәдән дәјишдикдә (5.2) бәрабәрлијиндә һалын индекси олан i үзрә ҹәм, һалы характеризә едән вә кәсилмәдән дәјишән һәр һансы L физики кәмијјәти үзрә көтүрүлмүш интегралла әвәз олунур.

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

бурада $\Psi_L(x,t)$ — L-ин верилмиш гијмәтинә ујғун һалын далға функсијасыдыр. (5.10) ифадәси кәсилмәз спектр үчүн суперпозисија принсипи олур. Суперпозисија принсипинин физики маһијјәтинә кәлдикдә ону белә ифадә етмәк олар: квант механики систем Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3,... функсијалары илә тә'јин олунан һалларда ола биләрсә, о, (5.2) вә ја (5.10) илә верилмиш $\Psi(x,t)$ функсијасы илә тәсвир олунан һалда да ола биләр. Суперпозисија принсипи квант механикасынын әсас принсипләриндәндир. Хүсуси һалда ондан бир нәтиҹә олараг чыхыр ки, Ψ-функсијанын өдәдији бүтүн тәнликләр хәтти диференсиал тәнликләр олмалыдыр.

Доғрудан да, хәтти диференсиал тәнликләр нәзәријјәсиндән мә'лумдур ки, $f_1(x)$, $f_2(x)$,... функсијалары хәтти диференсиал тәнлијин хүсуси һәлләридирсә, онларын ихтијари комбинасијасы олан

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

функсијасы да һәмин тәнлијин (үмуми) һәллидир, бурада a_1, a_2,... ихтијари сабитләрдир. (5.11) вә (5.2) мүнасибәтләри исә тамамилә еквивалентдир.

(5.2) вә (5.9) ифадәләриндән көрүнүр ки, квант механикасында суперпозисија принсипи классик механикадакы суперпозисија принсипиндән кәскин фәргләнир. Доғрудан да, классик механикада $f(x)$ функсијасы илә характеризә олунан ики ејни рәгси топладыгда амплитуду 2 дәфә бөјүк олан јени рәгс алыныр. Квант механикасында исә $\Psi(x,t)$ функсијасы илә ону ихтијари C сабитинә вурмагла алынан $C\Psi(x,t)$ функсијасы мүхтәлиф һаллары јох, системин ејни бир һалыны характеризә едир.

Беләликлә, классик механикада суперпозисија принсипи далғаларын амплитудларынын суперпозисијасыны ифадә едирсә, квант механикасында о, системин квант һалларынын суперпозисијасыны ифадә едир.

§ 6. ОПЕРАТОРЛАР ВӘ ОНЛАРЫН ӘСАС ХАССӘЛӘРИ

а) **Оператор анлајышы**. Оператор дедикдә, үмуми шәкилдә, ихтијари $f(x)$ функсијасыны башга бир $\varphi(x)$ функсијасына чевирән әмәлијјат баша дүшүлүр. Оператору $\breve{L}$ илә ишарә етсәк, бу әмәлијјат

$$\varphi(x) = \breve{L}\, f(x) \qquad (6.1)$$

кими јазылыр. Операторун функсијаја тә'сири онларын һасили кими јазылыр вә бу һасилдә функсија һәмишә оператордан сағда дајаныр.

Операторун физикаја дахиледилмә зәруријјәтинә вә онун тә'сир ганунуна ашағыдакы шәкилдә кәлмәк олар. Фәрз едәк ки, системин һалыны характеризә едән һәр һансы L физики кәмијјәти тәҹрүбәдә өлчүлән заман онун үчүн N_1 дәфә L_1 гијмәти, N_2 дәфә L_2 гијмәти вә и.а. алынмышдыр.

Системин бахылан һалыны характеризә едән физики кәмијјәтин дәгиг гијмәтинә јахын гијмәт, јәгин ки, онун әдәди орта гијмәтидир. Ахырынчыны $L_ә$ кими ишарә етсәк,

$$L_ә = \frac{N_1 L_1 + N_2 L_2 + \ldots + N_n L_n}{N_1 + N_2 + \ldots + N_n} = \frac{N_1 L_1 + N_2 L_2 + \ldots + N_n L_n}{N}$$

олар.

Өлчүләрин сајы бөјүк олдугча L-ин әдәди орта гијмәти онун дәгиг гијмәтинә даһа чох јахын олар. Өлчүләрин сајыны сонсуз бөјүк көтүрдүкдә исә ($N \to \infty$) $L_ә$ әдәдинин лимит гијмәти

$$\lim_{N\to\infty} L_ә = \lim_{N\to\infty} \frac{N_1}{N} L_1 + \lim_{N\to\infty} \frac{N_2}{N} L_2 + \ldots + \lim_{N\to\infty} \frac{N_n}{N} L_n$$

шәклиндә тә'јин олунар.

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

апарылан өлчү заманы L үчүн L_i гијмәтинин алынмасы еһтималы олдуғундан

$$\lim_{N\to\infty} L_ә = \bar{L} = W_1 L_1 + W_2 L_2 + \ldots + W_n L_n = \sum_i W_i L_i \qquad (6.2)$$

олар. L-ин бу ҹүр тә'јин олунмуш $\bar{L}$ гијмәти **статистик орта гијмәт** адланыр.

L физики кәмиjјәтинин мүхтәлиф гиjмәтләри системин уjғун һалларыны характеризә етдиjиндән W_i -jә системин i һалынын еһтималы кими дә бахмаг олар. Дикәр тәрәфдән (5.9)-а көрә системин i һалынын еһтималы $C_i^* C_i$ -jә бәрабәр олдуғундан, (6.2) мүнасибәти

$$\bar{L} = \sum_i C_i^* C_i L_i \tag{6.3}$$

шәклиндә дә jазыла биләр.

Инди дә операторун тә'сир ганунуну тапаг. Бунун үчүн (6.3) ифадәсини елә шәкилдә jазаг ки, L-ин статистик орта гиjмәти, квант механики системин далға функсиjасынын (5.2) сырасына дахил олан C_i әмсаллары илә jox, Ψ- функсиjанын өзү илә ифадә олунсун.

Бунун үчүн L физики кәмиjјәтинә уjғун оператору $\breve{L}$ илә ишарә едиб $\breve{L}$-нин бахылан системин $\Psi(x,t)$ -далға функсиjасына тә'сирини

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

кими тә'jин едәк. $\Psi^*(x,t)$ вә $\Psi(x,t)$ -функсиjаларынын (5.2) илә верилмиш ифадәләри әсасында көстәрмәк олар ки, (6.4) бәрабәрлиjи (6.3) бәрабәрлиjинә там еквивалентдир. Доғрудан да, (6.4)-дә $\Psi(x,t)$ вә $\Psi^*(x,t)$-ни уjғун (5.2) сыралары илә әвәз етсәк

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

алынар. (6.5) вә (6.3) ифадәләринин мүгаjисәсиндән көрүнүр ки, онларын бир-биринин үзәринә дүшмәси үчүн

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

вә jа

$$\breve{L} \Psi_k = L_k \Psi_k . \tag{6.6'}$$

Системин һалы кәсилмәдән дәjиширсә (5.10) -а әсасән (6.6) тәнлиjи

$$\breve{L} \Psi_L = L \Psi_L \tag{6.6''}$$

шәклиндә jазылыр.

Бурада L_k сабит әдәд олуб, L физики кәмиjјәтин системин k һалындакы гиjмәтидир. (6.6′) вә (6.6″) бәрабәрликләри һәр истәнилән Ψ_k вә Ψ_L функсиjалары үчүн өдәнилмир, jә'ни онлар еjнилик олмаjыб тәнликдир.

Һәр һансы $\breve{L}$ оператору үчүн (6.6′) вә (6.6″) тәнликләри өдәнилдикдә L_k вә jа L кәмиjјәти операторун мәхсуси гиjмәти, Ψ_k вә jа Ψ_L функсиjалары исә онун мәхсуси функсиjалары адланыр.

Систем L операторунун Ψ_i мәхсус функсиjасы илә тә'jин олунан һалда оларса, (5.2) сырасында jалныз бир $\Psi = C_i \Psi_i$ һәдди галыр вә (6.4) бәрабәрлиjи (6.6′) тәнлиjинә вә (5.4) шәртинә әсасән

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

шәклинә дүшүр. Бурада $C_i^* C_i = 1$ олдуғундан $\bar{L} = L_i$ алыныр. Демәли, бахылан һалда L физики кәмиjјәтинин $\bar{L}$ орта гиjмәти онун дәгиг L_i гиjмәти үзәринә дүшүр. Бу о демәкдир ки, бу һалда L кәмиjјәти үчүн өлчүлән гиjмәт һәр дәфә L_i-jә бәрабәр олачаг.

Системин һалы мәхсуси функсиjаларын һеч бири үзәринә дүшмәjән ихтиjари $\Psi(x,t)$ функсиjасы илә тәсвир олунурса, jә'ни системин мүмкүн олан һаллардан һансында олдуғу мә'лум деjилсә, L үчүн өлчүлән гиjмәт һәр дәфә $\breve{L}$ операторунун мәхсуси гиjмәтләринин һәр һансы биринин үзәринә дүшәр. Бу һалда (6.3) вә jа (6.5) ифадәсиндә $C_i^* C_i$ (i=1,2,...) һасилләринин һансынын сыфырдан фәргли олдуғу мә'лум олмадығындан L-ин jалныз (6.3) илә тә'jин олунан $\bar{L}$ орта гиjмәтинин мә'насы олур. Дикәр тәрәфдән (6.4) бәрабәрлиjинин сағ тәрәфини о вахт орта гиjмәт мә'насыны дашыjан шәкилдә jазмаг олар ки, Ψ үчүн

$$\breve{L} \Psi = L \cdot \Psi \tag{6.7}$$

тәнлиjи өдәнилсин. Доғрудан да (6.7)-jә әсасән

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

алынар. Белә ки, $w = \Psi^* \Psi$, jухарыда дедиjимиз кими, еһтимал паjланмасы сыхлығыдыр.

Ψ-функсиjа (5.2) вә jа (5.10) сырасы шәклиндә jазыла биләрсә, (6.7) тәнлиjинин һәлли заманы L үчүн jеканә бир гиjмәт jox, бүтүн мүмкүн олан гиjмәтләр чохлуғу алынмалыдыр. L -ин мәхсуси гиjмәтләр чохлуғу $\{L_i\}$-jә онун *спектри* деjилир.

Бу чохлуг саjыла билән ардычыллыг тәшкил етдикдә *дискрет спектр*, кәсилмәдән дәjишән ардычыллыг тәшкил етдикдә исә *кәсилмәз спектр* адланыр. Еjни шәкилдә (6.7) тәнлиjинин һәллиндә Ψ үчүн $\{\Psi_i\}$ вә jа $\{\Psi_L\}$ функсиjалар чохлуғу алыныр вә онлар Ψ-нин, уjғун олараг, дискрет вә бүтөв спектрләрини тәшкил едир. Геjд едәк ки, (6.7) тәнлиjинин һәлли олан $\Psi(x,t)$ функсиjасы, физики тәләбләрдән чыхан ашағыдакы үч шәрти өдәмәлидир. О, аргументләринин бүтүн дәјишмә областында сонлу, биргијмәтли, өзү вә онун биринчи тәртиб төрәмәләри кәсилмәз олмалыдыр.

$\breve{L}$ истәнилән физики кәмијјәтә ујғун оператор олдуғундан (5.2) вә (5.10) ифадәләринә системин ихтијари функсијасынын истәнилән операторун мәхсуси функсијалары үзрә көтүрүлмүш сыралары кими бахмаг олар. Системин ихтијари функсијасы дедикдә $\{\Psi_L\}$ вә ја $\{\Psi_i\}$ функсијалар чохлуғундан һәр һансы бири баша дүшүлүр. Мәсәлән, Ψ_i үчүн (5.2) ифадәси

$$\Psi_i = \sum_k a_{ik}\varphi_k \tag{5.2'}$$

шәклиндә јазылар, бурада $\{\varphi_k\}$, мәсәлән, һәр һансы бир $\breve{G}$ операторунун мәхсуси функсијаларынын там чохлуғу олмалыдыр.

Системин ихтијари функсијасыны (5.2) вә ја (5.2′) шәклиндә ифадә етмәјә имкан верән Ψ_i (вә ја φ_k) функсијалар системинә **там систем** дејилир ((8.18) ифадәси там системлијин ријази шәртидир, бах §8).

Операторун мүхтәлиф мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијалары фәргләндирмәк үчүн кәсилмәз спектр һалында ја далға функсијасынын сағ тәрәфиндә ашағыдан физики кәмијјәтин ишарәси јазылыр $\Psi_L(x,t)$ вә ја һәмин функсија $|L>$ кими ишарә олунур. Дискрет спектр һалында мәхсуси гијмәтләри $L_1, L_2,..., L_n$ кими нөмрәләмәк мүмкүн олдуғундан, функсија $\Psi_{Li}(x,t)$ әвәзиндә садәчә ја $\Psi_i(x,t)$ вә ја да $|i>$ шәклиндә јазылыр.

Бә'зән физики кәмијјәтин мүәјјән $L=L_i$ гијмәтинә хәтти асылы олмајан бир нечә мәхсуси функсија, јә'ни системин бир нечә мүхтәлиф һалы ујғун кәлир. Системин белә һалларына **чырлашмыш һаллар**, функсијаларын сајына исә бу һалын **чырлашма дәрәчәси** дејилир. Чырлашма һалын далға функсијалары $\Psi_{i1}, \Psi_{i2},..., \Psi_{if}$ кими ики индексләтәчһиз олунур. Бурада f һалын чырлашма дәрәчәсини көстәрән индексдир. Ψ_{if} - функсијалары үмумијјәтлә гаршылыглы ортогонал олмур. Онларын хәтти комбинасијасы олан

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

функсијалары да L_i- јә ујғун мәхсуси функсијалар олар. Һалын чырлашма дәрәчәси сонлу олдугда φ_i -функсијаларыны ортонормаллашдырмаг олур. $\Psi_{i\alpha}$ функсијаларынын α индексинә көрә $\{\Psi_{i\alpha}\}$ чохлуғу һәр һансы башга бир $\breve{G}$ операторунун мәхсуси функсијалар спектрини тәшкил едәрсә, јә'ни онлар үчүн

$$\breve{G}\,\Psi_{i\alpha} = G_\alpha \Psi_{i\alpha}$$

тәнлији едәрсә (бурада $G_\alpha - \breve{G}$ операторунун мәхсуси гијмәтидир). $\Psi_{i\alpha}$ функсијалары үчүн α индексинә көрә

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

ортонормаллашма шәрти өдәнилдији заман $\varphi^*_i\varphi_i$ һасилиндән көтүрүлмүш

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

интегралы L_i -ин верилмиш гијмәтиндә G_α -нын мүмкүн гијмәтләриндән истәнилән бирини алма еһтималыны верир.

б) Квант механикасында истифадә олунан операторлар.

Квант механикасында истифадә олунан операторлар, суперпозисија принсипинин өдәнилмәси үчүн јалныз хәтти операторлар олмалыдыр; јә'ни онлар

$$\breve{L}(a\Psi + b\varphi) = a\breve{L}\Psi + b\breve{L}\varphi \tag{6.9}$$

шәртини өдәмәлидир: a вә b – ихтијари сабитләрдир.

Операторларын хәттилији зәрури шәрт олуб, кафи шәрт дејилдир. Она көрә операторлар үзәринә гојулан дикәр мәһдудијјәтләр үзәриндә дајанаг.

Хәтти операторлар адәтән комплекс олдуғундан, онларын мәхсуси гијмәтләри дә үмуми һалда комплекс олур. Системин һалыны характеризә едән физики кәмијјәтләрин алдығы гијмәтләр исә һәмишә һәгигидир. Беләликлә биз елә хәтти операторлар синфи сечмәлијик ки, онларын мәхсуси гијмәтләри һәгиги олсун. Бунун үчүн физики кәмијјәтин орта гијмәтинин һәгиги олмасы шәртиндән истифадә едәк:

$$\bar{L} = \left(\bar{L}\right)^*. \tag{6.10}$$

(6.4) әсасән бу шәрти

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

кими дә јазмаг олар. Лакин асанлыгла көстәрмәк олар ки, һәр хәтти оператор үчүн (6.10′) шәрти өдәнилмир. Доғрудан да, Ψ функсијаны (2.3) мүстәви де-Бројл далғасы шәклиндә көтүрсәк, мәсәлән $\breve{L} = \dfrac{\partial}{\partial x}$ хәтти оператору үчүн (6.10′) шәрти өдәнилмир. Дикәр тәрәфдән, ријазијјатдан мә'лумдур ки, һәр бир хәтти $\breve{L}$ оператора

$$\int \Phi\breve{L}\varphi(dx) = \int \varphi\tilde{\tilde{L}}\,\Phi(dx) \qquad (6.11)$$

бәрабәрлијини өдәјән $\tilde{\tilde{L}}$ **транспозисија олунмуш** оператор гаршы гојула биләр. Бу ахырынчы бәрабәрликдә $\Phi = \Psi^*$, $\varphi = \Psi$ көтүрүб, ону (6.10′) илә мүгајисә етсәк,

$$\tilde{\tilde{L}}\,\Psi = \breve{L}^*\Psi \text{ вә ја } \tilde{\tilde{L}} = \breve{L}^* \qquad (6.12)$$

алынар. Бу шәрти өдәјән операторлар *ермит операторлар* адланыр. Демәли, операторларын мәхсуси гијмәтләринин (јә'ни физики кәмијјәтләрин) һәгигилијини тә'мин етмәк үчүн квант механикасында истифадә олунан операторлар јалныз ермит операторлар олмалыдыр.

Лакин бә'зи һалларда ријази олараг гејри-ермит операторлардан да истифадә едилир. Белә операторларын мәхсуси гијмәтләри, јухарыда гејд етдијимиз кими, комплекс олур. Һәр бир комплекс L кәмијјәтинә комплекс гошма L^* кәмијјәти гаршы гојулур. Көрәсән, һәр бир гејри-ермит оператора еквивалент гошма оператор гаршы гојмаг олармы?

Гејри-ермит $\breve{L}$ операторунун мәхсуси гијмәти L, она гошма $\breve{L}^+$ операторунун мәхсуси гијмәти L^* оларса, онлар (6.7)-јә әсасән

$$\breve{L}\Psi = L\cdot\Psi$$
$$\breve{L}^+\Psi = L^*\cdot\Psi \qquad (6.12')$$

тәнликләри илә тә'јин олунар.

Системин Ψ үмуми функсијасы үчүн һәмишә (5.8) нормалланма шәрти өдәнилдијиндән, (6.12′) тәнликләрини сол тәрәфдән Ψ^*-ја вуруб, бүтүн фәза үзрә интегралладыгда

$$L = \int \Psi^*\breve{L}\Psi(dx),$$
$$L^* = \int \Psi^*\breve{L}^+\Psi(dx) \qquad (6.12'')$$

бәрабәрликләри алынар. Комплекс гошма әдәдләрин

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

хассәсинә көрә бу ахырынчы бәрабәрлији (6.12″)-дән

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

кими дә јазмаг олар. (6.11) шәртинә көрә һәр бир хәтти оператора транспозисија олунмуш оператор гаршы гојула билдијиндән, јухарыдакы бәрабәрликдә сағда дуран интегралы

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

кими јазмаг олар, онда

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

алынар, башга сөзлә, һәр бир хәтти гејри-ермит оператора ујғун гошма оператор

$$\breve{L}^+ = \tilde{\tilde{L}}^* \qquad (6.13')$$

кими тә'јин олунур. Башга сөзлә. һәр һансы хәтти гејри-ермит оператора ујғун гошма оператор тапмаг үчүн әввәлчә верилмиш оператордан комплекс гошма көтүрүлүр, сонра исә о, транспозисија едилир (јухарыдакы мә'наларда). Бу ики әмәлијјата бирликдә **ермит гошма** дејилир.

(6.13′) бәрабәрлији үмуми характер дашыјыр. О, истәнилән хәтти оператор үчүн доғрудур. Хүсуси һалда фәрз едәк ки, $\breve{L}$ оператору ермит операторудур. Онда (6.12) шәртиндән комплекс гошма көтүрүб, алынан ифадәни (6.13) илә мүгајисә етсәк,

$$\breve{L}^+ = \breve{L} \qquad (6.14)$$

аларыг, јә'ни ермит оператор үчүн гошма оператор операторун өзүнә бәрабәрдир. Белә операторлар **өзүнә гошма** вә ја **ермит гошма** операторлар адланыр.

§ 7. ОПЕРАТОРЛАР ҮЗӘРИНДӘ ӘМӘЛИЈЈАТЛАР

а) Хәтти операторларын топланмасы

Ики $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ хәтти операторун чәми олан $\breve{C}$ оператору елә оператора дејилир ки, $\breve{C}$-нин ихтијари далға функсијасына тә'сир нәтичәси $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын һәмин функсијаја тә'сир нәтичәләри чәминә бәрабәр олсун:

$$\breve{C}\,\Psi = (\breve{L} + \breve{F})\Psi = \breve{L}\,\Psi + \breve{F}\,\Psi \qquad (7.1)$$

Лакин (7.1) чәми heч дә $\breve{C}$ операторунун мәхсуси гијмәтләринин $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын ујғун мәхсуси гијмәтләри чәми кими тә'јин олундуғуну көстәрмир. Үмуми һалда онлар арасында әлагә олмаја да биләр. Бу мәсәлә үзәриндә мүфәссәл дајанаг. $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларына ујғун L вә F физики кәмијјәтләринин системин ејни бир k-һалыны тә'јин етдијини фәрз едәк, јә'ни гәбул едәк ки, $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторлары ејни заманда системин бахылан k һалыны характеризә едән L_k вә F_k мәхсуси гијмәтләринә маликдир. Бу һалын далға функсијасыны $\Psi_k(x,t)$ кими ишарә етсәк, (6.6′) бәрабәрлијинә көрә $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ үчүн

$$\breve{L}\Psi_k = L_k\Psi_k\,;\ \breve{F}\Psi_k = F_k\Psi_k \tag{7.2}$$

тәнликләри өдәниләр. Демәли, Ψ_k функсијасы һәр ики операторун мәхсуси далға функсијасы олур. Белә һалларда дејирләр ки, операторлар үмуми далға функсијасына маликдир.

Бу һалда $\breve{C}$-нин Ψ_k-ја тә'сирини һесаблајаг. (7.1) вә (7.2) -јә әсасән

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

јахуд

$$C_k = L_k + F_k \tag{7.3}$$

алынар. Демәли, бахылан һалда $\breve{C}$-нин мәхсуси гијмәтләри $\breve{L}$ вә $\breve{F}$-ин ујғун мәхсуси гијмәтләри чәминә бәрабәр олур.

Инди дә фәрз едәк ки, $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторлары ејни заманда мәхсуси гијмәтләрә малик дејил, јә'ни L вә F физики кәмијјәтләри системин ејни бир һалыны тә'јин етмир. Әлбәттә бу һалда $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторлары **биркә** далға функсијасына малик олмадығындан $\breve{C}$-нин мәхсуси гијмәтләри илә $\breve{L}$ вә $\breve{F}$-ин мәхсуси гијмәтләри арасында һеч бир әлагә јохдур. Лакин бу һал үчүн дә (7.1) тәнлији өз гүввәсини сахлајыр.

(7.1) бәрабәрлијини солдан $\Psi^*(x,t)$ функсијасына вуруб, бүтүн фәза үзрә интеграллајаг, онда

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

алынар. (6.4) мүнасибәтинә көрә ахырынчыны

$$\bar{C} = \bar{L} + \bar{F} \tag{7.4}$$

шәклиндә јазмаг олар. Демәли, үмуми һалда ики мүхтәлиф $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын чәминә бәрабәр $\breve{C}$ оператору дедикдә елә оператор баша дүшүлүр ки, онлара ујғун физики кәмијјәтләрин орта гијмәтләри үчүн (7.4) бәрабәрлији өдәнилсин.

Операторларын топланма гајдасына әсасән, верилмиш истәнилән гејри-ермит $\breve{L}$ вә она гошма $\breve{L}^+$ операторлардан ермит оператор гурашдырмаг олар.

Көстәрәк ки,

$$\breve{D} = \frac{\breve{L} + \breve{L}^+}{2} \tag{7.5}$$

оператору ермит оператордур. Бунун үчүн ондан ермит гошма көтүрәк:

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

(6.13)-ә әсасән $(\breve{L}^+)^+ = \breve{L}$ олдуғундан $\breve{D}^+ = \breve{D}$ олар, јә'ни $\breve{D}$ ермит оператордур.

Буна охшар олараг

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

операторундан ермит гошма көтүрәк, онда

$$G^+ = \frac{\breve{L}^+ - (\breve{L}^+)^+}{2} = \frac{\breve{L}^+ - \breve{L}}{2} = -\breve{G}. \tag{7.6}$$

Белә $\breve{G}$ оператору **антиермит оператор** адланыр. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, антиермит оператору i-јә (i – хәјали ваһид) вурдугда алынан јени оператор ермит олар.

Нәһајәт гејд едәк ки, топланма гајдасына әсасән хәтти операторлар, чәмдә коммутативлик

$$\breve{L} + \breve{F} = \breve{F} + \breve{L} \tag{7.7}$$

вә ассосиативлик

$$\breve{L} + (\breve{F} + \breve{G}) = (\breve{L} + \breve{F}) + \breve{G} \tag{7.8}$$

хассәләринә маликдир.

б) Хәтти операторларын вурулмасы. Ики $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ хәтти операторун һасили дедикдә елә $\breve{C}$ оператору баша дүшүлүр ки, онун далға функсијасына тә'сир нәтичәси $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын һәмин функсијаја ардычыл тә'сири нәтичәси үзәринә дүшсүн:

$$\breve{C}\Psi = \breve{L}\breve{F}\Psi = \breve{L}(\breve{F}\Psi), \tag{7.9}$$

бурада $\breve{L}\,\breve{F}$ вә ја $\breve{L}(\breve{F})$ јазылышы, Ψ - функсијасына әввәлҹә $\breve{F}$ операторунун, сонра алынан јени $\Psi' = \breve{F}\,\Psi$ функсијасына исә $\breve{L}$ операторунун тә'сир етдијини көстәрир.

(7.9) әмәлијаты заманы операторларын һасилдә верилмиш ардычыллығыны көзләмәк чох мүһүмдүр. Белә ки, хәтти операторлар үчүн $\breve{L}\,\breve{F}$ һасилинин тә'сир нәтиҹәси $\breve{F}\,\breve{L}$ һасилинин тә'сир нәтиҹәсиндән үмумијјәтлә фәрглидир.

Һәр истәнилән ики вә ја чох сајда операторлар һасили үчүн һәмишә $\breve{L}\,\breve{F}\ldots = \ldots\breve{F}\,\breve{L}$ бәрабәрлији өдәнилмир. Бурадан, $\breve{C} = \breve{L}\,\breve{F}\ldots$ операторунун мәхсуси гијмәтләри $\breve{L}, \breve{F}\ldots$ операторларынын мәхсуси гијмәтләри илә һәмишә тә'јин олунмур. Бу мәсәләни јахшы баша дүшмәк үчүн ашағыдакы ики һалы араншдыраг.

1) Тутаг ки, L вә F физики кәмијјәтләри ејни заманда гијмәт ала (өлчүлә) биләр, јә'ни системин ејни бир $|k>$ һалыны тә'јин едир. Бу һалын функсијасыны Ψ_k илә ишарә едиб, онун $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын бирҝә мәхсуси функсијасы олдуғуну, јә'ни онлар үчүн (7.2) тәнликләринин өдәнилдијини нәзәрә алсаг,

$$\breve{L}(\breve{F}\Psi_k) = F_k\breve{L}\Psi_k = L_k F_k\Psi_k \qquad (7.10)$$

олар. Бурада L_k вә F_k - L вә F физики кәмијјәтләринин $|k>$ һалына ујғун гијмәтләридир, она ҝөрә дә

$$\breve{F}\breve{L}\Psi_k = L_k\breve{F}\Psi_k = F_k L_k\Psi_k \qquad (7.10')$$

олар (7.10) вә (7.10′) тәнликләриндән

$$\breve{L}\breve{F}\Psi_k = \breve{F}\breve{L}\Psi_k \quad \text{вә ја} \quad (\breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L})\Psi_k = 0$$

бәрабәрлији алыныр. (5.2)-јә әсасән истәнилән Ψ-функсијасыны Ψ_k функсијаларынын хәтти комбинасијасы шәклиндә ҝөстәрмәк мүмкүн олдуғундан, јәгин ки, $\breve{L}\,\breve{F}$ вә $\breve{F}\,\breve{L}$ операторларынын Ψ-јә тә'сири дә бәрабәр олар:

$$\breve{L}\breve{F}\Psi = \breve{F}\breve{L}\Psi \quad \text{вә ја} \quad (\breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L})\Psi = 0. \qquad (7.11)$$

Ахырынҹы бәрабәрлик шәрти олараг

$$\breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L} = 0 \qquad (7.11')$$

шәклиндә јазылыр. Операторларын коммутативлији вә ја јердәјишмәси адланан бу бәрабәрлик $\left[\breve{L}\breve{F}\right] = \breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L}$ кими ишарә олунур вә о

$\left[\breve{L}\breve{F}\right] = -\left[\breve{F}\breve{L}\right]$ хассәсинә маликдир. Һәр һансы ики оператор үчүн (7.11) шәрти өдәнилирсә, бу операторлар бир-бирилә **коммутасија** едир. Беләликлә, **ики физики кәмијјәт ејни заманда гијмәт ала (өлчүлә) билирсә, онлара ујғун операторлар бир-бирилә коммутасија едир.** Бунун әкс теореми дә доғрудур: истәнилән ики оператор бир-бирилә коммутасија едирсә, онлар ејни бир мәхсуси функсијаја маликдир вә онлара ујғун физики кәмијјәтләр ејни заманда өлчүлә биләр.

Гејд едәк ки, һәр һансы әдәдә дә хәтти оператор кими бахмаг олар. Онун функсијаја тә'сири функсијанын әдәдә вурулмасына ҝәтирир. Лакин әдәдин дикәр операторлардан фәрги ондадыр ки, о, бүтүн операторларла коммутасија едир.

2) Инди дә L вә F физики кәмијјәтләринин ејни заманда өлчүлә билмәдијини фәрз едәк. Бу һалда $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын һасилинә бәрабәр олан $\breve{C} = \breve{L}\breve{F}$ оператору һеч бир физики кәмијјәтә ујғун ҝәлмәдијиндән, ермит вә ја өзүнә гошма оператор дејилдир. Беләликлә $\breve{C}$ оператору **гејри-ермит** оператор олур вә онун мәхсуси гијмәтләри һасилә дахил олан операторларын мәхсуси гијмәтләри һасили илә тә'јин олунмур. Гејри-ермит операторларын мәхсуси гијмәтләри адәтән комплекс әдәдләр олдуғундан, она гошма операторун тапылмасы мәсәләси мүәјјән әһәмијјәт кәсб едир.

Бунун үчүн бахылан оператора ујғун транспозисија едилмиш (етмиш) операторун (6.11) тә'јининдән истифадә едәк:

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

вә ја

$$\int \Phi\breve{L}\breve{F}\Psi(dx) = \int \Psi\,\widetilde{(\breve{L}\breve{F})}\Phi(dx). \qquad (7.12)$$

Ахырынҹы бәрабәрликдә солдакы интегралын шәклини дәјишәк. Бунун үчүн $\varphi = \breve{F}\Psi$ ҝөтүрүб, $\breve{L}$-ә ујғун транспозисија едилмиш оператору тә'јин едәк:

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

Инди дә $f = \tilde{\breve{L}}\Phi$ ҝөтүрүб, $\breve{F}$-ә ујғун транспозисија операторуну јазаг:

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

(7.12), (7.13) вә (7.14) бәрабәрликләриндән

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

вә ја
$$(\widetilde{\breve{L}\breve{F}}) = \tilde{\breve{F}} \cdot \tilde{\breve{L}} \tag{7.15}$$

алырыг. Демәли, **операторларын һасилинә ујғун транспозисија едилмиш оператор һасилдә иштирак едән операторлара ујғун транспозисија едилмиш операторларын әкс ардычыллыгла көтүрүлмүш һасилинә бәрабәрдир.**

(7.15) бәрабәрлијиндән комплекс гошма көтүрүб, (6.12) бәрабәрлијини нәзәрә алсаг:

$$(\breve{L}\breve{F})^+ = \breve{F}^+\breve{L}^+ \tag{7.16}$$

олар. Хәтти операторларын һасилинә ујғун гошма оператор, һасилдә иштирак едән операторлара ујғун гошма операторларын әкс ардычыллыгла көтүрүлмүш һасилинә бәрабәрдир.

(7.16) бәрабәрлијини ардычыл тәтбиг етмәклә истәнилән сајда хәтти операторларын һасилиндән ибарәт оператора ујғун гошма оператор тапмаг олар:

$$(\breve{L}\breve{F}\ldots\breve{C})^+ = \breve{C}^+\ldots\breve{F}^+\breve{L}^+. \tag{7.16'}$$

$\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын ајрылыгда ермит олдуғуну фәрз етсәк, (6.14) әсасән (7.16) бәрабәрлији

$$(\breve{L}\breve{F})^+ = \breve{F}\breve{L} \tag{7.17}$$

шәклинә дүшүр. Лакин бу шәрт һеч дә $\breve{C} = \breve{L}\breve{F}$ операторунун ермит олмасы үчүн кафи дејилдир. $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ илә бирликдә $\breve{C}$-нин дә ермит олдуғуну гәбул етсәк, (7.17)-дән

$$\breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L} = 0 \tag{7.18}$$

олар, јә'ни $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ ермит олдугда $\breve{L}\ \breve{F}$ һасилинин дә ермит олмасы үчүн онлар бир-бирилә коммутасија етмәлидир. Бурадан бир нәтиҹә олараг чыхыр ки, $\breve{L}$ оператору ермит оларса, $\breve{L}^n$ оператору һәмишә ермитдир (бурада n – там мүсбәт әдәддир).

$\breve{L}^n$ операторунун функсијаја тә'сири $\breve{L}$ операторунун n дәфә ардычыл тә'сири кими тә'јин олунур.

$$\breve{L}^n\Psi = \breve{L}(\breve{L}\ldots\breve{L}(\breve{L}\Psi)) \tag{7.19}$$

(сағ тәрәфдә $\breve{L}$ оператору n дәфә бир-биринә вурулур). Дикәр тәрәфдән, асанлыгла көстәрмәк олар ки, ејни бир операторун ики мүхтәлиф үстү үчүн

$$\breve{L}^{(n+m)} = \breve{L}^n\breve{L}^m \tag{7.20}$$

вә

$$\left[\breve{L}^n\breve{L}^m\right] = \breve{L}^n\breve{L}^m - \breve{L}^m\breve{L}^n = 0$$

шәртләри өдәнилир.

Фәрз едәк ки, $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторлары бир-бирилә коммутасија етмәјән ермит операторлардыр. Онда јәгин ки, $\breve{L}\ \breve{F}$ вә $\breve{F}\ \breve{L}$ һасил операторлары ермит олмаз. Лакин онларын $\frac{1}{2}(\breve{L}\breve{F} + \breve{F}\breve{L})$ вә $\frac{i}{2}(\breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L})$ комбинасијалары, (7.17)-јә әсасән, һәмишә ермит операторлардыр.

Һәр һансы $\breve{L}$ операторуна тәрс оператор $\breve{L}^{-1}$ кими ишарә олунур. $\breve{L}^{-1}$ тәрс оператор јалныз о вахт тә'јин олуна биләр ки, $\varphi(x)=\ \breve{L}\ \Psi(x)$ тәнлији Ψ-јә нәзәрән һәлл олуна билсин: $\Psi = \breve{L}^{-1}\varphi$. Бурадан алыныр ки, тәрс оператор

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

јә'ни

$$\breve{L}^{-1}\ \breve{L} = \breve{I} \tag{7.21}$$

хассәсинә маликдир. Ејнилә бунун кими

$$\breve{L}\breve{L}^{-1}\varphi(x) = \breve{L}(L^{-1}\varphi) = \breve{L}\,\Psi = \varphi\text{, јә'ни }\breve{L}\ \breve{L}^{-1} = \breve{I}, \tag{7.21'}$$

бурада $\breve{I}$ — ваһид оператордур. Ваһид оператор үчүн һәмишә $\breve{I}\ \Psi = \Psi$ бәрабәрлији өдәнилир вә бурадан да о бүтүн башга операторларла коммутасија едир.

$\breve{L}^{-1}$ тәрс оператор $\breve{L}^+$ гошма оператора бәрабәр, јә'ни $\breve{L}^{-1} = \breve{L}^+$ оларса, (7.21) вә (7.21') мүнасибәтләри

$$\breve{L}\breve{L}^+\Psi = \breve{L}^+\breve{L}\,\Psi$$

вә ја

$$\breve{L}\breve{L}^+ = \breve{L}^+\breve{L} = \breve{I} \tag{7.22}$$

шәклиндә дүшәр. Белә операторлар **унитар операторлар** вә (7.22) шәрти унитарлыг шәрти адланыр. Унитар операторларын мәхсуси гијмәтләри модулча ваһидә бәрабәрдир: $\breve{L}\ \Psi = L\,\Psi$ вә $\breve{L}^+\ \Psi = L^*\,\Psi$ олдуғуну вә (7.22) шәртини нәзәрә алсаг,

$$\breve{L}^+\breve{L}\,\Psi = \breve{L}\breve{L}^+\Psi = LL^*\Psi = \Psi$$

олар, бурадан

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

Унитар $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын һасили олан $\breve{C}=\breve{L}\,\breve{F}$ оператору да унитар олур: $\breve{C}^+ = \breve{F}^+\breve{L}^+$ олдуғундан

$$\breve{C}^+\breve{C} = \breve{F}^+\breve{L}^+\breve{L}\breve{F} = \breve{F}^+\breve{F} = \breve{I}$$

олур.

Нәһајәт гејд едәк ки, хәтти операторларын һасили әмәлијјаты дистрибутивлик хассәсинә маликдир:

$$\breve{L}(\breve{F}+\breve{C}) = \breve{L}\breve{F} + \breve{L}\breve{C}\,. \tag{7.23}$$

§ 8. ЕРМИТ ОПЕРАТОРЛАРЫН МӘХСУСИ ФУНКСИЈАЛАРЫ ВӘ ОНЛАРЫН ХАССӘЛӘРИ

Јухарыда гејд етдик ки, операторларын мәхсуси гијмәтләр чохлуғу дискрет вә ја кәсилмәз спектр тәшкил едир. Һәр ики һал үчүн ермит (өзүнә гошма) операторларын мәхсуси функсијаларынын хассәләри илә таныш олаг.

Әввәлчә бу мәсәләни дискрет спектр һалы үчүн тәһлил едәк. 5-чи параграфда көстәрмишдик ки, системин Ψ ихтијари функсијасыны истәнилән операторун (5.2) (вә ја (5.10)) мәхсуси функсијаларынын

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

комбинасијасы шәклиндә көстәрмәк олар вә буна имкан верән Ψ_i (вә ја Ψ_L) функсијалар чохлуғу **там систем** тәшкил едир. $C_i^* C_i$ һасили системин i-чи һалда олма еһтималыдыр вә $\Psi_i(x,t)$ функсијалары исә (5.6) ортонормаланма шәртини өдәјир. Лакин, биз бу шәртләри еһтимал нәзәријјәсинин тәләбләринә әсасән аланда квант механикасында истифадә олунан операторлар синфини дәгигләшдирмәмишдик.

Систем сонлу фәзада һәрәкәт едирсә, онун ала биләҹәк һаллар ардычыллығы дискрет спектр тәшкил едир (мәс. IV фәслә бах) вә бу һалларын Ψ_i далға функсијалары фәзанын бахылан областындан кәнарда кифајәт гәдәр бөјүк сүр'әтлә (тез) сыфра јахынлашыр. Она көрә дә дискрет спектрин Ψ_i далға функсијаларынын асылы олдуғу аргументләрин бүтүн дәјишмә областы үзрә көтүрүлмүш $\int \Psi_i^* \Psi_i (dx)$ интегралы һәмишә сонлу галыр. Бурадан чыхыр ки, дискрет спектрин далға функсијаларыны һәмишә нормаламаг олар. Беләликлә, (5.6) шәртләринин биринчиси, јә'ни далға функсијаларынын нормаланма шәрти бурада да өз гүввәсини сахлајыр.

Икинчи шәртә кәлдикдә исә о, јалныз ермит операторларын мәхсуси функсијалары үчүн өдәнилир. Буну исбат едәк.

Фәрз едәк ки, Ψ_n вә Ψ_m функсијалары ихтијари $\breve{L}$ хәтти операторунун L_n вә L_m мүхтәлиф мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијаларыдыр, јә'ни онлар үчүн

$$\breve{L}\Psi_n = L_n\Psi_n\,, \qquad \breve{L}\Psi_m = L_m\Psi_m \tag{8.1}$$

тәнликләри өдәнилир. Биринчи тәнлији солдан Ψ_m^*-ә, икинчи тәнлијә комплекс гошма олан $\breve{L}^*\Psi_m^* = L_m^*\Psi_m^*$ тәнлијини исә сағдан Ψ_n-ә вуруб, бүтүн фәза үзрә интеграл көтүрдүкдән сонра алынан бәрабәрликләри бир-бириндән чыхсаг,

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

аларыг. Сол тәрәфдәки икинчи интеграла транспозисија теоремини тәтбиг етсәк,

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

(8.2) бәрабәрлијинин сол тәрәфи ејнилик кими сыфра бәрабәр олар. Онда

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

олур. Бурада ики һала бахмаг олар. Фәрз едәк ки, а) $n \neq m$, онда $L_n \neq L_m^*$ олдуғундан

$$\int \Psi_m^* \Psi_n (dx) = 0 \tag{8.3}$$

алыныр, јә'ни ермит операторларын мүхтәлиф мәхсуси гијмәтләринә ујғун далға функсијалары ортогонал олур. б) $n=m$ олдугда далға функсијанын физики маһијјәтиндән $\int \Psi_n^* \Psi_n (dx) = 1$ олур вә $L_n = L_n^*$ алыныр, јә'ни ермит операторларын мәхсуси гијмәтләри һәмишә һәгиги олур.

Ермит операторларын мәхсуси функсијалары үчүн (5.6) ортонормаланма шәрти там өдәнилир. Бу һалда (5.2)-јә дахил олан C_i әмсалларыны системин далға функсијалары илә ифадә етмәк олар. Доғрудан да, (5.2)-ни солдан Ψ_k^* вуруб, бүтүн фәза үзрә интегралласаг, (5.6)-ја әсасән

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

алынар.

Инди дә фәрз едәк ки, L физики кәмиҗјәти кәсилмәз (бүтөв) спектрә маликдир. Онун мәхсуси гијмәтләр чохлуғуну $\{L\}$, мәхсуси далға функсијаларыны исә Ψ_L илә ишарә етсәк, ујғун тәнлик

$$\hat{L}\Psi_L = L\Psi_L \qquad (8.5)$$

кими јазылар.

Дискрет спектр һалында олдуғу кими, Ψ_L мәхсуси функсијалар системи там систем тәшкил едирсә, системин Ψ үмуми далға функсијасыны онларын ихтијари хәтти комбинасијасы шәклиндә көстәрмәк олар. Бу һалда белә комбинасија интеграл шәклиндә јазылар:

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

Интеграл L-ин бүтүн дәјишмә областы үзрә көтүрүлүр.

Ψ_L функсијаларыны ади шәкилдә нормаламаг, јә'ни онлар үчүн орта-нормаланма шәртини (5.6) шәклиндә јазмаг мүмкүн дејилдир. Кәсилмәз спектрин далға функсијалары квадратик интегралланмыр. Онлар үчүн $\int \Psi_L^*(x)\Psi_L(x)(dx)$ интегралы дағылыр (сонсуз олур). Бу онунла әлагәдардыр ки, кәсилмәз спектрин далға функсијалары сонсузлугда сыфра бәрабәр олмур $(\Psi_L(x \to \pm\infty) \neq 0)$. Бу һалда квант механики системин һәрәкәти инфинит олур, јә'ни системин (зәррәчијин) сонсузлугда олма еһтималы сыфырдан фәргли гијмәт алыр. Она көрә дә бүтөв спектрин Ψ_L мәхсуси функсијалары үчүн ортонормалана шәрти елә тә'јин едилир ки, $C^*(L)C(L)dL$ ифадәси L-кәмијјәтинин L, $L+dL$ интервалында гијмәт алма еһтималыны ифадә етсин (белә ки, бахылан һалда системин мүәјјән һалынын – L-ин мүәјјән гијмәтинин еһтималындан danышмаг мүмкүн дејилдир). L-ин мүмкүн олан гијмәтләриндән һеч олмаса биринә бәрабәр олма еһтималы ваһидә бәрабәр олдуғундан

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

олар.

Ψ-нин (7.6) илә верилмиш гијмәтини бурада јеринә јазсаг,

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

аларыг. Бу бәрабәрликлә сол вә сағ тәрәфдәки ифадәләрин мүгајисәсиндән

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

алыныр. Беләликлә, $C(L)$ әмсалларынын һесабланма гајдасы C_i әмсалларынын (8.4) һесабланма гајдасы үзәринә дүшүр.

$\Psi_L(x)$ функсијалары үчүн орто-нормаланма шәртини тапмаг мәгсәди илә $\Psi(x)$-ин (8.6) -дәки ифадәсини (8.8)-дә јеринә јазаг:

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

Бу бәрабәрлик ихтијари C_L әмсаллары үчүн доғру олмалыдыр, јә'ни ејнилик кими өдәнилмәлидир. Бу о заман мүмкүн олар ки, L'-ин L-дән фәргли бүтүн гијмәтләриндә $(L'\neq L)$ $C(L')$-ә вурулан $\int \Psi_L^*(x)\Psi_{L'}(x)(dx)$ интегралы сыфыр, L'-ин L-ә чох јахын гијмәтләриндә исә $(L'\approx L)$ сонсуз бөјүк (dL' сонсуз кичик олдуғундан) олсун. Онда $C(L')$ илә интегралын һасили сонлу, јә'ни $C(L')$ илә $C(L)$ ејни тәртибли олар. Беләликлә, $\int \Psi_L^*(x)\Psi_{L'}(x)(dx)$ интегралы $L'-L$ фәргиндән асылы бир функсија олур. Бу функсија аргументин сыфырдан фәргли гијмәтиндә сыфыр, сыфыр гијмәтиндә исә сонсуздур. Ону $\delta(L'-L)$ кими ишарә етсәк,

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

$\delta(L'-L) = \delta(x)$ функсијасы

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

кими тә'јин олунур. Бу ахырынчы бәрабәрликлә тә'јин олунмуш функсија *делта функсија* адланыр. О, илк дәфә мәшһур инкилис алими Дирак тәрәфиндән дахил едилмиш вә онун шәрәфинә Дирак делта функсијасы адланыр.

(8.9) мүнасибәтини нәзәрә алсаг,

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

олар. Бу ифадә δ-функсијанын ән әсас хассәләриндән бирини ифадә едир. Доғрудан да, ону ихтијари x вә x' дәјишәнләри үчүн јазсаг,

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

олар. Бу көстәрир ки, интеграл алтында δ-функсија олдугда белә интегралы алмаг чох асандыр. Интегралламанын нәтичәси интегралалты функсијанын, интеграллама дәјишәнинин δ-функсијанын аргументини сыфыра чевирән гијмәтиндә көтүрүлмүш гијмәтинә бәрабәрдир, Мәсәлән, $x' = a$ –да

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

$x' = 0$ –да

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

вә и.а. олур.

Бу ахырынҹы бәрабәрликләрдән истифадә етмәклә δ-функсијанын башга мүһүм бир хассәсини дә алмаг олар. (8.11′) бәрабәрлији $x = x'$ ($x = a$, $x = 0$ вә и.а.) гијмәтиндә сыфырдан фәргли галдығындан, ону

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

кими дә јазмаг олар. Бурадан

$$\int \delta(x-x')dx' = 1 \quad \text{вә ја} \quad \int \delta(x)dx = 1 \tag{8.12}$$

алынар.

Делта функсијанын көмәји илә көтүрүлән интегралларда интеграллама областы $(-\infty, \infty)$ олмаја да биләр. Интегралы, делта функсија сыфыра бәрабәр олмајан хүсуси нөгтә дахил олан истәнилән област үзрә көтүрмәк олар.

(8.12) бәрабәрлијинин икинҹисиндән алыныр ки, δ-функсија ҹүт функсијадыр, јә'ни $\delta(x) = \delta(-x)$. Доғрудан да $y = -x$ әвәзини гәбул етсәк,

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

олур.

δ -функсијанын даһа бир хассәсини көстәрәк. Фәрз едәк ки, δ-функсија $\delta(\alpha x)$ шәклиндәдир, бурада α — ихтијари сабитдир. Ондан x үзрә көтүрүлмүш интегралы һесаблајаг. $\alpha x = y$ әвәзини көтүрүб, δ-функсијанын ҹүт функсија олдуғуну нәзәрә алсаг,

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

алынар. Бурадан чыхыр ки, $\delta(\alpha x)$ вә $\delta(x)$ функсијалар үчүн

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

бәрабәрлији доғрудур.

Исбатсыз делта функсијанын даһа бир хассәсини дә көстәрәк:

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

вә бурадан

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

бурада x_i-ләр $\varphi(x)=0$ тәнлијинин көкләри, n исә x оху бојунча бу көкләрин сајыдыр.

(8.9) бәрабәрлији бүтөв спектрин мәхсуси функсијалары үчүн ортонормаланма шәрти олур. Доғрудан да, $L \neq L'$ оланда Ψ_L вә $\Psi_{L'}$ функсијалары ортогонал олур ($\int \Psi^*_{L'}\Psi_L(dx) = 0$, $L \neq L'$), $L = L'$-дә исә онлар δ-функсијаја нормаланыр. Бу шәрт дискрет спектр һалындакы (5.6) шәртини әвәз едир.

Бүтөв спектрин мәхсуси функсијалары даһа бир шәрти дә өдәјир. Ону алмаг үчүн $C(L)$-ин (8.8) илә верилмиш ифадәсини (8.6)-да јеринә јазаг:

$$\Psi(x,t) = \int \Psi(x')(\int \Psi^*_L(x')\Psi_L(x)dL)(dx'). \tag{8.16}$$

(8.8′)-ә охшар олараг бу мүнасибәт о вахт өдәнилир ки,

$$\int \Psi^*_L(x')\Psi_L(x)dL = \delta(x-x') \tag{8.17}$$

олсун.

Дискрет спектрин мәхсуси функсијалары үчүн дә (8.17) охшар бәрабәрлик алмаг олар. Доғрудан да C_i-нин (8.4) илә верилмиш ифадәсини (5.2)-дә јеринә јазсаг,

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

алынар. (8.8) вә (8.16) охшар олараг, бу бәрабәрлијин өдәнилмәси үчүн

$$\sum_i \Psi^*_i(x')\Psi_i(x) = \delta(x-x') \tag{8.18}$$

олмалыдыр. Гејд едәк ки, (8.17) вә (8.18) шәртләри ујғун олараг кәсилмәз вә дискрет спектрин мәхсуси функсијалар системинин там систем олмасы үчүн лазыми вә кафи шәртләрдир.

§ 9. ҺАМИЛТОН ОПЕРАТОРУ

Биз јухарыда бахылан операторларын һансы физики кәмијјәтләрә аид олдуғуну көстәрмәдән, квант механикасында истифадә олунан операторлар синфини мүәјјән етдик вә онларын үмуми хассәләри илә танныш олдуг. Инди дә мухтәлиф физики кәмијјәтләрә ујғун операторларын ашкар шәклинин тапылмасы үзәриндә дајанаг.

Системин $\Psi(x,t)$ далға функсијасы мә'лум оларса, бахылан анда системин һалыны характеризә едән физики кәмијјәтләрин ала биләчәк гијмәтләрини вә онларын өлчүлмә еһтималларыны һесабламаг олур. Бу мә'нада дејирләр ки, $\Psi(x,t)$ далға функсијасы системин һалыны там тә'јин едир. Квант механикасында иддиа олунур ки, $\Psi(x,t)$ далға функсијасы системин јалныз һәмин андакы һалыны јох, бүтүн сонракы анлардакы һалларыны да бирмәнали тә'јин едир.

Ријази олараг ахырынчы фикир белә ифадә олунур: Ψ-функсијанын замана көрә дәјишмәсинин һәр верилмиш андакы гијмәти Ψ-нин һәмин андакы гијмәти илә тә'јин олунур. Бу асылылыг үмуми шәкилдә

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

кими јазылыр. Бурада i хәјали ваһид садәлик хатиринә дахил едилмишдир. Суперпозисија принсипинә көрә (9.1)-ә дахил олан $\breve{L}$ оператору хәтти нөвбәли хәтти олмалыдыр (§6-ја бах). Дикәр тәрәфдән, $\breve{L}$ операторуна замана көрә төрәмәләр вә мүәјјән заман интервалында көтүрүлмүш интеграллар дахил олмамалыдыр. Доғрудан да, $\breve{L}$ оператору Ψ-нин замана көрә төрәмәсини функсијанын өзү илә тә'јин етдијиндән $\breve{L}$-ә замана көрә биринчи тәртиб төрәмә дахил олмамалыдыр, әкс һалда о, ахтарылан оператор олмаз. $\breve{L}$-ә јүксәк тәртибли төрәмәләр дахил олса, диференсиал тәнликләр нәзәријјәсинә көрә, башланғыч шәрт олараг далға функсијасындан башга онун биринчи, икинчи вә и.а. тәртиб төрәмәләринин башланғыч андакы гијмәтләри дә верилмәлидир. Бу системин һалынын там тә'јин олунма принсипинә зиддир. Ејнилә бунун кими замана көрә интегралларын $\breve{L}$-ә дахил олмасы да бу принсипә зидд олар, белә ки, системин верилмиш андакы һалы онун тарихиндән асылы оларды. Бу исә квант механикасында трајекторијанын варлығына кәтирәр вә онун әсас принсипләринә (мәсәлән, гејри-мүәјјәнлик принсипинә) зидд олар.

§6-да көстәрдик ки, квант механикасында истифадә олунан операторлар ермит олмалыдыр. $\breve{L}$-ин ермит оператор олдуғуну көстәрмәк мәгсәдилә (5.8) бәрабәрлијиндән замана көрә төрәмә алаг:

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

x вә t дәјишәнләри ихтијари дәјишәнләр олдуғундан интеграл илә төрәмәнин нөвбәсини дәјишмәк олар:

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

(9.1) вә она комплекс гошма олан

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

тәнликләрдән $\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}$ вә $\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial t}$-ни ујғун ифадәләрлә әвәз етсәк,

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

алынар. Биринчи интегралда транспозисија олунмуш оператор анлајышындан (§6-ја бах) истифадә етсәк, ахырынчы бәрабәрлик

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

вә ја

$$\int\Psi^*\breve{L}^+\Psi(dx)=\int\Psi^*\breve{L}\,\Psi(dx)$$

шәклинә дүшәр. Бу бәрабәрлик ихтијари $\Psi(x,t)$ функсијасы үчүн о заман өдәнилир ки, $\breve{L}^+=\breve{L}$, јә'ни $\breve{L}$ оператору ермит оператор олсун.

$\breve{L}$ операторунун һансы физики кәмијјәтә ујғун олдуғуну мүәјјән едәк. §2-дә классик механика илә һәндәси оптика арасындакы охшарлығы арашдырдыгда көрдүк ки, тә'сир S далғанын φ фазасы илә мүтәнасибдир:

$$S=\text{const}\,\varphi\,, \tag{9.2}$$

бурада φ—адсыз әдәд, const исә өлчүсү тә'сир өлчүсү үзәринә дүшән сабитдир.

Бу мүнасибәти

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

мүстәви де-Бројл далғалары үчүн алаг. Муғајисәдән

$$\varphi = \frac{1}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r}) \quad \text{вә ја} \quad Et - \vec{p}\vec{r} = \hbar\varphi \tag{9.3}$$

олар. (9.2) вә (9.3) -дән

$$\varphi = \frac{S}{\hbar} \tag{9.4}$$

алыныр. φ-нин гијмәтини далға функсијанын ифадәсиндә јеринә јазсаг.

$$\Psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)}. \tag{9.5}$$

Билдијимиз кими, далғавары оптикада һәндәси оптикаја кечид етмәк үчүн $\lambda \to 0$ јахынлашдырмаг лазымдыр. Квант механикасындан классик механикаја кечиди дә бу јолла етмәк олар. Доғрудан да, де-Бројл далғаларынын далға узунлуғу λ бахылан квант механики системин күтләси илә тә'јин олунур. $\lambda = \frac{\hbar}{m\upsilon}$, күтлә бөјүдүкчә λ кичилир вә күтләнин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтиндә $\lambda \to 0$ јахынлашыр. Демәли, күтлә бөјүк олдугча системин далғавары хассәләри зәиф олур. Јалныз кифајәт гәдәр кичик күтләли системләр (елементар зәррәчикләр, атомлар) үчүн далғавары хассәләр мүһүм рол ојнамаға башлајыр. Беләликлә, $\lambda \to 0$ һалында квант механики системләр өзләрини классик системләр кими апармалыдыр. λ-нын сыфра јахын гијмәтинә фазанын (φ-нин) ән бөјүк гијмәти ујғун кәлир. Онларын ифадәсиндән көрүнүр ки, λ вә φ-нин лимит гијмәтини $\hbar$-ни сыфра јахынлашдырмагла да ($\hbar \to 0$) алмаг олар. $\hbar$ Планк сабити бүтүн квант һадисәләриндә олдугча мүһүм рол ојнајыр. Онун һәмин өлчүлү башга кәмијјәтләрә нәзәрән нисби гијмәти бу вә ја башга системин квантлыг дәрәчәсини тә'јин едир. Буна көрә дә квант механикасындан классик механикаја кечиди, формал олараг, $\hbar \to 0$ јахынлашдырмагла да апармаг олар.

Демәли, $\lambda \to 0$ оланда далғавары оптика һәндәси оптикаја, квант механикасы исә классик механикаја кечир вә λ-нын бу лимит гијмәтиндә һәндәси оптика илә классик механика арасындакы охшарлыг ријази олараг (9.4) мүнасибәти илә ифадә олунур. Бүтүн бунлардан чыхыр ки, Ψ-нин (9.5) ифадәси квант механикасынын классик областы үчүн далға функсијасыдыр.

Далға функсијасынын статистик мә'насына көрә (9.5) функсијасынын тәсвир етдији һәрәкәт мүәјјән трајекторија үзрә олан классик һәрәкәтин үзәринә дүшә билмәз. Доғрудан да, јухарыда көрдүк ки, Ψ-нин модулунун квадраты бахылан анда системин координатларынын пајланма еһтималыны тә'јин едир. Она көрә дә, (9.5) далға функсијасынын классик

һәрәкәтлә әлагәси, бу пајланманын замана көрә "јердәјишмә"синин классик механиканын ганунларына ујғун олараг баш вермәсиндән ибарәт олар.

Инди дә $\check{L}$ операторуна ујғун физики кәмијјәти тапаг. Бунун үчүн (9.5)-дән замана көрә төрәмә алаг (бурада A-нын сабит галдығы фәрз олунур)

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

Буну (9.1) илә мүгајисә етсәк,

$$\check{L}\Psi = -\frac{1}{\hbar}\cdot\frac{\partial S}{\partial t}\Psi \tag{9.6}$$

алынар. Операторун мәхсуси гијмәти анлајышынын тә'јининдән, $-\frac{1}{\hbar}\cdot\frac{\partial S}{\partial t}$ кәмијјәти $\check{L}$ операторунун мәхсуси гијмәти олур. Классик механикадан мә'лумдур ки, системин енержиси ону тәшкил едән зәррәчикләрин координат вә импулсларынын функсијасы шәклиндә верилирсә, тә'сирин (S-ин) замана көрә төрәмәси системин H Һамилтон функсијасына бәрабәр олур:

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

Һамилтон–Јакоби тәнлијини алмаг үчүн (9.7)-дә $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$ көтүрүлүр.

(9.7)-ни (9.6)-да нәзәрә алсаг, $\hbar\check{L}\varphi = H\Psi$ алынар. Демәли, $\hbar\check{L}$ операторуна системин Һамилтон функсијасы (енержиси) кими физики кәмијјәт ујғун кәлир. Һамилтон функсијасына ујғун оператору $\check{H}$ илә ишарә етсәк, ахырынчы тәнлик $\check{H}\Psi = H\Psi$ кими јазылар. Бу тәнликләрин мүгајисәсиндән $\check{L}\hbar = \check{H}$ алыныр. (9.5)-дә $\check{L}$ операторуну $\check{H}$ илә әвәз етсәк, Ψ үчүн

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \check{H}\Psi \tag{9.8}$$

тәнлији алынар. $\check{H}$ оператору системин *Һамилтон оператору* адланыр. Она *Һамилтониан* да дејилир.

Ψ^* функсија үчүн тәнлик (9.1)-дән

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

шәклиндә олар ($\breve{L}$ ермит олдуғундан $\breve{H}^* = \breve{H}$ -дыр).

Беләликлә, системин Һамилтон оператору мә'лум оларса, (9.8) тәнлијини һәлл едиб, системин далға функсијасыны, онун енержи спектрини тапмаг, јухарыда гејд етдијимиз кими, системи там тәсвир етмәк, јә'ни онун бүтүн хассәләрини тә'јин етмәк олар.

§ 10. ФИЗИКИ КӘМИЈЈӘТИН ОРТА ГИЈМӘТИНИН ЗАМАНА КӨРӘ ТӨРӘМӘСИ

Дикәр физики кәмијјәтләрә ујғун операторларын аналитик шәклини тапмаздан габаг, әввәлчә, физики кәмијјәтин замана көрә төрәмәси олан $\dot{L} = \frac{dL}{dt}$ кәмијјәтинә (мәсәлән, $\dot{x} = \upsilon_x$, $\dot{y} = \upsilon_y$, $\dot{z} = \upsilon_z$, вә н.а. кими) ујғун оператору тапаг.

Квант механикасында физики кәмијјәтин замана көрә төрәмәсини классик мә'нада тә'јин етмәк мүмкүн дејилдир. Билдијимиз кими, классик механикада һәр һансы кәмијјәтин замана көрә төрәмәсини алмаг үчүн онун бир-биринә чох јахын мүхтәлиф ики моментдәки гијмәтләрини билмәк лазымдыр. Квант механикасында исә буну етмәк мүмкүн дејилдир, чүнки квант механикасында трајекторија үзрә һәрәкәт мөвчуд дејилдир (§16-а бах). Физики кәмијјәт бахылан анда мүәјјән гијмәтә маликдирсә, сонракы моментләрдә о, үмумијјәтлә һеч бир мүәјјән гијмәтә малик олмаја биләр. Бу исә физики кәмијјәтин замана көрә төрәмәсини классик јолла тә'јин етмәјә имкан вермир. Лакин §6-да көстәрдик ки, системин үмуми $\Psi(x,t)$ далға функсијасы мә'лум олдугда, физики кәмијјәтин јалныз орта гијмәтинин мә'насы вардыр (далға функсијасынын статистик характери). Кәмијјәтин орта гијмәтинин исә, классик мә'нада, замана көрә төрәмәси һесаблана биләр.

Дикәр тәрәфдән, квант механикасынын әсас принсипләриндән бири олан **ујғунлуг принсипи** иддиа едир ки, классик механикада физики кәмијјәтләр арасындакы мүнасибәтләр квант механикасында онлара ујғун операторлар үчүн доғру галыр. Бу принсипдән алыныр ки, квант механикасында ихтијари L физики кәмијјәтин замана көрә төрәмәсинин орта гијмәти онун орта гијмәтинин замана көрә төрәмәсинә бәрабәрдир:

$$\overline{\dot{\breve{L}}} = \dot{\overline{L}}\,. \qquad (10.1)$$

Буну исбат едәк. Классик механикада һәр һансы $L(q,p,t)$ физики кәмијјәтин замана көрә төрәмәси

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

кими һесабланыр. Классик механиканын һәрәкәт тәнликләри олан

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

Һамилтон тәнликләриндән истифадә етсәк,

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

алынар, бурада $\left[HL\right] = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial L}{\partial p}$ классик Пуассон мө'тәризәсидир. Ујғунлуг принсипинә көрә $\dot{L}$, L, H физики кәмијјәтләринә ујғун операторлар арасында да (10.2) мүнасибәти доғру галыр:

$$\dot{\breve{L}} = \frac{\partial\breve{L}}{\partial t} + \left[\breve{H}\breve{L}\right]. \qquad (10.3)$$

Асанлыгла көстәрмәк олар ки, (10.1) мүнасибәти квант механикасында (10.3) бәрабәрлијинә кәтирир. Бунун үчүн $\dot{\overline{L}}$ -ни һесаблајаг:

$$\dot{\overline{L}} = \frac{d}{dt}\int\Psi^*\breve{L}\Psi(dx) = \int\Psi^*\frac{\partial\breve{L}}{\partial t}\Psi(dx) + \int\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\breve{L}\Psi(dx) +$$

$$+\int\Psi^*\breve{L}\frac{\partial\Psi}{\partial t}(dx)\,.$$

Бу ифадәдә $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ вә $\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$ төрәмәләрини (9.8) вә (9.9) тәнликләриндән

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

ифадәләри илә әвәз етсәк,

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

алынар. $\breve{H}$ операторунун ермит (өзүнә гошма) оператор олдуғуну нәзәрә алараг, ($\breve{H}^* = \breve{H}$) икинчи интегралын шәклини дәјишәк. $\breve{L}\Psi = \Psi'$ гәбул едәк, онда

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

Беләликлә,

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

вә ја

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

алынар. $\dot{\bar{L}}$-ин бу ифадәсини (10.1)-дә јазыб $\dot{\bar{L}} = \int \Psi^* \dot{\breve{L}}\Psi(dx)$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

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

вә бурадан да ашағыдакы оператор тәнлик алмыш оларыг:

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

$\left[\breve{H}\breve{L}\right] = \frac{i}{\hbar}(\breve{H}\breve{L} - \breve{L}\breve{H})$ --- квант Пуассон мө'тәризәси адланыр. Бу ишарәләрдә (10.4) ифадәси (10.3)-үн үзәринә дүшүр. Лакин квант механикасында ики операторун коммутасијасыны ифадә едән $\breve{H}\breve{L} - \breve{L}\breve{H}$ фәрги, шәрти олараг, $\breve{H}\breve{L} - \breve{L}\breve{H} = \left[\breve{H}\breve{L}\right]$ кими ишарә олунур. Бу һалда (10.4) мүнасибәти

$$\frac{d\breve{L}}{dt} = \dot{\breve{L}} = \frac{\partial\breve{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{L}\right] \qquad (10.4')$$

кими јазылыр. Бу тәнлик Һејзенберг формасында **һәрәкәт тәнлији** адланыр вә физики кәмијјәтин замана көрә еволјусијасыны характеризә едир.

(10.4) ифадәси $\breve{L}$ операторунун замана көрә там төрәмәси кими баша дүшүлмәмәлидир. О, садәчә $\dot{L}$ вә L физики кәмијјәтләринә ујғун $\dot{\breve{L}}$ вә

$\breve{L}$ операторлары арасындакы әлагәни ифадә едир. Көрүндүјү кими, бу әлагә системин $\breve{H}$ Һамилтон оператору илә тә'јин олунур. $\breve{L}$ операторунун замана көрә хүсуси төрәмәси олан $\frac{\partial\breve{L}}{\partial t}$ һәддинә исә операторун параметрә (t-јә) көрә төрәмәси кими бахылмалыдыр.

Оператор $\breve{L}$ ашкар шәкилдә замандан асылы дејилсә ($\frac{\partial\breve{L}}{\partial t} = 0$) вә Һамилтон оператору илә коммутасија едирсә ($\left[\breve{H}\breve{L}\right] = 0$), (10.4) вә ја (10.3)-дән

$$\bar{\dot{L}} = \int \Psi^* \dot{\breve{L}}\Psi(dx) = 0 \qquad (10.5)$$

вә (10.1)-дән $\dot{\bar{L}} = \bar{\dot{L}} = 0$ алыныр. Бу ахырынчыдан $\bar{L}$ =const олур, јә'ни системин истәнилән һалында физики кәмијјәтин орта гијмәти сабит галыр. Белә кәмијјәтләрә һәрәкәт интеграллары дејилир вә (10.5) бәрабәрлији анларын сахланма ганунуну ифадә едир.

Мәсәлән, фәрз едәк ки, $\breve{L} = \breve{H}$-дыр вә системин Һамилтон оператору ашкар шәкилдә замандан асылы дејилдир. Онда

$$\dot{\breve{H}} = \frac{\partial\breve{H}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{H}\right] = 0$$

олар, бурадан да $E = \bar{H}$ = const алыныр, јә'ни бахылан һалда системин енержиси сахланыр. Һамилтон оператору замандан ашкар шәкилдә асылы олан һалларда исә системин енержисинин сахланмасындан данышмаг олмур, чүнки белә һаллар үчүн $\dot{\breve{H}} = \frac{\partial\breve{H}}{\partial t} \neq 0$ галыр.

§ 11. КООРДИНАТ ВӘ ИМПУЛС ОПЕРАТОРЛАРЫ, ОНЛАРЫН МӘХСУСИ ГИЈМӘТЛӘРИ ВӘ МӘХСУСИ ФУНКСИЈАЛАРЫ

(5.2), (5.10) вә (5.3), (8.7) мүнасибәтләри көстәрир ки, (9.8) тәнлијинин һәлли олан $\Psi(x,t)$ далға функсијасы илә, ону ихтијари $\breve{L}$ операторунун Ψ_L вә ја Ψ_L мәхсуси функсијаларынын комбинасијасы шәклиндә көстәрмәјә (суперпозисија принсипи) имкан верән C_L вә $C(L)$ әмсаллары (әслиндә функсијалары) квант механикасында ејни физики мә'наја маликдир.

Ψ_i, Ψ_{L_i}, C_{L_i}, $C(L)$ функсијалар чохлуғунун (спектринин) һәр бири ајрылығда там систем тәшкил едир вә квант механики системи там тәсвир етмәјә имкан верир. Беләликлә, онлардан һәр бири системин далға функсијасы олур.

Квант механики системин нәзәри тәдгиги $\Psi(x,t)$ далға функсијасы васитәсилә апарылырса, квант механикасында белә тәсвир "x-тәсвири" вә ја "координат тәсвири" адланыр. Системин физики хассәләринин тәсвири үчүн дискрет спектрин $C_{L_i} = C_i$ далға функсијалары сечилирсә, белә тәсвир ујғун физики кәмијјәтин ады илә адланыр. Мәсәлән, L кәмијјәти системин E енержиси оларса, белә тәсвир "E-тәсвири" вә ја "енержи тәсвири" адланыр. Нәһајәт, кәсилмәз спектрин $C(L)$ далға функсијаларындан истифадә едиләрсә, тәсвирә "L-тәсвири" дејилир. Мәсәлән, L кәмијјәти кәсилмәдән дәјишән координат x вә ја импулс p оларса, тәсвир ујғун олараг "координат" вә ја "импулс тәсвири" адланыр вә и.а. Гејд етмәк лазымдыр ки, физики кәмијјәтә ујғун операторун аналитик ифадәси дә тәсвирин сечилмәсиндән асылыдыр (III фәслә бах). Ејни бир оператор мүхтәлиф тәсвирләрдә мүхтәлиф аналитик ифадәјә малик олур.

Биз бу параграфда координат вә импулс операторларынын јалныз ики тәсвирдә–координат вә импулс тәсвирләриндәки ифадәләрини тапачағыг. Онларын верилмиш тәсвирдәки аналитик ифадәсиндән һәр һансы башга тәсвирдәки аналитик ифадәјә (үмумијјәтлә истәнилән тәсвирдән ихтијари дикәр тәсвирә) кечид мәсәләси үзәриндә исә "Тәсвир нәзәријјәси" фәслиндә (III фәсил) әтрафлы дајаначағыг.

А. Координат тәсвири (х-тәсвири)

Әввәлчә координат вә импулс операторларынын координат тәсвириндәки ифадәсини тапаг.

а) **Координат оператору, онун мәхсуси гијмәтләри вә мәхсуси функсијалары.**

Фәрз едәк ки, систем $\Psi(x,t)$ функсијасы илә тәсвир едилир. Системин (зәррәчијин), мәсәлән, x координатынын бу вә ја башга гијмәти алма еһтимал сыхлығы (4.4)-дән $w(x)=\Psi^*(x)\,\Psi(x)$ олдуғундан, онун статистик орта гијмәти

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

бәрабәр олар. x-ә ујғун оператору $\breve{x}$ илә ишарә етсәк, операторун тә'рифиндән

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

олур. Бу ики бәрабәрлијин мүгајисәсиндән алыныр ки,

$$\breve{x}\,\Psi(x) = x\,\Psi(x)$$

олур, јә'ни координат тәсвириндә $\breve{x}$ операторунун $\Psi(x)$ далға функсијасына тә'сири садәчә x-ин далға функсијасына һасилинә бәрабәр олур. Координат тәсвириндә $\breve{x}$ оператору x координаты үзәринә дүшүр. Ејни сөзләри $\breve{y}$ вә $\breve{z}$ операторлары үчүн дә демәк олар:

$$\breve{x} = x, \quad \breve{y} = y, \quad \breve{z} = z \text{ вә еләчә дә } \breve{\vec{r}} = \vec{r}. \qquad (11.1)$$

Бу мүнасибәтләрдән алыныр ки, $\vec{r}$ радиус векторун компонентләринә гаршы гојулмуш $\breve{x}$, $\breve{y}$, $\breve{z}$ операторлары бир-бирилә коммутасија едир:

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

јә'ни онлар ејни заманда мүәјјән гијмәт ала билир. Башга сөзлә, $\vec{r}$ радиус вектору бахылан һалда мүәјјән гијмәтә малик олур.

Бурадан бир нәтичә олараг чыхыр ки, һәр һансы физики кәмијјәт јалныз координатларла ($\vec{r}$ радиус вектору илә) тә'јин олунурса, бу кәмијјәтә ујғун оператор координат тәсвириндә өз үзәринә дүшүр:

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

Белә һалларда дејирләр ки, оператор өз тәсвириндә верилмишдир.

$\breve{x}$ операторунун мәхсуси функсијаларыны вә мәхсуси гијмәтләрини тә'јин едәк. Операторун мәхсуси гијмәтинин тә'рифиндән

$$\breve{x}\,\Psi_{x_0}(x) = x_0 \Psi_{x_0}(x) \qquad (11.4)$$

бурада x_0–x–ин һәр һансы бир гијмәтидир. Дикәр тәрәфдән "x-тәсвириндә" $\breve{x}$ -ин һәмин тәсвирдә верилмиш $\Psi_{x_0}(x)$ – а тә'сири x-ин функсијаја һасилинә бәрабәрдир:

$$\breve{x}\,\Psi_{x_0}(x) = x\,\Psi_{x_0}(x). \qquad (11.5)$$

(11.4) вә (11.5) бәрабәрликләрини тәрәф-тәрәфә чыхсаг,

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

Бурада $x = x_0$ оланда $\Psi_{x_0}(x) \neq 0$; $x \neq x_0$ оланда исә $\Psi_{x_0}(x) = 0$ олур. Классик механикада олдуғу кими, квант механикасында да системин координатлары кәсилмәдән дәјишир, јә'ни спектри кәсилмәз олур. Кәсилмәз спектрин $\Psi_{x_o}(x)$ далға функсијалары исә (8.9)-а әсасән δ-функсијаја нормаланыр:

$$\int \Psi^*_{x'_o}(x)\Psi_{x_o}(x)(dx) = \delta(x_o - x'_o). \qquad (11.6)$$

$\Psi_{x_o}(x)$ функсијасынын јухарыдакы хассәләри вә онун үчүн ахырынчы бәрабәрлик о вахт ејни заманда өдәнилир ки, $\Psi_{x_o}(x) = \delta(x - x_o)$ олсун. Доғрудан да, δ-функсијанын тә'рифиндән

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

вә $\Psi^*_{x_o}(x) = \delta^*(x - x_o) = \delta(x - x_o)$ олдуғундан, онун (8.11) хассәсинә әсасән

$$\int \Psi^*_{x'_o}(x)\Psi_{x_o}(x)(dx) = \int \delta(x'_o - x)\delta(x - x_o)(dx) = \delta(x_o - x'_o)$$

алынар. Бунун кими дә $\breve{y}$ вә $\breve{z}$ операторларынын мәхсуси функсијалары ујғун олараг

$$\Psi_{y_o}(y) = \delta(y - y_o), \ \Psi_{z_o}(z) = \delta(z - z_o), \ \Psi_{x_o}(x) = \delta(x - x_o) \qquad (11.7)$$

олар. $\breve{x}$, $\breve{y}$, $\breve{z}$ операторлары коммутасија етдијиндән онлар ејни бир мәхсуси функсијаја маликдир. Бу функсија

$$\Psi_{r_o}(\vec{r}) = \Psi_{x_o}(x)\Psi_{y_o}(y)\Psi_{z_o}(z) = \delta(x - x_o)\delta(y - y_o)\delta(z - z_o) = = \delta(\vec{r} - \vec{r}_o) \qquad (11.8)$$

шәклиндә олар.

б) **Импулс оператору, онун мәхсуси гијмәтләри вә мәхсуси функсијалары.**

Импулс операторунун 'координат тәсвириндәки ифадәсини тапмаг үчүн квант механики системин симметрија хассәләриндән – онун Һамилтон операторунун координатларын чеврилмәсинә көрә инвариант галмасы хассәсиндән истифадә едәк.

Гәбул олунуб ки, харичи гүввәләрин тә'сири мүшаһидә олунмајан фәза бирчинс вә изотропдур, јә'ни онда бүтүн нөгтәләр ејни һүгуглу, бүтүн истигамәтләр исә еквивалентдир. Әввәлчә, фәзанын бирчинс олмасы хассәсиндән истифадә едәк. Гапалы системи бирчинс фәзада өзүнә паралел көчүрдүкдә онун хассәләри дәјишмир. Квант механикасында системин хассәләри онун Һамилтон оператору илә тә'јин олундуғундан, системи истәнилән мәсафәјә паралел көчүрдүкдә онун Һамилтон оператору дәјишмәмәли, јә'ни паралел көчүрмә чеврилмәсинә көрә инвариант галмалыдыр. Истәнилән сонлу мәсафәјә паралел көчүрмә сонсуз кичик паралел көчүрмәләрдән тәшкил олундуғундан, Һамилтон операторун инвариантлығы сонлу паралел көчүрмә үчүн дә доғру галыр.

Үмумилији позмадан фәрз едәк ки, квант механики систем бир зәррәчикдән ибарәтдир. Белә ки, алынан нәтичәләр сәрбәст зәррәчикләр системи үчүн дә асанлыгла үмумиләшдирилә биләр.

Сонсуз кичик $\delta\vec{r}$ мәсафәјә паралел көчүрмә заманы зәррәчијин радиус вектору $\vec{r} \to \vec{r} + \delta\vec{r}$, далға функсијасы исә $\Psi(\vec{r}) \to \Psi(\vec{r} + \delta\vec{r})$ чеврилир. $\delta\vec{r}$ артымы кифајәт гәдәр кичик олдуғундан $\Psi(\vec{r} + \delta\vec{r})$ функсијасыны $\delta\vec{r}$-ин үстләринә көрә сыраја ајырыб, биринчи ики һәдлә кифајәтләнәк,

$$\Psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \Psi(\vec{r}) + \delta\vec{r}\,\frac{\partial\Psi(\vec{r})}{\delta\vec{r}} + \ldots = (1 + \delta\vec{r}\vec{\nabla})\Psi(\vec{r}) \qquad (11.8)$$

вә ја

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

бурада

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

сонсуз кичик паралел көчүрмә оператору, $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial\vec{r}} = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$ – набла адлы диференсиал оператордур.

Јухарыда гејд етдик ки, системин Һамилтон оператору паралел көчүрмәјә көрә инвариант галыр. Башга сөзлә, $\Psi(\vec{r})$ функсијасына әввәлчә $\breve{H}$, сонра исә $\breve{R}_{\delta r}$ оператору илә тә'сир етдикдә алынан нәтичә, әввәлчә $\breve{R}_{\delta r}$, сонра исә $\breve{H}$ илә тә'сир етдикдә алынан нәтичәјә бәрабәр олур:

$$\breve{R}_{\delta r}\breve{H}\Psi = \breve{H}\breve{R}_{\delta r}\Psi \qquad \text{вә ја} \qquad (\breve{R}_{\delta r}\breve{H} - \breve{H}\breve{R}_{\delta r})\Psi = 0,$$

јә'ни $\breve{R}_{\delta r} = 1 + \delta\vec{r}\vec{\nabla}$ оператору Һамилтон оператору илә коммутасија едир. Ваһид вә $\delta\vec{r}$ вектору истәнилән операторла коммутасија етдијиндән $\breve{H}$ вә $\breve{R}_{\delta r}$-ин коммутасијасы

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

шәклини алыр. §10-да көрдүк ки, һәр һансы оператор ашкар шәкилдә замандан асылы дејилсә вә Һамилтон оператору илә коммутасија едирсә, она ујғун физики кәмијјәт сахланыр, һәрәкәт интегралы олур. Механикадан мә'лумдур ки, фәзанын бирчинслији импулсун сахланмасына кәтирир. Буна әсасән дејә биләрик ки, зәррәчијин импулсуна ујғун оператор $\vec{\nabla}$ илә мүтәнасиб олмалыдыр: $\breve{\vec{p}} = C\vec{\nabla}$. C–мүтәнасиблик әмсалынын гијмәти хүсуси һалда тапылса, о, үмуми һалда да өз гијмәтини сахлајыр. Бунун үчүн классик областын (9.5) далға функсијасына $\breve{\vec{p}}$ оператору илә тә'сир едәк:

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

Бу тә'сир $C\frac{i}{\hbar}\vec{\nabla}S$-ин Ψ-далға функсијасына һасилинә кәтирир, јә'ни о, $\breve{\vec{p}}$ операторунун мәхсуси гијмәти олур. Классик механикада тә'сирин градиенти системин импулсуна бәрабәрдир: $\vec{\nabla}S = \vec{p}$. Мәхсуси гијмәтин (6.7) тә'рифинә көрә $C\frac{i}{\hbar} = 1$ вә $C = -i\hbar$ олур.

Беләликлә, координат тәсвириндә зәррәчијин импулс оператору

$$\breve{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} \text{ вә ја } \breve{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \breve{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \breve{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \qquad (11.11)$$

олур. (11.9) сонсуз кичик паралел көчүрмә операторуну $\breve{\vec{p}}$ илә ифадә етсәк,

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

(11.8) сырасында сонракы һәдләр дә нәзәрә алынарса, сонлу $\vec{r} = \vec{a}$ мәсафәсинә паралел көчүрмә оператору

$$\breve{R} = e^{\frac{i}{\hbar}\breve{\vec{p}}\vec{a}} = e^{\frac{i}{\hbar}\breve{p}_i a_i} \qquad (11.13)$$

олар. Бурада a_i – паралел көчүрмә чеврилмәсинин параметрләри адланыр. $\breve{R}$ операторунун a_i параметрләринә көрә төрәмәсинин бүтүн параметрләрин сыфыр гијмәтинә ујғун

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

ифадәси паралел көчүрмә чеврилмәсинин **кенераторлары** вә ја **инфинитезимал** операторлары адланыр. Бурадан көрүнүр ки, координат охларындан бири бојунча паралел көчүрмә чеврилмәсинин кенератору вә ја инфинитезимал оператору, импулс операторунун ујғун компоненти илә мүтәнасибдир.

$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_n)$ далға функсијасы илә тәсвир олунан зәррәчикләр системинин фәзада сонсуз кичик паралел көчүрмә оператору, јәгин ки,

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

шәклиндә олар, бурада $\breve{\vec{p}} = \sum_i \breve{\vec{p}}_i$. Демәли, зәррәчикләр системинин фәзада сонсуз кичик паралел көчүрмә оператору да (11.12) ифадәси илә верилир. Лакин бу һалда, $\breve{\vec{p}}$-јә системин там импулсуна ујғун оператор кими бахмаг лазымдыр.

(11.11)-дән көрүнүр ки, импулс оператору хәтти оператордур. О, квант механикасында истифадә олунан операторлар үзәринә гојулан икинчи тәләби дә өдәјир. О, өзүнә гошма ермит оператордур. Буну көстәрмәк үчүн $\Phi(\pm\infty) = 0$, $\varphi(\pm\infty) = 0$ шәртләрини өдәјән ихтијари Φ вә φ функсијалары үчүн јазылмыш

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

интегралыны һиссә-һиссә ачаг:

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

вә ја

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

өзүнә гошма шәрти алыныр. Ејни шәкилдә $\breve{p}_y$ вә $\breve{p}_z$-ин дә ермит олдуғуну исбат етмәк олар.

Функсијанын мүхтәлиф дәјишәнләрә көрә икинчи тәртиб төрәмәләри төрәмәнин көтүрүлмә ардычыллығындан асылы олмадығындан $\breve{p}_x$, $\breve{p}_y$, $\breve{p}_z$ операторлары коммутасија едир:

$$(\hat{p}_i\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{p}_i)\Psi = 0 \text{ вə ја } \hat{p}_i\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{p}_i = 0, \qquad (11.15)$$

јә'ни зәррәчијин импулсу верилмиш һалда мүәјјән гијмәтә малик ола билир.

Импулс операторунун мәхсуси функсијаларыны вә мәхсуси гијмәтләрини тапаг. Онлар (6.7)-јә әсасән

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

тәнликләри илә тә'јин олунур, бурада p_x, p_y, p_z -ујғун операторларын мәхсуси гијмәтләридир. Сәрбәст һәрәкәт үчүн (11.16) тәнликләриндән, мәсәлән, биринчинин һәллини $\Psi(x,y,z) = \varphi(x) f(y,z)$ шәклиндә ахтармаг олар. Онда

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

бурадан

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

јахуд

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

Билдијимиз кими x дәјишәни $(-\infty \le x \le +\infty)$ интервалында кәсилмәдән дәјишир. $\hat{p}_x$ ермит операторунун мәхсуси гијмәтләринин һәгиги, (11.17) һәллинин исә x-ин кәсилмәз функсијасы олмасы үчүн p_x дә $(-\infty \le p_x \le +\infty)$ интервалында кәсилмәдән дәјишмәлидир. Ејни сөзләри p_y вә p_z кәмијјәтләри үчүн дә сөјләмәк олар.

$\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ операторлары коммутасија етдијиндән онлар үмуми мәхсуси функсијаја малик олмалыдыр. (11.17)-јә әсасән бу функсијаны

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

шәклиндә јазмаг олар. p_x, p_y, p_z кәмијјәтләринин ејни заманда верилмәси системин (11.18) далға функсијасыны там тә'јин едир, јә'ни онлар физики кәмијјәтләрин мүмкүн **там чохлугдан** бири олур.

Демәли, импулс операторунун мәхсуси функсијалар вә мәхсуси гијмәтләр чохлуғу кәсилмәз спектр тәшкил едир. Кәсилмәз спектрин мәхсуси функсијалары үчүн нормаланма шәрти (8.9)-а әсасән

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

шәклиндә јазылыр. Бу шәртдән a-ны тапмаг олар. $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r})$-ин (11.18) ифадәсини (11.19)-да јазыб, δ – функсијанын $\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(x - x') \cdot \delta(y - y')\delta(z - z')$ хассәсиндән истифадә етсәк, $a^2(2\pi\hbar)^3\delta(\vec{p}' - \vec{p}) = \delta(\vec{p}' - \vec{p})$ аларыг, бурадан $a^2(2\pi\hbar)^3 = 1$ вә $a = (2\pi\hbar)^{-3/2}$ алынар. Беләликлә, $\hat{\vec{p}}$ операторунун нормаланмыш мәхсуси функсијасы

$$\Psi_{\vec{p}}(x,t) = (2\pi\hbar)^{-3/2}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \qquad (11.18')$$

олар.

Зәррәчијин сәрбәст һәрәкәти финитдирсә, јә'ни зәррәчик өлчүләри истәнилән гәдәр бөјүк, лакин сонлу фәзада һәрәкәт едирсә, (11.18) мүстәви далғалары башга јолла нормаламаг әлверишли олур. Үмумилији позмадан белә фәзаны тили L олан куб гәбул едәк (L истәнилән гәдәр бөјүк ола биләр). Бу заман тәләб олунур ки, далға функсијасы кубун диварларында периодик олсун, јә'ни кубун бир-биринә гаршы дуран үзвләринин ујғун нөгтәләриндә далға функсијасы бәрабәр гијмәтләр алсын. Бу шәртдән алыныр ки, финит сәрбәст һәрәкәтдә импулсун компонентләри кәсилмәдән дәјишмир, дискрет гијмәтләр алыр (§31-ә бах):

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

бурада n_1, n_2, n_3 – там мүсбәт вә мәнфи гијмәтләр алыр.

Бу вә буна охшар һалларда мүстәви далғалар үчүн нормаланма шәрти

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

вә ја

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

бурадан

$$\Psi_{\vec{p}} = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r})} \qquad (11.21)$$

олур.

Б. Импулс тәсвири (p-тәсвир)

Инди дә координат вә импулс операторларынын импулс тәсвириндә аналитик ифадәсини тапмаг үчүн импулс операторунун координат тәсвириндәки (11.18′) мәхсуси функсијалар чохлуғундан истифадә едәк. Әввәлчә импулс операторунун өз тәсвириндә мәхсуси функсијасыны тапаг. Бунун үчүн $\Psi(x,t)$ функсијасынын импулс операторунун координат тәсвириндә верилмиш вә там систем тәшкил едән (11.18′) мәхсуси функсиjалар чохлуғу үзрә суперпозисиjасыны көтүрәк:

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

бурадан ((8.8) бәрабәрлиjинә бах)

$$C(\vec p)=\int\Psi^*_{\vec p}(\vec r,t)\Psi(\vec r,t)(d\vec r)\qquad(11.23)$$

алыныр. §8-дә дејиләнләрдән чыхыр ки, $C(\vec p)$ системин импулс тәсвириндә верилмиш далға функсиjасыдыр. $C^*(\vec p)C(\vec p)(d\vec p)=\left|C(\vec p)\right|^2(d\vec p)=$ $=w(\vec p)(d\vec p)$ ифадәси зәррәчиjин импулсунун $\vec p,\ \vec p+d\vec p$ интервалында гиjмәт алма еһтималы олур. Зәррәчиjин импулсунун мүмкүн олан гиjмәтләриндән һәр һансы биринә бәрабәр олма еһтималы исә

$$\int C^*(\vec p)C(\vec p)(d\vec p)=1\qquad(11.24)$$

олар.

p-тәсвириндә импулс оператору, jәгин ки, операторун (6.4) тә'рифиндән алынан

$$\bar{\vec p}=\int C^*(\vec p)\breve{\vec p}C(\vec p)(d\vec p)=\int w(\vec p)\vec p(d\vec p)\qquad(11.25)$$

ифадәси илә тә'jин олунар. Бу ахырынчы бәрабәрлиjин өдәнилмәси үчүн

$$\breve{\vec p}C(\vec p)=\vec p\cdot C(\vec p)$$

олмалыдыр. Буну (11.25)-дә jазыб, (11.24)-ү нәзәрә алсаг, $\breve{\vec p}=\vec p$ алынар, jә'ни p-тәсвирдә импулс оператору импулсун өзүнә бәрабәр олур. Гејд едәк ки, бу теорем истәнилән башга физики кәмиjjәт үчүн дә доғрудур.

Инди дә p-тәсвириндә $\vec r$ радиус вектора уjғун $\breve{\vec r}$ операторуну тапаг. Операторун (6.4) тә'рифиндән

$$\bar{\vec r}=\int C^*(\vec p)\breve{\vec r}C(\vec p)(d\vec p).\qquad(11.26)$$

Дикәр тәрәфдән "x-тәсвириндә" $\vec r$-ин орта гиjмәти

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

олар.

$\Psi(\vec r,t)$-нин (11.22) ифадәсиндән истифадә едәрәк $\vec r\ \Psi(r,t)$ һасилинин шәклини дәjишдирәк:

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

Ахырынчы интегралы һиссә-һиссә ачсаг,

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

олар. Бу ахырынчы ифадәни (11.27) jазыб $\Psi^*(\vec r,t)$-ни (11.22)-jә уjғун ифадәси илә əвәз етсәк,

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

аларыг. Бурада

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

олдуғуну нәзәрә алыб, алынан ифадәни δ–функсиjа васитәси илә $\vec p\,'$-ә көрә интегралласаг,

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

аларыг. (11.28)-и (11.26) илә мүгаjисә етдикдә $\breve{\vec r}$ оператору p-тәсвириндә

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

олур.

в) Координат вә импулс операторлары арасында коммутатив мүнасибәтләр.

7 вә 8-чи параграфларда көрдүк ки, мүхтәлиф операторларын коммутатив олуб, олмамасы квант механикасында мүһүм әһәмиjjәтә маликдир. Ики оператор коммутасиjа едирсә, онлар үмуми мәхсуси функсиjалара маликдир, онлара уjғун физики кәмиjjәтләр еjни бир һалы тә'jин едир, jә'ни еjни заманда мүәjjән гиjмәт алыр.

Јухарыда көстәрдик ки, $\breve p_i(\breve p_x,\breve p_y,\breve p_z)$ вә $\breve x_i(\breve x,\breve y,\breve z)$ операторлары аjрылыгда өз араларында коммутасиjа едир ((11.2) вә (11.15)-ә бах). Инди дә $\breve p_i$ илә $\breve x_i$ операторлары арасындакы коммутасиjа мүнасибәтләрини тапаг.

Асанлыгла көстәрмәк олар ки,

$$\breve{p}_x y - y\breve{p}_x = 0 \qquad \breve{p}_x z - z\breve{p}_x = 0 \quad \text{вә и.а.}$$

јахуд

$$(\breve{p}_i\breve{x}_k - \breve{x}_k\breve{p}_i)\Psi = 0 \quad \text{вә ја} \quad \breve{p}_i\breve{x}_k - \breve{x}_k\breve{p}_i = 0 \ (i\neq k) \qquad (11.30)$$

олур. Доғрудан да, $i\neq k$ олдугда $\breve{p}_i x_k\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}(x_k\Psi)$ ифадәсиндә x_k өзүнү параметр кими апарыр вә $\breve{p}_i x_k\Psi = x_k\breve{p}_i\Psi$ олур. $i=k$ һалында исә, мәсәлән,

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

вә ја

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

олур. (11.30) вә (11.31) мүнасибәтләрини бирләшдирсәк,

$$(\breve{p}_i x_k - x_k\breve{p}_i)\Psi = -i\hbar\delta_{ik}\Psi, \ \text{јахуд} \ \breve{p}_i\breve{x}_k - \breve{x}_k\breve{p}_i = -i\hbar\delta_{ik} \qquad (11.32)$$

(11.32) мүнасибәтиндән алыныр ки, квант механики системин (мәсәлән, зәррәчијин) координат вә импулсу ејни заманда мүәјјән гијмәт ала билмир. Фәзанын мүәјјән $\vec{r}$ нөгтәсиндә олан зәррәчик ејни заманда мүәјјән $\vec{p}$ импулсуна малик ола билмир. Демәли, квант механикасында һәрәкәтин трајекторијасы анлајышы мөвчуд дејилдир, чүнки һәрәкәтин трајекторијасыны гурмаг үчүн системин координат вә импулсунун бахылан анда гијмәтләри верилмәлидир.

(11.11) ифадәләри импулс оператору $\breve{\vec{p}}$ илә ихтијари $f(\vec{r})$ функсијасы арасында

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

мүнасибәтини алмаға имкан верир (координат тәсвири). Ејнилә бунун кими (11.29)-дан $\breve{\vec{r}}$ илә ихтијари $f(\vec{p})$ функсијасы арасында

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

мүнасибәти алыныр. Бу ахырынча ики бәрабәрликдән биз кәләчәкдә дәфәләрлә истифадә едәчәјик.

§ 12. ЕНЕРЖИ ВӘ ЗАМАН ОПЕРАТОРЛАРЫ, ОНЛАРЫН МӘХСУСИ ГИЈМӘТЛӘРИ ВӘ МӘХСУСИ ФУНКСИЈАЛАРЫ

$\Psi(x,t)$ функсијасынын аргументинә x, y, z координатлары илә јанашы заман t дөрдүнчү ихтијари дәјишән кими дахил олур вә координатлар кими кәсилмәдән дәјишир. Бурадан алыныр ки, t физики кәмијјәтинә ујғун $\breve{t}$ операторунун хассәләри координат операторларынын хассәләри илә ејни олмалыдыр: $\breve{t}$ операторунун далға функсијасына тә'сири t-нин функсијаја һасилинә бәрабәрдир, онун мәхсуси гијмәтләр спектри кәсилмәз олуб, $(-\infty\le t\le+\infty)$ интервалында дәјишир, мәхсуси функсијалары исә $\Psi_{t_0}(t) = \delta(t-t_0)$ олур.

Енержи операторуну тапмаг үчүн заманын бирчинслијиндән истифадә едәк. Заманын бирчинслијинә көрә физики просесләрин кедиши, заман үчүн һесабланма башланғычы кими бу вә ја башга анын сечилмәсиндән асылы дејилдир. Башга сөзлә, заманын һесабланма башланғычынын сонсуз кичик вә ја сонлу заман фасиләси гәдәр сүрүшдүрүлмәси системин физики хассәләрини дәјишмир вә онун $\breve{H}$ Һамилтон оператору бу дәјишмәјә көрә инвариант галыр.

Заманын һесабланма башланғычынын сонсуз кичик δt сүрүшмәси заманы алынан $\Psi(x,t+\delta t)$ функсијасыны δt-нин үстләринә көрә сыраја ајырыб, биринчи ики һәдлә кифајәтләнсәк,

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

Бу сүрүшмәнин

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

оператору системин $\breve{H}$ оператору илә коммутасија етдијиндән

$$(\breve{H}\breve{R}_{\delta t} - \breve{R}_{\delta t}\breve{H})\Psi = 0 \quad \text{вә ја} \quad \breve{H}\nabla_t - \nabla_t\breve{H} = 0.$$

∇_t операторуна ујғун физики кәмијјәт сахланыр. Механикадан мә'лумдур ки, заманын бирчинслији системин енержисинин сахланмасына кәтирир. Онда $\breve{E}$ енержи оператору ∇_t илә мүтәнасиб олмалыдыр: $\breve{E} = C\,\nabla_t$. C әмсалы $\breve{E}$-нин классик областын далға функсијасы $\Psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}$-ә тә'сириндән тә'јин олуна биләр:

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

$E = C\dfrac{i}{\hbar}\dfrac{\partial S}{\partial t}$ $-\breve{E}$ операторунун мәхсуси гијмәти олур. Классик механикада $E = -\dfrac{\partial S}{\partial t}$ олдуғундан $\dfrac{i}{\hbar}C = -1$, $C = i\hbar$ вә енержи оператору

$$\breve{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad (12.2)$$

олур. Бурадан $R_{\delta t}$ -дә $\dfrac{\partial}{\partial t}$ -ни $\breve{E}$ оператору илә әвәз етсәк, заманын һесабат башланғычынын сонсуз кичик сүрүшмә оператору үчүн

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

аларыг. Бурадан, (11.9) -а охшар олараг, башланғычын сонлу Δt фасиләси гәдәр сүрүшмә оператору

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

вә бу чеврилмәнин кенератору (инфинитезимал оператору)

$$\breve{I} = \frac{i}{\hbar}\breve{E} \qquad (12.5)$$

олур.

$\breve{E} = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$ оператору координат, импулс вә һәрәкәт мигдары моменти (бах §13) операторлары илә коммутасија етдијиндән, $\breve{E}$ оператору онларла биркә мәхсуси функсијалара малик олур. Мәхсуси гијмәтләр спектрини мүәјјән етмәк үчүн исә (9.8) тәнлијини (12.2) оператору васитәси илә јазаг

$$\breve{E}\Psi(x,t) = \breve{H}(x,t)\Psi(x,t)\,, \qquad (12.6)$$

Бурадан көрүнүр ки, $\breve{E}$ операторунун мәхсуси гијмәтләр спектри $\breve{H}$ операторунун мәхсуси гијмәтләр спектри үзәринә дүшүр.

§ 13. ҺӘРӘКӘТ МИГДАРЫ МОМЕНТИ ОПЕРАТОРУ ВӘ ОНУН ХАССӘЛӘРИ

§11-дә көрдүк ки, фәзанын бирчинслији импулс операторунун аналитик ифадәсинин тапылмасына вә гапалы системин импулсунун сахланма ганунуна кәтирир. Фәза изотроплуг хассәсинә дә маликдир, онда

бүтүн истигамәтләр ејни һүгуглудур. Фәзанын изотроплуғу гапалы системин физики хассәләринин ихтијари фырланмаја көрә инвариант галмасында бүрузә верир. Башга сөзлә, гапалы систем истәнилән ох әтрафында ихтијари бучаг гәдәр дөндүкдә, онун Һамилтон оператору дәјишмир, јә'ни фырланмаја көрә инвариант галыр.

Әввәлчә системин координат башланғычы әтрафында сонсуз кичик дөнмә операторуну тапаг. Фәрз едәк ки, систем мәсәлән, z оху әтрафында сонсуз кичик $\delta\varphi$ бучағы гәдәр дөнүр. Онун ихтијари нөгтәсинин јени координатлары x',y',z' көһнә координатлары x,y,z илә

$$x'=x+\delta x,\ y'=y+\delta y \text{ вә ја } \delta x=y\delta\varphi,\ \delta y=-x\delta\varphi$$

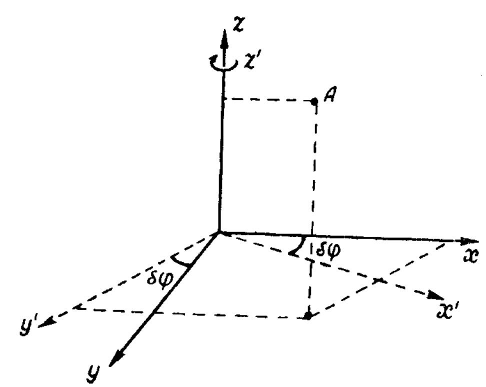
$$x'=x+y\delta\varphi,\ y'=y-x\delta\varphi,\ z'=z \qquad (13.1)$$

кими тә'јин олунур (шәкил 4-ә бах).

Фәрз едәк ки, дөнмәздән әввәл систем $\Psi(x,y,z,t)$, дөнәндән сонра исә $\Psi(x',y',z',t')$ далға функсијалары илә тәсвир олунур. Сонсуз кичик $\delta\varphi$ бучағы гәдәр дөнмә нәтичәсиндә $\Psi(x,y,z,t)$ функсијасыны $\Psi(x',y',z',t')$ функсијасына чевирән оператору $R_{\delta\varphi}$ илә ишарә етсәк,

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

(13.1)-дән x',y',z'-и ујғун ифадәләри илә әвәз едәндән сонра $\Psi(x',y',z',t')$ функсијасыны $\delta\varphi$-нин үстләринә көрә сыраја ајырыб, биринчи ики һәдлә кифајәтләнсәк,



Шәкил 4. Координат системинин z-оху әтрафында фырланмасы.

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

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

алынар. Бу ифадәнин (13.2) илә мүгајисәсиндән z оху әтрафында сонсуз кичик дөнмә оператору

$$R_{\delta\varphi}=1-\delta\varphi(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}). \qquad (13.4)$$

Вектор һесабындан

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

олдуғуну нәзәрә алсаг, системин фәзада координат башланғычындан кечән ихтијари ох әтрафында сонсуз кичик $\delta\varphi$ бучағы гәдәр дөнмә оператору

$$R_{\delta\vec{\varphi}}=1-\delta\vec{\varphi}\left[\vec{r}\vec{\nabla}\right] \qquad (13.5)$$

кими јазылар, бурада $\delta\vec{\varphi}$ сонсуз кичик фырланма бучаг векторудур. Онун гијмәти $\delta\varphi$ дөнмә бучағына бәрабәрдир, истигамәти исә системин әтрафында дөндүјү охун мүсбәт истигамәтиндә көтүрүлмүш $\vec{n}$ ваһид вектору илә тә'јин олунур:

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

(13.5)-дә $\vec{\nabla}$ операторуну импулс оператору $\breve{\vec{p}}=-i\hbar\vec{\nabla}$ илә әвәз етсәк,

$$R_{\delta\varphi}=1-\frac{i}{\hbar}\delta\varphi(\vec{n}\left[\vec{r}\breve{\vec{p}}\right]) \qquad (13.5')$$

шәклинә дүшәр. Һәрәкәт мигдары моментинин $\vec{L}=\left[\vec{r}\vec{p}\right]$ классик ифадәсинә вә ујғунлуг принсипинә әсасән

$$\breve{\vec{L}}=\left[\vec{r}\breve{\vec{p}}\right] \qquad (13.6)$$

оператору вә ја

$$\breve{L}_x=y\breve{p}_z-z\breve{p}_y=-i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}),$$
$$\breve{L}_y=z\breve{p}_x-x\breve{p}_z=-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}),$$
$$\breve{L}_z=x\breve{p}_y-y\breve{p}_x=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}) \qquad (13.7)$$

операторлары һәрәкәт мигдары моменти оператору олур. Бу мүнасибәтләри даһа јығчам шәкилдә јазмаг олар.

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

бурада $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$; $\tilde{\varepsilon}_{ikl}$ үчүнчү ранг там антисимметрик ваһид тензордур. Онун компонентләри i,k,l индексләрини чүт дәфә јердәјишмәклә 1,2,3 ардычыллығы алынырса 1-ә, тәк дәфә – 1-ә, үч индексдән һәр һансы икиси бәрабәр олдугда исә 0 (сыфра) бәрабәрдир.

$R_{\delta\vec{\varphi}}$-ни $\breve{L}$ илә ифадә етсәк,

$$R_{\delta\vec{\varphi}}=1-\frac{i}{\hbar}\delta\varphi(\vec{n}\breve{\vec{L}}) \qquad (13.5'')$$

олур.

Фырланма заманы системин хассәләри дәјишмәдијиндән $\breve{H}$ Һамилтон оператору $R_{\delta\vec{\varphi}}$ оператору илә коммутасија едәр. $\delta\vec{\varphi}$–сабит, ваһид оператор истәнилән операторла коммутасија етдијиндән $R_{\delta\vec{\varphi}}$ илә $\breve{H}$ -ын коммутасијасы

$$\breve{H}\breve{\vec{L}}-\breve{\vec{L}}\breve{H}=0 \qquad (13.8)$$

кәтирир. $\breve{\vec{L}}$ оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан (13.8) бәрабәрлији, §10-а әсасән, гапалы системин һәрәкәт мигдары моментинин сахланма ганунуну ифадә едир.

Харичи саһәдә олан систем үчүн һәрәкәт мигдары моменти үмумијјәтлә сахланмыр. Лакин харичи саһә мүәјјән симметријаја малик оларса, бу момент сахлана биләр. Мәсәлән, систем харичи сферик симметрик саһәдә оларса, белә саһәләрдә мәркәзә нәзәрән бүтүн истигамәтләр ејни һүгуглу олдуғундан системин һәмин мәркәзә көрә моменти сахланыр. Саһә силиндрик симметријаја малик олдуғу һалларда исә, моментин јалныз силиндр оху бојунча олан пројексијасы сахланыр вә и.а.

$\delta\varphi$-нин сонсуз кичиклији вә (13.3) сырасынын сонракы һәдләри дә нәзәрә алынарса, (13.5″) оператору

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

шəклиндə jазылар.

Мүəjjəн ох əтрафында ики ардычыл дөнмə һəмин ох əтрафында ардычыл дөнмə бучагларынын чəминə бəрабəр бучаг гəдəр дөнмəjə еквивалент олдуғундан $\vec{n}$ оху əтрафында сонлу φ бучағы гəдəр дөнмəjə һəмин ох əтрафында сонсуз сајда сонсуз кичик ардычыл дөнмəлəрин чəми кими бахмаг олар. Онда сонлу φ бучағы гəдəр дөнмə оператору

$$R_{\varphi} = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(\vec{n}\vec{\breve{L}})} \tag{13.9}$$

олур.

(11.14) уjғун олараг (13.1) фырланма чеврилмəлəри **кенераторлары** вə jа $\vec{n}$ оху əтрафында фырланма чеврилмəлəринин **инфинитезимал** оператору, һəрəкəт мигдары моменти операторунун һəмин ох үзрə проjексиjалары илə тə'jин олунур:

$$\breve{I}(\vec{n}) = \frac{\partial R_{\varphi}}{\partial \varphi}\Big|_{\varphi=0} = -\frac{i}{\hbar}(\vec{\breve{L}}\vec{n}) \tag{13.10}$$

$\vec{n}$ вектору z охуна паралел олдугда

$$\breve{I}_3 = -\frac{i}{\hbar}\breve{L}_z \tag{13.11}$$

олур вə и.а.

Һəрəкəт мигдары моменти операторунун $\breve{L}_x, \breve{L}_y$ вə $\breve{L}_z$ компонентлəри арасындакы jердəjишмə (коммутасиjа) мүнасибəтлəрини тапаг. Бунун үчүн əввəлчə һəрəкəт мигдары моменти оператору илə координат вə импулс операторлары арасындакы коммутативлик мүнасибəтлəрини һесаблаjаг.

(11.32) көмəjи илə асанлыгла көстəрмəк олар ки,

$$\breve{L}_x\breve{x} - \breve{x}\breve{L}_x = 0, \quad \breve{L}_y\breve{y} - \breve{y}\breve{L}_y = 0, \quad \breve{L}_z\breve{z} - \breve{z}\breve{L}_z = 0$$

$$\breve{L}_x\breve{y} - \breve{y}\breve{L}_x = i\hbar\breve{z}, \quad \breve{L}_x\breve{z} - \breve{z}\breve{L}_x = -i\hbar\breve{y} \quad \text{вə и.а.}$$

Бүтүн бунлары бир мүнасибəтдə чəмлəсəк,

$$\breve{L}_i x_k - x_k\breve{L}_i = i\hbar\sum_l \widetilde{\varepsilon}_{ikl}x_l, \tag{13.12}$$

$\breve{L}_i$ илə $\breve{p}_k$ операторлары арасында еjнилə буна охшар мүнасибəтлəр алыныр:

$$\breve{L}_x\breve{p}_y - \breve{p}_y\breve{L}_x = i\hbar\breve{p}_z \quad \text{вə и.а.}$$

jахуд

$$L_i\breve{p}_k - \breve{p}_k L_i = i\hbar\sum_l \widetilde{\varepsilon}_{ikl}\breve{p}_l. \tag{13.13}$$

Бу ики (13.12) вə (13.13) мүнасибəтлəринин көмəjи илə $\breve{L}_x, \breve{L}_y, \breve{L}_z$ операторлары үчүн коммутасиjа мүнасибəтлəри асанлыгла тапылыр:

$$\breve{L}_x\breve{L}_y - \breve{L}_y\breve{L}_x = \breve{L}_x(z\breve{p}_x - x\breve{p}_z) - (z\breve{p}_x - xp_z)L_x = (\breve{L}_x z - z\breve{L}_x)\breve{p}_x -$$
$$-x(\breve{L}_x\breve{p}_z - \breve{p}_z\breve{L}_x) = -i\hbar(y\breve{p}_x - x\breve{p}_y) = i\hbar\breve{L}_z.$$

Индекслəрин jерини тсиклик дəjишмəклə

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

вə jа үмуми шəкилдə

$$\breve{L}_i\breve{L}_k - \breve{L}_k\breve{L}_i = i\hbar\sum_l \widetilde{\varepsilon}_{ikl}\breve{L}_l \tag{13.14}$$

алыныр. Бурадан чыхыр ки, координатлардан вə импулсун компонентлəриндəн фəргли олараг, һəрəкəт мигдары моментинин L_x, L_y, L_z компонентлəри еjни заманда мүəjjəн гиjмəт алмыр вə системин моменти верилмиш һалда мүəjjəн гиjмəтə малик ола билмир. Лакин $\breve{L}_i$ операторларынын квадратлары чəми олан $\breve{L}^2 = \breve{L}_x^2 + \breve{L}_y^2 + \breve{L}_z^2 = \sum_{i=1}^{3}\breve{L}_i^2$ оператору системин $\breve{H}$ Һамилтон оператору вə $\breve{L}_x, \breve{L}_y, \breve{L}_z$ операторларынын һəр бири илə коммутасиjа едир:

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

Башга сөзлə, системин енержиси, һəрəкəт мигдары моментинин квадраты вə һəрəкəт мигдары моментинин һəр һансы верилмиш истигамəтдəки проjексиjасы еjни заманда мүəjjəн гиjмəт алыр; систем бу үч кəмиjjəтлə характеризə олунан һаллара малик ола билəр.

Доғрудан да, (13.14) мүнасибəтлəриндəн истифадə едəрəк көстəрмəк олар ки,

$$\breve{L}_x^2\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}_x^2 = L_x(\breve{L}_x\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}_x) + (\breve{L}_x\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}_x)\breve{L}_x = -i\hbar(\breve{L}_x\breve{L}_y + \breve{L}_y\breve{L}_x)$$

$$\breve{L}_y^2\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}_y^2 = i\hbar(\breve{L}_x\breve{L}_y + \breve{L}_y\breve{L}_x); \quad \breve{L}_z^2\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}_z^2 = 0,$$

бурадан

$$\breve{L}^2\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}^2 = 0;\ \text{ејнилә}\ \breve{L}^2\breve{L}_y - \breve{L}_y\breve{L}^2 = 0;\ \breve{L}^2\breve{L}_x - \breve{L}_x\breve{L}^2 = 0 \qquad (13.15)$$

олур.

Әксәр һалларда $\breve{L}_x$ вә $\breve{L}_y$ операторлары әвәзиндә онларын комбинасијасы олан

$$\breve{L}_+ = \breve{L}_x + i\breve{L}_y,$$
$$\breve{L}_- = \breve{L}_x - i\breve{L}_y \qquad (13.16)$$

операторлары дахил едилир. Бунлар бири дикәринә нәзәрән ермит гошма операторлардыр, лакин өзүнә гошма дејилдир. (13.14)-үн көмәји илә

$$\breve{L}_+\breve{L}_- - \breve{L}_-\breve{L}_+ = 2\breve{L}_z;\ \breve{L}_z\breve{L}_\pm - \breve{L}_\pm\breve{L}_z = \pm\breve{L}_\pm;$$
$$\breve{L}^2 = \breve{L}_+\breve{L}_- - \hbar\breve{L}_z + \breve{L}_z^2 \qquad (13.17)$$

мүнасибәтләринин доғрулуғуну асанлыгла исбат етмәк олар.

Фәза вә заманын 11–13-чү параграфларда көстәрилән симметрија хассәләри бир тәрәфдән енержи, импулс вә һәрәкәт мигдары моментинә ујғун операторларын ријази ифадәләрини тапмаға имкан верир, дикәр тәрәфдән исә (10.4′) һәрәкәт тәнлији әсасында онларын ујғун $\breve{L}$ оператору илә әлагәси тапылыр вә бурадан да алыныр ки, импулс вә һәрәкәт мигдары моменти һәрәкәт интегралларыдыр вә онларын сахланмасы фәза вә заманын мүәјјән симметријаја малик олмасы нәтичәсидир.

Микроаләмдә кедән просесләрдә фәза вә заманын јухарыдакы симметрија хассәләринин позулмасына дәлаләт едән һеч бир тәчрүби фактын олмамасы көстәрир ки, белә динамик кәмијјәтләр микросистемләр үчүн дә өз мә'насыны сахламалыдыр. Лакин, енержи, импулс, һәрәкәт мигдары моменти вә с. кими анлајышлары классик физикадан квант физикасына кечирдикдә, микросистемләрин хүсусијјәтләрини нәзәрә алмаг лазымдыр. Классик физикада системин там енержиси E онун $K(\vec{p})$ кинетик вә $U(\vec{r})$ потенсиал енержиләринин чәминә бәрабәрдир: $E = K(p) + U(r)$. Һәрәкәт мигдары моменти исә $\vec{r}$ вә $\vec{p}$ илә $\vec{L} = [\vec{r}\vec{p}]$ кими тә'јин олунур. Квант механикасында бу мүнасибәтләрин һәр икиси өз мә'насыны итирир. Координат вә импулс операторлары коммутасија етмәдијиндән ((11.32)-јә бах), микросистем координат вә импулсу ејни заманда мүәјјән гијмәт алан һаллара малик ола билмәз. Буна көрә дә системин E там енержиси бүтөвлүкдә физики мә'наја маликдир вә о, кинетик вә потенсиал енержиләринин чәми кими тә'јин олуна билмәз. Һәрәкәт мигдары моментинә кәлдикдә исә, о, (13.14)-ә әсасән $\vec{L}$ системин бахылан һалында үмумијјәтлә мүәјјән гијмәтә малик дејилдир.

§ 14. $\breve{L}^2$ ВӘ $\breve{L}_z$ ОПЕРАТОРЛАРЫНЫН МӘХСУСИ ГИЈМӘТЛӘРИ ВӘ МӘХСУСИ ФУНКСИЈАЛАРЫ

$\breve{L}^2$ вә $\breve{L}_z$ операторлары коммутасија етдијиндән ((13.15)-ә бах) онлар үмуми мәхсуси функсијалара маликдир

$$\breve{L}^2\Psi = L^2\cdot\Psi,$$
$$\breve{L}_z\Psi = L_z\cdot\Psi. \qquad (14.1)$$

Бу тәнликләри һәлл етмәк үчүн сферик координат системинә кечәк:

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

Сферик координат системиндә

$$\breve{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (14.3)$$
$$\breve{L}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\breve{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

олур. Бурадан

$$\breve{L}^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} = -\hbar^2\nabla^2_{\theta\varphi} \qquad (14.4)$$

алынар. $\breve{L}^2$ вә $\breve{L}_z$-ин ифадәләриндән көрүнүр ки, онлар јалныз полјар θ вә азимутал φ бучагларындан асылыдыр, јәгин ки, Ψ функсијасы да јалныз һәмин бучаглардан асылы олар. О, $\Psi(\theta,\varphi) = Y(\theta,\varphi)$ кими ишарә олунур. $L^2/\hbar^2 = \lambda$ гәбул етсәк, (14.1)-дә биринчи тәнлик

$$\nabla^2_{\theta\varphi}Y(\theta,\varphi) + \lambda Y(\theta,\varphi) = 0 \qquad (14.5)$$

олур. Онун һәллини

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

кими ахтарсаг, о, дәјишәнләринә ајрылыр:

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

вә ја

$$\nabla^2_\theta \Theta(\theta) + (\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta})\Theta(\theta) = 0 \qquad (14.7)$$

$$\nabla^2_\varphi \Phi(\varphi) + m^2\Phi(\varphi) = 0\,. \qquad (14.8)$$

Бурада m^2 –дәјишәнләрә ајырма сабити, $\nabla^2_\varphi = \frac{d^2}{d\varphi^2}$, $\nabla^2_\theta = \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d}{d\theta})^*$. (14.8) тәнлијинин үмуми һәлли ($k^2 + m^2 = 0$, $k = \pm im$ олдуғундан)

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

m-ин һәм мүсбәт вә һәм дә мәнфи гијмәтләр алдығыны шәртләшсәк, үмумилији позмадан ону

$$\Phi_m(\varphi) = Ce^{im\varphi} \qquad (14.9)$$

кими јазмаг олар. Көрүндүјү кими, (14.9) функсијасы периоду 2π-јә бәрабәр олан φ-нин кәсилмәз периодик функсијасыдыр. Белә функсија үчүн биргијмәтлилик шәрти периодиклик шәрти үзәринә дүшүр:

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

бурадан

$$e^{2\pi i m} = 1\,.$$

Ахырынҹы шәрт m-ин јалныз мүсбәт вә мәнфи там гијмәтләри үчүн өдәнилир. Беләликлә,

$$m = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \pm\ldots\,. \qquad (14.10)$$

Гејд едәк ки, бурада m-ин јухары сәрһәди мүәјјән дејилдир, о, (14.7) тәнлијин һәллиндән тапылыр.

(14.9) ифадәсиндәки C сабити Φ далға функсијасынын

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*_{m'}(\varphi)\Phi_m(\varphi)d\varphi = \delta_{m'm} \qquad (14.11)$$

ортонормаланма шәртиндән тапылыр. Бу интегралы $m' = m$ үчүн ачсаг,

---

*Θ вә Φ функсијалары јалныз бир дәјишәндән асылы олдуғундан ∇^2_θ вә ∇^2_φ -да хүсуси төрәмәләр там төрәмәләрлә әвәз олунмушдур.

$2\pi C^2 = 1$, $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ алыныр. Беләликлә, ∇^2_φ операторунун нормаланмыш мәхсуси функсијасы

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

мәхсуси гијмәтләри исә (14.10) чохлуғу илә верилир.

Инди дә (14.7) тәнлијини һәлл едәк. Бунун үчүн јени $\cos\theta = x$ $(-1 \le x \le 1)$ дәјишәни дахил едәк. Онда тәнлик

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

Бурадан көрүнүр ки, x ин $x=\pm1$ гијмәтләри (14.13) тәнлијинин мәхсуси нөгтәләридир, бу нөгтәләрдә тәнлијин икинҹи һәдди сонсуз олур. Бу сонсузлугдан хилас олмаг үчүн онун һәллини

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

шәклиндә ахтараг. Бу һалда (14.13) тәнлији

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

$s=\pm\, m$ гәбул едилсә, ахырынҹы һәдд дүшәр. Лакин (14.13) тәнлијинә m-ин квадраты дахил олдуғундан s-ин $+m$ вә $-m$ гијмәтләринә ујғун һәлләр ејни бир тәнлији өдәјир. Онлар арасында јалныз хәтти әлагә ола биләр (бу әлагә (14.27) илә верилмишдир). Она көрә дә бурада (14,13) тәнлијинин јалныз $s=m>0$-а ујғун һәлләрини тапаҹағыг. Бу шәрт дахилиндә (14.15) тәнлији

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

Бу тәнлик мәхсуси нөгтәләрә малик олмадығындан, онун һәллини x- ин үстлү сырасы шәклиндә ахтармаг олар:

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

Буну (14.16)-да јазсаг, a_k әмсаллары үчүн ашағыдакы рекурент дүстур алыныр:

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

a_{k+2} әмсалы a_{k+1} илә јох, a_k илә тә'јин олундуғундан $u(x)$ функсијасынын әсас һәддинин чүт вә ја тәк олмасындан асылы олараг, $u(x)$ функсијасы ја чүт вә ја да тәк функсија олар.

Далға функсијасынын сонлу галмасы үчүн (14.17) сонсуз сырасы чохһәдли (полином) илә әвәз олунмалыдыр. Бу мәгсәдлә сыраны $k=r$ һәддиндә кәсәк, јә'ни сыранын әмсалларыны елә сечәк ки, $k \le r$, үчүн $a_k \neq 0$, $k > r$ дә исә $a_k=0$ олсун. Бу шәртин өдәнилмәси үчүн (14.18) -нин сурәти $k=r$-дә сыфра бәрабәр олмалыдыр:

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

бурада $l=r+m$ әвәз етсәк.

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

олар. r вә m мүсбәт вә там әдәдләр олдуғундан l мүсбәт вә там гијмәтләр алыр. l =0,1,2,... l-ин јухары сәрһәди бурадан тапыла билмир. О, сонра (§40-а бах) мүәјјән олуначаг. m-ин јухары сәрһәди исә $l=m+r$-дән тапыла биләр. Бурада $r=0$ олдугда $m_{max}= l$ олур. m-ин мүсбәт вә мәнфи гијмәтләр алдығыны нәзәрә алсаг, $m_{min}=-l$ вә $m=0,\pm1, \pm2,..., \pm l$ олар. $l=m+r$ мүнасибәтиндән алыныр ки, l-ин верилмиш гијмәтиндә m (m магнит квант әдәди адланыр, §40-а бах), $-l$-дән $+l$-ә кими $(2l+1)$ мүхтәлиф гијмәтләр алыр. l –орбитал вә ја азимутал квант әдәди адланыр.

λ-нын (14.19) илә верилмиш гијмәтини $\frac{L^2}{\hbar^2} = \lambda$ – ифадәсиндә јазсаг, һәрәкәт мигдары моменти квадраты операторунун мәхсуси гијмәтләр чохлуғу үчүн

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

моментин мүтләг гијмәти үчүн исә

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

алыныр. Онун спектри дискретдир.

Инди дә $\breve{L}^2$ операторунун мәхсуси функсијаларыны тапаг. Бунун үчүн

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

функсијасы дахил едәк вә ондан биринчи тәртиб төрәмә көтүрәк:

$$\upsilon'(x) = 2lx(x^2-1)^{l-1} \text{ вә ја } (1-x^2)\upsilon'(x) + 2lx\upsilon(x) = 0 .$$

Бу ахырынчы бәрабәрликдән $(l+m+1)$ тәртиб төрәмә көтүрсәк,

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

алынар. Бу төрәмәләри һесабламаг үчүн Лејбнис гајдасындан истифадә едәк. Бу гајдаја көрә yz һасилинин n тәртиб төрәмәси

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

(14.21) тәнлијиндәки төрәмәләри бу дүстура көрә һесаблајанда сыфырдан фәргли һәдләри сахласаг,

$$\left[\upsilon'(1-x^2)\right]^{(l+m+1)} = (\upsilon')^{(l+m+1)}(1-x^2) + (l+m+1)(\upsilon')^{(l+m)}(-2x) + $$
$$+\frac{(l+m+1)(l+m)}{2!}(\upsilon')^{(l+m-1)}(-2),$$
$$\left[\upsilon x\right]^{l+m+1} = \upsilon^{(l+m+1)}x + (l+m+1)\upsilon^{(l+m)}1$$

алынар. Бунлары (14.21)-дә јазыб

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

әвәзи гәбул етсәк,

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

олар. $\lambda=l(l+1)$ вә $l(l+1)-m(m+1)=(l+m+1)(l-m)$ олдуғундан (14.23) тәнлији $u(x)$ функсијасы үчүн алынмыш (14.16) тәнлији үзәринә дүшүр. Демәли, $u(x)$ вә $u_1(x)$ функсијалары јалныз сабитлә фәргләнәр:

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

(14.23)-дә $m=0$ көтүрсәк, бу тәнлик

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

Лежандр чохһәдлисинин өдәдиҹи тәнлиҹин үзәринә дүшүр, доғрудан да $m=0$ вә $u_1(x)=P_l(x)$ көтүрсәк,

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

дедиҹимиз тәнлик алыныр.

(14.24) вә (14.25) ифадәләрин мүгајисәсиндән

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

олур.

$C=C'2^l l!$-дир. $u(x)$ үчүн тапылмыш бу ифадәни (14.14)-дә јеринә јазыб, $s=m>0$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

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

аларыг.

$P_l^m(x)=(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x)$ чохһәдлиси бирләшдирилмиш *Лежандр чохһәдлиси* адланыр. $P_l(x)$-ин ифадәсини бурада јазсаг, о,

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

олур $(\cos\theta=x)$.

Бурадан һәрәкәт мигдары моменти квадраты операторунун мәхсуси функсијалары үчүн

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

ифадәси алыныр. C_l^m сабити $\Theta_l^m(x)$ функсијасынын нормаланма шәртиндән тә'јин олунур.

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

m-ин мәнфи гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијалар

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

шәртиндән тапылыр.

(14.26) вә (14.27') ифадәләринин көмәји илә нормаланма шәрти

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

кими јазыла биләр. Бу ифадәдән $(l+m)$ дәфә һиссә-һиссә интеграл алаг.

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

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

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)^l dx=\frac{(l!)^2 2^{2l+1}}{(2l+1)!}$$

бәрабәрликләрини нәзәрә алсаг, нормаланма сабити үчүн

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

аларыг. Беләликлә,

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

(14.6), (14.12) вә (14.27)-дән һәрәкәт мигдары моменти квадраты операторунун мәхсуси функсијалары

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(1-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{14.28'}$$

олур.

Јухарыда гејд олундуғу кими, бу функсијалар (14.1)-ин икинчи тәнлијини дә өдәмәлидир:

$$\breve{L}_z Y_l^m(\theta,\varphi)=\hbar m Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{14.29}$$

јә'ни $L_z=\hbar m$ алыныр.

Бурадан алыныр ки, һәрәкәт мигдары моментинин (вә ја l-ин) верилмиш гијмәтиндә онун L_z пројексијасы $-l$ илә $+l$ арасында јерләшән $(2l+1)$ мүхтәлиф гијмәт алыр. z оху ихтијари сечилдијиндән моментин L_x вә L_y компонентләри һаггында да ејни сөзләри демәк олар. Лакин бу һеч дә $Y_l^m(\theta,\varphi)$ функсијасынын $\breve{L}_x$ вә $\breve{L}_y$ операторларынын, $l = 0$ һалы мүстәсна олмаг шәртилә (ашағы бах), мәхсуси функсијалары олмасы демәк дејилдир. Белә ки, бу үч оператор коммутасија етмир вә онлар үмуми мәхсуси функсијалара малик дејилдир.

Демәли, һәрәкәт мигдары моменти квадратынын гијмәтләри чырлашмышдыр, јә'ни l-ин һәр бир верилмиш гијмәтинә m-ин гијмәти илә фәргләнән $(2l+1)$ сајда $Y_l^m(\theta,\varphi)$ функсијасы ујғун кәлир.

$l=0$ оланда моментин һәр үч ох үзрә пројексијасы да сыфыр олур. Бу јеканә һалдыр ки, моментин үч пројексијасы ејни заманда мүәјјән гијмәт (сыфыр) алыр. Бу һалда $Y_0^0(\theta,\varphi) = \text{const}$ вә о, $\breve{L}_x, \breve{L}_y, \breve{L}_z$ операторларынын үмуми мәхсуси функсијасы олур. Дедијимиз кими, системин икинчи белә һалы јохдур. Доғрудан да, моментин квадратынын мәхсуси гијмәти $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, онун пројексијасына ујғун $L_z^2 = \hbar^2 l^2$ максимум гијмәтиндән һәмишә бөјүкдүр. Бу ики гијмәт бир-биринин үзәринә дүшмүш олсајды, бахылан пројексија максимум олан һалда дикәр ики пројексија сыфра бәрабәр оларды. Лакин бу мүмкүн дејилдир, чүнки пројексијанын биринин мүәјјән гијмәтиндә, дикәр икисинин гијмәти гејри-мүәјјән галыр.

Инди дә $\breve{L}^2$ вә $\breve{L}_z$ операторларынын диагонал олдуғу тәсвирдә, јә'ни онлар үчүн (14.20) вә (14.29) бәрабәрликләри өдәнилдији һалда $\breve{L}_+$, $\breve{L}_-$, $\breve{L}_x$ вә $\breve{L}_y$ операторларынын сыфырдан фәргли матриса елементләрини тапаг.

(13.16) јердәјишмә мүнасибәтләриндә (14.29) тәнлијини нәзәрә алсаг,

$$\breve{L}_z \breve{L}_\pm Y_l^m = L_\pm(\breve{L}_z \pm 1)Y_l^m = (m \pm 1)\breve{L}_\pm Y_l^m$$

аларыг. $\breve{L}_\pm Y_l^m = \Phi_l^{m'}$ кими ишарә едиб, ахырынчы тәнлији

$$\breve{L}_z \Phi_l^{m'} = (m \pm 1)\Phi_l^{m'} = m' \Phi_l^{m'}$$

кими јазаг. Бурадан алынар ки, $\Phi_l^{m'}$ вә ја $\breve{L}_\pm Y_l^m$ функсијасы $\breve{L}_z$ операторунун $(m\pm1)$ мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијасыдыр:

$$\breve{L}_\pm Y_l^m(\theta,\varphi) = \text{const}\, Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi).$$

Бу бәрабәрлији солдан $Y_l^{m'}(\theta,\varphi)$ функсијасына вуруб, θ вә φ-ин бүтүн дәјишмә областлары үзрә интегралласаг,

$$\int Y_l^{m'}(\theta,\varphi)\breve{L}_\pm Y_l^m(\theta,\varphi)d\Omega = \text{const}\int Y_l^m(\theta,\varphi)Y_l^{m\pm1}(\theta,\varphi)d\Omega \qquad (14.30)$$

алынар.

Үмумијјәтлә, операторун L_{mn} матриса елементи бра-вә кет-векторларла (бах §29)

$$L_{mn} = \langle m / L / n \rangle = \int \Psi_m^* \breve{L} \Psi_n (dx) \qquad (14.31)$$

шәклиндә дә јазылыр. Y_l^m сферик функсијалар үчүн ортонормаланма шәртинин өдәнилдијини нәзәрә алсаг, (14.30) бәрабәрлији

$$\int Y_l^{m'} L_\pm Y_l^m d\Omega = \langle lm' / L_\pm / lm \rangle = \text{const}\,\delta_{m'm} \qquad (14.30')$$

(14.30′) ифадәси $\breve{L}_+$ вә $\breve{L}_-$ операторлары үчүн

$$\langle m' / L_+ / m \rangle = C_1 \delta_{m'm+1}; \ \langle m' / L_- / m \rangle = C_2 \delta_{m'm-1}$$

олар, јә'ни $\breve{L}_+$ вә $\breve{L}_-$ операторлары үчүн јалныз

$$(L_+)_{m+1,m} = \langle m+1 / L_+ / m \rangle \ \text{вә} \ (L_-)_{m-1,m} = \langle m-1 / L_- / m \rangle$$

матриса елементләри сыфырдан фәргли галыр. Бунлары һесабламаг үчүн (13.16) мүнасибәтләринин ахырынчысындан истифадә едәк. $\breve{L}^2$ вә $\breve{L}_z$ диагонал олдуғу тәсвирдә (13.16) ифадәсинин сағ тәрәфи диагоналдыр, онун сол тәрәфи дә диагонал олар:

$$\int Y_l^m \breve{L}_\pm \breve{L}_\mp Y_l^m d\Omega = \langle lm / L_\pm L_\mp / lm \rangle = \hbar^2\left[l(l+1) - m^2 \pm m\right].$$

Бурада $\breve{L}_- = (\breve{L}_+)^*$ олдуғуну вә (14.3) мүнасибәтләрини нәзәрә алсаг,

$$\langle lm / L_- L_+ / lm \rangle = \langle lm / L_- / lm' \rangle \langle lm' / L_+ / lm \rangle =$$
$$= \left|\langle l, m+1 / L_+ / lm \rangle\right|^2 = \hbar^2\left[l(l+1) - m^2 - m\right],$$
$$\langle lm / L_+ L_- / lm \rangle = \langle lm / L_+ / lm' \rangle \langle lm' / L_- / lm \rangle =$$
$$= \left|\langle l, m-1 / L_- / lm \rangle\right|^2 = \hbar^2\left[l(l+1) - m^2 + m\right]$$

вә ја

$$\langle l, m+1 / L_+ / lm \rangle = \hbar\sqrt{(l(l+1) - m(m+1)} = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)} \qquad (14.32)$$
$$\langle l, m-1 / L_- / lm \rangle = \hbar\sqrt{(l(l+1) - m(m-1)} = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}$$

алыныр. Башга сөзлә $\breve{L}_+$ вә $\breve{L}_-$ операторларынын $Y_l^m(\theta,\varphi)$ -јә тә'сири

$$\breve{L}_+ Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\ \ Y_l^{m+1}(\theta,\varphi)\,,$$

$$\breve{L}_- Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\ Y_l^{m-1}(\theta,\varphi) \tag{14.33}$$

кими тә'јин олунур. (13.15) вә (14.32) бәрабәрликләриндән асанлыгла $\breve{L}_x$ вә $\breve{L}_y$ операторларынын сыфырдан фәргли матриса елементләри үчүн ашағыдакы ифадәләри аларыг:

$$\begin{gathered}\langle l,m+1 / L_x / lm\rangle = \frac{1}{2}\langle l,m+1 / L_+ / lm\rangle = \\ = \frac{1}{2}\langle lm / L_- / l,m+1\rangle = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\ ; \\ \langle l,m+1 / L_y / lm\rangle = \frac{1}{2i}\langle l,m+1 / L_+ / lm\rangle = \\ = -\frac{1}{2i}\langle lm / L_- / l,m+1\rangle = -\frac{\hbar}{2i}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\end{gathered} \tag{14.34}$$

§ 15. ЧҮТЛҮК. ҺАЛЫН ЧҮТЛҮЈҮ

Классик механикада олдуғу кими, квант механикасында да енержинин, импулсун вә һәрәкәт мигдары моментинин сахланма ганунлары фәзанын симметрија хассәләри илә әлагәдардыр. Доғрудан да, §11–13-дә көрдүк ки, заманын һесабланма башланғычынын ихтијари сечилмәси, координат системинин фәзада паралел көчүрүлмәси вә онун өз башланғычы әтрафында дөнмәси чеврилмәләринә көрә гапалы системин Һамилтон оператору инвариант галыр вә бу да јухарыдакы үч сахланма ганунуна кәтирир. Лакин бунун әкси дә мүмкүндүр: сахланма ганунунун варлығы системин мүәјјән симметријаја малик олдуғуна дәлаләт едә биләр. Мәсәлә бурасындадыр ки, јухарыда адыны чәкдијимиз үч чеврилмә кәсилмәдән баш верән чеврилмәләр олдуғундан онлар үчүн сонлу чеврилмә һәмишә сонсуз кичик чеврилмәләрин чәминә бәрабәр иди. Бу чеврилмәләрин характери классик кәмијјәтин дәјишмә (кәсилмәдән) характери үзәринә дүшүр вә үч квант сахланма гануну өз классик аналоғуна малик олур. Анчаг квант механики системин симметрија шәртләри кәсилмәз чеврилмәләрлә јанашы дискрет чеврилмәләрлә дә верилә биләр. Бу ахырынчылары сонсуз кичик чеврилмәләрин чәми кими көстәрмәк мүмкүн олмадығындан классик физикада heч бир сахланма ганунуна кәтирмир. Квант механикасында исә кәсилмәз вә дискрет чеврилмәләр ејни һүгуглу олдуғундан онларын һәр икиси мүәјјән сахланма ганунлары илә әлагәдар олур. Демәли, дискрет чеврилмәләрә ујғун сахланма ганунларынын классик аналогу јохдур.

Јенә дә фәзанын симметријасы илә әлагәдар олан ганунлардан бири үзәриндә дајанаг. Зәррәчијин бүтүн координатларынын ишарәсини ејни заманда дәјишдикдә алынан

$$x \to -x,\ y \to -y,\ z \to -z \tag{15.1}$$

чеврилмә **күзкү әкси** вә ја **фәза инверсија** чеврилмәси адланыр. Бу чеврилмә сағ системин координат охларынын ејни заманда истигамәтини дәјишдикдә онун сол системә (вә әксинә) чеврилмәсинә еквивалентдир.

Дахилиндә електромагнит вә нүвә гүввәләри тә'сир едән гапалы системин Һамилтон оператору бу чеврилмәјә көрә инвариант галыр. Белә системләрдә баш верән физики һадисәнин характери сағ вә ја сол координат системинин сечилмәсиндән асылы олмур (сағ вә сол симметрија). Бу инвариантлыг систем харичи сферик симметрик саһәдә олдуғу вә саһәнин мәркәзи координат башланғычы (инверсија мәркәзи) үзәринә дүшдүјү һалда да сахланыр. Системдә зәиф гаршылыглы тә'сир гүввәләри тә'сир етдикдә исә системин Һамилтон оператору бу чеврилмәјә көрә инвариант галмыр. Бу фикир илк дәфә 1956-чы илдә Ли вә Јанг тәрәфиндән сөјләнмишди. Бу фәрзијәнин нә дәрәчәдә доғру олдуғуну јохламаг үчүн апарылан тәчрүби тәдгигатлар көстәрди ки, зәиф гаршылыглы тә'сирлә кедән просесләрдә сағ вә сол симметрија позулур, јә'ни бахылан физики һадисәнин бу системләрдә кедиши мүхтәлиф олур.

Фәза инверсија операторуну $\breve{\mathrm{I}}$ илә ишарә едәк. Онун $\Psi(x,t)$ далға функсијасына тә'сири фәза координатларынын ишарәсинин дәјишмәсинә кәтирир:

$$\breve{I}\Psi(x,y,z,t) = \Psi(-x,-y,-z,t) \tag{15.2}$$

Ψ-ин $\breve{\mathrm{I}}$ операторунун мәхсуси функсијасы олдуғуну фәрз етсәк, бу тә'сир, дикәр тәрәфдән

$$\breve{I}\Psi = \lambda\Psi(x,y,z,t) \tag{15.3}$$

шәклиндә јазылар. $\breve{I}$ инверсија операторунун λ мәхсуси гијмәтләр спектрини тапмаг үчүн (15.2) вә (15.3) тәнликләринә $\breve{I}$ оператору илә бир дә тә'сир едәк:

$$\breve{I}^2\Psi = \breve{I}\Psi(-x,-y,-z,t) = \Psi(x,y,z,t)\,, \tag{15.2'}$$

$$\breve{I}^2\Psi(x,y,z,t) = \lambda^2\Psi(x,y,z,t)\,. \tag{15.3'}$$

Бу тәнликләрин мүгајисәсиндән $\lambda^2=1$, $\lambda=\pm1$ алыныр. Демәли, $\breve{I}$ операторунун онун мәхсуси функсијасына тә'сири ја функсијаны дәјишмир, ја да онун јалныз ишарәсини дәјишир. $\lambda_1=1$ гијмәтинә ујғун далға функсијасы инверсија дәјишмәсинә көрә **чүт**. $\lambda_2=-1$ уіғун функсија исә **тәк** функсија адланыр.

Далға функсијасынын бу хассәси онун тәсвир етдији зәррәчијин дахили хүсусијјәтләриндән асылы олур. Она көрә дә $\breve{I}\ \Psi = \Psi$ кими далға функсијалары илә тәсвир олунан зәррәчикләрин дахили чүтлүјү **мүсбәт**, $\breve{I}\ \Psi = -\Psi$ функсијалары илә тәсвир олунан зәррәчикләрин дахили чүтлүјү исә **мәнфи** адланыр.

Инди дә гапалы системин верилмиш һалынын чүтлүјүнү тә'јин едәк. Јухарыда гејд етдик ки, електромагнит вә нүвә гаршылыглы тә'сир һалларында вә систем харичи сферик симметрик саһәдә олдуғу һалда гапалы системин Һамилтон оператору фәза инверсија чеврилмәсинә көрә инвариант галыр:

$$\breve{I}\breve{H} - \breve{H}\breve{I} = 0\,,$$

јә'ни $\breve{H}$ операторунун мәхсуси функсијалары $\breve{I}$ операторунун да мәхсуси функсијалары олур.

$\breve{I}$ инверсија операторунун јухарыдакына охшар оларат мәхсуси гијмәтләрини тапсаг

$$\breve{I}^2\Psi_I = \Psi_I = I^2\cdot\Psi_I$$

вә $I=\pm1$ алынар; бурада $\Psi_I(x,t)$ инверсија операторунун мәхсуси функсијасыдыр. $I=1$ олан системин һалы чүт, онун чүтлүјү мүсбәт, $I=-1$ оланда исә системин һалы тәк, чүтлүјү исә мәнфи адланыр. Инверсија оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан вә о Һамилтон оператору илә коммутасија етдијиндән һалын чүтлүјү һәрәкәт интегралы олур. Бүтүн сахланма ганунлары кими чүтлүјүн сахланма гануну да системин һалынын дәјишмә имканларыны мәһдудлашдырыр. Гапалы системин һалы мүәјјән чүтлүјә маликдирсә, бу чүтләк замана көрә сахланыр, јә'ни верилмиш һәр һансы t_0 башланғыч анда системин һалы чүтдүрсә, заман кечдикчә о, һеч вахт тәк һала кечмир. Әксинә, системин һалы тәк олдуғда о һәмишә тәк һалда да галыр.

Асанлыгла көстәрмәк олар ки, инверсија чеврилмәләринә көрә (13.6) һәрәкәт мигдары моменти квадраты оператору вә онун проjексијаларына уіғун (13.7) операторлары инвариант галыр. Башга сөзлә, $\breve{I}$ инверсија оператору илә $\breve{L}^2$ һәрәкәт мигдары моменти квадраты оператору вә мәсәлән, $\breve{L}_z$ оператору коммутасија едир:

$$\breve{L}^2\breve{I} - \breve{I}\breve{L}^2 = 0 \qquad \breve{L}_z\breve{I} - \breve{I}\breve{L}_z = 0\,.$$

Бу үч кәмијјәт системин ејни бир һалыны тә'јин едир, јә'ни онлар ејни заманда өлчүлүр. Дикәр тәрәфдән, бурадан чыхыр ки, $\breve{L}^2$ вә $\breve{L}_z$ операторларынын (14.33) мәхсуси функсијалары $\breve{I}$ операторунун да мәхсуси функсијаларыдыр. $\breve{I}$ оператору үчүн

$$\breve{I}Y_l^m(\theta,\varphi) = I\cdot Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{15.4}$$

тәнлији өдәнилир. Декарт координат системиндә $x\to-x$, $y\to-y$, $z\to-z$ инверсија чеврилмәләри сферик координат системиндә

$$r\to r,\ \theta\to\pi-\theta,\ y\to y+\pi \tag{15.5}$$

инверсија чеврилмәсинә еквивалентдир. (14.28)-дә инверсија үчүн әһәмијјәти олмајан сабит вуруғу нәзәрә алмасаг,

$$\breve{I}Y_l^m(\theta,\varphi) = Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = P_l^m((\cos(\pi-\theta))e^{im(\varphi+\pi)} \tag{15.6}$$

олар.

Бурада $e^{im(\varphi+\pi)} = e^{im\varphi}e^{im\pi} = (-1)^m e^{im\varphi}$ вә $\cos(\pi-\theta) = -\cos\theta$ олдуғундан, бирләшдирилмиш $P_l^m(x=\cos\theta)$ Лежандр полиномунун (14.26) ифадәсиндән $P_l^m(-x) = (-1)^{l+m}P_l^m(x)$ аларыг. Бунлары (15.6)-да нәзәрә алсаг,

$$\breve{I}Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^{l+m+m}Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^l Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{15.7}$$

олур. (15.4) вә (15.7) -нин мүгајисәсиндән инверсија операторунун мәхсуси гијмәти

$$I = (-1)^l \tag{15.8}$$

олур. (l,m,I) һалында олан зәррәчијин $\lambda=\pm1$ кими тә'јин олунан дахили чүтлүјүнү дә нәзәрә алсаг, онун бахылан һалынын чүтлүјү

$$I = (-1)^l\lambda \tag{15.9}$$

кими тә'јин олунар. Демәли, l-ин чүт гијмәтинә уіғун һалын чүтлүјү $\lambda=1$ оланда мүсбәт, $\lambda=-1$ оланда мәнфи олур; l-ин тәк гијмәтләриндә исә һалын чүтлүјү $\lambda=1$ оланда мәнфи, $\lambda=-1$ оланда мүсбәт олур.

Систем гаршылыглы тә'сирдә олмајан зәррәчикләрдән тәшкил олундугда системин бахылан һалынын чүтлүјү зәррәчикләрин уіғун һалларынын чүтлүкләри һасили кими тә'јин олунур. Доғрудан да, белә системин далға функсијасы, §5-дә көстәрдијимиз кими, ајры-ајры зәррәчикләрин далға функсијалары һасилинә бәрабәр олдуғундан, системин бахылан һалынын чүтлүјү

$$I = (-1)^{\sum_i l_i} \prod_i \lambda_i$$

шәклиндә јазылар, бурада l_i – i-чи зәррәчијин һәрәкәт мигдары моменти ($L_i = \hbar\sqrt{l_i(l_i+1)}$ мә'нада), λ_i – онун дахили чүтлүјүдүр.

Чүтлүјүн сахланма гануну јалныз електромагнит вә нүвә гүввәләринин тә'сири илә кедән физики һадисәләрдә дәгиг өдәнилир. Белә гапалы системин чүтлүјү мүсбәт олан һалдан чүтлүјү мәнфи олан һала вә әксинә кечиди гадаған олунмуш олур. Елементар зәррәчикләрин зәиф гаршылыглы тә'сири илә кедән чеврилмә просесләриндә (мәсәлән, $n \to p + e^- + \bar{\upsilon}_e$, $\mu \to e + \bar{\upsilon}_e + \upsilon_\mu$, $\pi \to \mu + \bar{\upsilon}_\mu$ вә и.а. кими чеврилмәләрдә) исә чүтлүк сахланмыр, белә системләрин Һамилтон оператору инверсија чеврилмәсинә көрә инвариант галмыр вә онларын сағ вә сол координат системләриндә кедиши мүхтәлиф олур. Демәли, чүтлүјүн сахланма гануну, тәбиәтин универсал физики гануну дејил, о, һәмишә сахланмыр.

§ 16. ГЕЈРИ- МҮӘЈЈӘНЛИК МҮНАСИБӘТИ (ПРИНСИПИ)

Классик физикада бүтүн кәмијјәтләр бир-бири илә коммутасија едир. Квант механикасында исә һәр истәнилән ики кәмијјәт үчүн бу шәрт өдәнилмир. (11.32) вә (13.12)-(13.14) мүнасибәтләриндән көрүнүр ки, радиус векторун, импулсун вә һәрәкәт мигдары моментинин бә'зи компонентләри ејни заманда дәгиг өлчүлүр (ујғун операторлар коммутасија едир), дикәр компонентләри исә ејни заманда дәгиг өлчүлә билмир (ујғун операторлар коммутасија етмир). Бу ахырынчы нөв кәмијјәтләр квант механикасында ејни заманда јалныз мүәјјән дәгигликлә (хәта илә) өлчүлә биләр. Белә кәмијјәтләрә ујғун операторлар арасындакы коммутасија мүнасибәтләри мә'лум олдугда, онларын ејни заманда өлчүлмәсиндә бурахылан хәталар арасында да мүәјјән мүнасибәт тапмаг олур. Бу мүнасибәтләр гејри-мүәјјәнлик мүнасибәти вә ја **гејри-мүәјјәнлик принсипи** адланыр. Бу принсип коммутасија етмәјән кәмијјәтләр ејни заманда өлчүлдүкдә бурахылан хәталарын һасилинин ашағы сәрһәддини тә'јин едир. Бу принсипдән бир нәтичә олараг чыхыр ки, гејри-коммутатив кәмијјәтләрдән бири дәгиг өлчүлдүкдә, дикәри һаггында һеч бир мүәјјән мә'лумат алмаг мүмкүн олмур вә әксинә.

Ејни заманда дәгиг өлчүлә (мүәјјән гијмәт ала) билмәјән L вә F физики кәмијјәтләринә ујғун өзүнә гошма операторлар үчүн

$$\hat{L}\hat{F} - \hat{F}\hat{L} = i\hat{G} \qquad (16.1)$$

мүнасибәтинин өдәнилдијини фәрз едәк.

Системин $\Psi(x,t)$ ихтијари һалында L вә F физики кәмијјәтләрин

$$\bar{L} = \int \Psi^* \hat{L}\Psi(dx), \quad \bar{F} = \int \Psi^* \hat{F}\Psi(dx)$$

орта гијмәтләрини һесаблајыб, онларын көмәји илә јени

$$\Delta\hat{L} = \hat{L} - \bar{L} \quad \text{вә} \quad \Delta\hat{F} = \hat{F} - \bar{F}$$

операторларыны дахил едәк. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, $\Delta\hat{L}$ вә $\Delta\hat{F}$ операторлары да өзүнә гошма операторлардыр вә онлар (16.1) мүнасибәтини өдәјир:

$$\Delta\hat{L}\Delta\hat{F} - \Delta\hat{F}\Delta\hat{L} = \hat{L}\hat{F} - \hat{F}\hat{L} = i\hat{G}. \qquad (16.2)$$

Һәмишә мүсбәт гијмәт алан

$$I(\alpha) = \int \left|(\alpha\Delta\hat{L} - i\Delta\hat{F})\Psi\right|^2 (dx) \ge 0 \qquad (16.3)$$

интегралыны дахил едәк, бурада Ψ далға функсијасы, α – ихтијари һәгиги параметрдир. $\Delta\hat{L}$ вә $\Delta\hat{F}$ өзүнә гошма операторлар олдуғундан (16.3) интегралыны

$$I(\alpha) = \int \Psi^* (\alpha\Delta\hat{L} + i\Delta\hat{F})(\alpha\Delta\hat{L} - i\Delta\hat{F})\Psi(dx) \ge 0$$

кими јазаг. Интегралалты һасили ачыб,

$$I(\alpha) = \alpha^2 \int \Psi^* (\Delta\hat{L})^2 \Psi(dx) + \int \Psi^* (\Delta\hat{F})^2 \Psi(dx) -$$
$$- i\alpha \int \Psi^* (\Delta\hat{L}\Delta\hat{F} - \Delta\hat{F}\Delta\hat{L})\Psi(dx) \ge 0.$$

Үчүнчү интегралда (16.2) бәрабәрлијини нәзәрә алсаг, (6.4)-ә әсасән

$$I(\alpha) = \alpha^2 \overline{(\Delta L)^2} + \alpha\bar{G} + \overline{(\Delta F)^2} \ge 0$$

алынар. Ахырынчы мүнасибәти

$$I(\alpha) = \overline{(\Delta L)^2}\left(\alpha + \frac{\bar{G}}{2\overline{(\Delta L)^2}}\right)^2 + \overline{(\Delta F)^2} - \frac{\bar{G}^2}{4\overline{(\Delta L)^2}} \ge 0 \qquad (16.4)$$

кими јазаг. α-нын ихтијари гијмәтиндә $I(\alpha) \ge 0$ галмасы үчүн

$$\overline{(\Delta L)^2}\ \overline{(\Delta F)^2} \ge \frac{\bar{G}^2}{4} \qquad (16.5)$$

бәрабәрсизлији өдәнилмәлидир.

(16.5) мүнасибәти L вә F физики кәмиjjәтләри үчүн **гејри-мүәjjәнлик мүнасибәти** адланыр. Бу мүнасибәт L вә F ејни заманда өлчүлдүкдә бурахылан орта квадратик хәталар һасилинин ашағы сәрһәддини вә ја минимал гиjмәти тә'јин едир.

Хүсуси һалда $\breve{L} = \breve{x}$ вә $\breve{F} = \breve{p}_x$ көтүрсәк (бу һалда $\overline{G} = \hbar$ олур), (16.5)-дән Һејзенбергин мәшһур гејри-мүәjjәнлик мүнасибәтини аларыг:

$$\overline{(\Delta p_x)^2}\ \overline{(\Delta x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \tag{16.6}$$

Бурадан чыхыр ки, зәррәчијин координаты дәгиг өлчүлдүкдә онун импулсунун өлчүлмәсиндә бурахылан хәта кифајәт гәдәр бөјүк олур вә әксинә. Системин бахылан һалында, мәсәлән, импулсу мүәjjән гиjмәтә маликдирсә $(\overline{(\Delta p_x)^2} = 0)$, онун координаты (вәзиjjәти) тамамилә гејри-мүәjjән галыр $(\overline{(\Delta x)^2} \to \infty)$.

Доғрудан да, мүәjjән импулса малик олан зәррәчијин һалы (11.18′) мүстәви де-Бројл далғасы илә тәсвир олунур. Онун координатларынын пајланма еһтималы сыхлығы исә $\left|\Psi_p(x,t)\right|^2 = \mathrm{const}$ олур. Башга сөзлә, x-ин $-\infty \leq x \leq +\infty$ интервалындакы бүтүн гиjмәтләри ејни еһтималлыдыр вә зәррәчијин фәзанын мүхтәлиф нөгтәләриндә олма еһтималлары бир-биринә бәрабәрдир. Ејнилә, фәзанын мүәjjән x_o нөгтәсиндә олан зәррәчик мүәjjән импулса малик ола билмәз, белә зәррәчик үчүн импулсун бүтүн гиjмәтләри ејни еһтималлы олур.

Доғрудан да, белә зәррәчик $\Psi_{x_o}(x) = \delta(x - x_o)$ функсијасы илә тәсвир олунур (бах(11.7)) вә онун импулсунун пајланма еһтималы $|\,C_{xo}(p)\,|^2$ илә верилир. $C_{x_o}(p)$-нин

$$C_{x_o}(p) = \int \Psi_p^*(x)\Psi_{x_o}(x)(dx)$$

ифадәсиндә $\Psi_{x_o}(x)$-ин гиjмәтини јазанда

$$C_{x_o}(p) = \int \Psi_p(x)\delta(x - x_o)(dx) = \Psi_p(x_o) = \mathrm{const}$$

олар, jә'ни импулсун $-\infty \leq p \leq +\infty$ интервалындакы бүтүн гиjмәтләри ејни еһтималлыдыр.

(16.6) мүнасибәтиндән алыныр ки, квант механики систем x вә p_x физики кәмиjjәтләрин һәр икисинин гејри-мүәjjән гиjмәт алдығы һалларда ола биләр вә бу һалларда онларын өлчүләриндәки квадратик орта хәталар арасындакы рабитә (16.6) ифадәси илә тә'јин олунур. Лакин, онларын һәр икисинин мүәjjән гиjмәтә малик олдуғу һаллар (Δx=0, Δp=0) квант механики систем үчүн мүмкүн дејилдир.

Квант механикасында импулс анлајышы классик мә'наны сахламыр. О, координатла, ејни заманда өлчүлә билмәдији кими, $\vec{p} = m\dot{\vec{r}}$ кими дә тә'јин олунмур.

$\hbar$-ын гиjмәти чох кичик олдуғундан гејри-мүәjjәнлик мүнасибәти јалныз микросистемләр үчүн мүһүмдүр. Бә'зи һалларда исә (квазиклассик јахынлашмада, §32-јә бах) микросистемин квант тәсвири онун классик тәсвириндән чох аз фәргләнир. Белә һалларда, тәхмини оларағ, x вә p_x-ин ејни заманда гиjмәт алдығыны вә импулсун координатдан асылы олдуғуну гәбул етмәк олар.

Бурадан бир нәтичә кими алыныр ки, квант механикасында зәррәчијин трајекторијасы анлајышы мөвчуд дејилдир. Зәррәчикләр ја јалныз импулсларына вә ја да јалныз координатларына көрә сечилә биләр. Демәли, квант механикасында системин һалы классик физикадакы кими тәсвир олунмур. Классик физикада системин һәрәкәт һалыны тә'јин етмәк үчүн бахылан (башланғыч) анда онун бүтүн координат вә импулслары верилир, онун әсасында һәрәкәт тәнликләри васитәсилә системин бүтүн сонракы анлардакы һәрәкәт тәрзи, jә'ни x вә p_x-ләрин замандан асылылыг гануну тапылыр вә сонра (xp_x) фәзасында белә нөгтәләрин һәндәси јери—трајекторијасы гурулур. Квант механикасында системин һалыны тә'јин етмәк үчүн исә, јухарыда дедикләримизә әсасән, ону тәшкил едән зәррәчикләрин ја јалныз координатларынын вә ја да јалныз импулсларынын верилмәси кифајәтдир. Беләликлә, квант механикасында системин һалы даһа аз сајда кәмиjjәтләр васитәсилә верилир, jә'ни классик бахымдан, даһа аз тәфсилатла тәсвир олунур.

Системин бахылан һалында ејни заманда мүәjjән гиjмәтә малик олмајан физики кәмиjjәтләр, јәгин ки, ејни бир чиһазла өлчүлә билмәз. Белә кәмиjjәтләри өлчмәк үчүн јалныз координатлары (x) вә јалныз импулслары (p) өлчән ики мүхтәлиф нөв чиһаздан истифадә етмәк лазымдыр. Бунунла әлагәдар олараг иддиа олунур ки, квант механикасында микросистемин һалы бир-бирини инкар едән ики мүхтәлиф јолла тәсвир олунур. Бу ики тәсвир үсулу һалын классик мә'нада там тәсвирини тә'мин етмәк үчүн бир-бирини тамамлајыр. Квант механикасында мөвчуд олан бу вәзиjjәтә Борун **тамамлама принсипи** дејилир. Бора көрә бахылан чиһаз операторлары бир-бирилә коммутасија етмәјән кәмиjjәтләрдән бирини дәгиг өлчүрсә, дикәри һаггында һеч бир мә'лумат верә билмир вә әксинә.

Гејри-мүәjjәнлик мүнасибәтинин көмәји илә өлчүләри мәһдуд олан фәзада һәрәкәт едән зәррәчијин кинетик енержисини (сүр'әтини) гиjмәтләндирмәк олар. Фәрз едәк ки, белә фәза өлчүләри l олан кубдур. Онда системин далға функсијасы јалныз бу кубун дахилиндә сыфырдан фәргли галыр, ондан кәнарда исә сүр'әтлә сыфра јахынлашыр. Зәррәчијин фәзада вәзиjjәтини тапмаг истәсәк, бурахылан орта квадратик хота, јәгин ки, $\overline{(\Delta x)^2} = l^2$ олар вә зәррәчијин импулсу $\overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4l^2}$ дәгиглији илә тә'јин олунар.

Үмумилији позмадан һесабат системинин башланғычыны $\bar{p} = 0$ нөгтәсиндә көтүрсәк, $\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = \overline{p^2}$ вә зәррәчијин орта кинетик енержиси

$$\frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2m} = \frac{\overline{p^2}}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8ml^2} \tag{16.7}$$

олар. Һәмин фәзанын өлчүләрини кетдикчә кичилдәрәк $l \to 0$ зәррәчијин фәзада локализә олунма дәрәчәсини артырмаг истәсәк, онун үзәриндә кетдикчә артан иш көрмәли оларыг. Демәли, зәррәчик локализә едилмиш фәзанын өлчүләри кичик олдугча, онун кинетик енержиси бөјүк олур. Бу нәтичә тәчрүбәдә тәсдиг олунур. Доғрудан да, атомун (өлчүләри $l \sim 10^{-8}$ *см*) дахилиндә һәрәкәт едән електронларын кинетик енержиси, (16.7)-јә ујғун олараг, 100 *eB*, нүвәнин (өлчүләри $l \sim 10^{-13}$) дахилиндәки нуклонун (протон вә ја нејтронун) енержиси исә 10^6 *eB* вә ја бир *MeB* (*MeB* $=10^6$ *eB*) тәртибиндәдир.

§ 17. МҮХТӘЛИФ САҺӘЛӘРДӘКИ ҺӘРӘКӘТ ҮЧҮН ШРЕДИНКЕР ТӘНЛИЈИ

§9-да көстәрдик ки, квант механикасынын әсас тәнлији үмуми шәкилдә

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{9.8}$$

кими јазылыр. Лакин һәмин параграфда гәтирилән мүлаһизәләр системин $\hat{H}$ Һамилтон операторунун јалныз үмуми хассәләрини ашкар етмәјән имкан верир, аналитик ифадәсинин тапылмасы мәсәләси исә ачыг галмышды.

Физики кәмијјәтә ујғун операторун тапылмасы үчүн квант механикасында үмуми бир гајда јохдур. "x - тәсвириндә" координат операторуну тә'јин едәндә операторун тә'рифиндән вә статистик орта гијмәт анлајышындан, импулс вә һәрәкәт мигдары моменти операторларынын ифадәсини тапанда исә фәзанын бирчинс вә изотроп олмасы хассәләриндән истифадә етдик. Дикәр тәрәфдән көстәрдик ки, координат вә импулс операторлары мә'лум оларса, ујғунлуг принсипиндән истифадә едәрәк, һәрәкәт мигдары моменти операторуну тапмаг олар. Физики кәмијјәтләрә ујғун хәтти вә ермит операторларын бу ахырынчы гурулма јолу үмуми характер дашыјыр вә бахылан тәсвирдә координат вә импулс операторлары мә'лум олдугда квант механикасында истифадә олунан операторларын там системини гурмаг олур. Әлбәттә, дахил едилән бу вә ја башга постулатын (принсипин) доғрулуғу јалныз ондан чыхан нәтичәләрин тәчрүбәдә тәсдиг олунмасы илә исбат олуна биләр.

Классик механикада системин там енержиси кинетик вә потенсиал енержиләрин чәминә бәрабәрдир. Там енержинин координат вә импулсдан асылылығыны көстәрән ифадә исә системин Һамилтон функсијасы адланыр.

$$H(q,p,t) = K(p) + U(q,t).$$

Бурадан, ујғунлуг принсипинә көрә, там енержи оператору кинетик енержи оператору *K(p)* илә *U(q,t)* потенсиал енержи операторунун чәминә бәрабәр олар. Там енержи операторунун координат вә импулс операторлары илә верилмиш ифадәсинә исә квант механики системин Һамилтон оператору вә ја һамилтонианы дејилир.

Системин һамилтон операторунун аналитик ифадәси һәр һансы бир тәсвирдә тапылмыш олса, тәсвир нәзәријјәсинин көмәји илә, онун истәнилән башга тәсвирдә ифадәсини јазмаг елә бир чәтинлик төрәтмир (§21-ә бах). Она көрә дә бурада биз, һамилтонианын јалныз координат тәсвириндәки ифадәсини мүәјјән етмәклә кифајәтләнәчәјик. Координат тәсвириндә кинетик енержи оператору јалныз импулс операторларындан

$$\breve{K}(p) = \frac{1}{2m}\breve{p}^2 = \frac{1}{2m}(\breve{p}_x^2 + \breve{p}_y^2 + \breve{p}_z^2), \tag{17.1}$$

потенсиал енержи оператору исә јалныз координат операторларындан асылыдыр

$$\breve{U} = \breve{U}(\breve{x}, \breve{y}, \breve{z}, \breve{t}). \tag{17.2}$$

Онда Һамилтон оператору

$$\breve{H} = \breve{K}(\breve{p}_x, \breve{p}_y, \breve{p}_z) + \breve{U}(\breve{x}, \breve{y}, \breve{z}, \breve{t})$$

вә ја

$$\breve{H} = \frac{1}{2m}(\breve{p}_x^2 + \breve{p}_y^2 + \breve{p}_z^2) + \breve{U}(\breve{x}, \breve{y}, \breve{z}, \breve{t}) \tag{17.3}$$

кими јазылар.

Координат тәсвириндә $\breve{p}_i = -i\hbar\nabla_i$ вә $\breve{x}_i = x_i (i = 1,2,3)$ олдуғундан (§11-ә бах) потенсиал енержи оператору $\breve{U}$ садәчә *U(x,y,z,t)* функсијасы үзәринә вурма оператору...

$$\breve{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(x,y,z,t) = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(x,y,z,t). \tag{17.4}$$

Потенсиал енержи операторунун шәкли, классик физикада тәчрүбәдән көтүрүлмүш потенсиал енержијә ујғун гурулур вә системә тә'сир едән гүввәләр саһәсинин тәбиәтиндән асылы олур. Потенсиал енержи оператору $\hat{U}$ ашкар шәкилдә замандан асылы олмајан консерватив системләр үчүн Шрединкер тәнлији ашағыдакы кими јазылыр:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+\hat{U}\Psi \tag{17.5}$$

Квант механикасында импулс оператору илә координат операторунун коммутасија етмәдијиндән кинетик енержи илә потенсиал енержи ејни заманда гијмәт алмыр вә там енержи кинетик вә потенсиал енержиләрин чәми кими тә'јин олуна билмир. Системин там енержиси бүтөвлүкдә мә'наја маlик олур вә јалныз бүтөв дә өлчүлә билир.

Системин там енержисинин ала биләчәк гијмәтләр чохлуғунун (спектринин) характери потенсиал енержи операторунун шәклиндән, јә'ни системи тәшкил едән зәррәчикләрин нөвүндән вә она тә'сир едән гүввә саһәсинин тәбиәтиндән кәскин шәкилдә асылыдыр (IV вә V фәсилләрә бах).

Һамилтон операторy анлајышы гејри-консерватив системләр үчүн дә үмумиләшдирилә биләр. Белә системләр үчүн $\hat{U}$ оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олур вә бу һалда *U(x,t) гүввә функсијасы* адланыр. Гүввә функсијасы мә'лум олдугда $\vec{f}=-\vec{\nabla}U$ мүнасибәтиндән тә'јин олунан $\vec{f}$ гүввәси замандан асылы олур вә гүввә функсијасы системин потенсиал енержиси үзәринә дүшмүр. Бу һалда Шрединкер тәнлији:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+U(x,t)\Psi \tag{17.6}$$

кими јазылыр. Бурада $\hat{H}$ оператору системин там енержисини тәмсил етмир вә о, һәрәкәт интегралы олмур, јә'ни сахланмыр. $\vec{f}$ гүввәси замандан асылы олмадыгда U функсијасы замандан асылы олмур, о, системин потенсиал енержиси үзәринә дүшүр вә $\hat{H}$ оператору системин там енержисини тәмсил едир вә енержи сахланыр.

Консерватив системләрин һаллары **стасионар һаллар** адланыр (бундан сонракы §-а бах). Гејри-консерватив системләрин һаллары исә **гејри-стасионар һаллар** адланыр. Кәләчәкдә биз бу ики нөв һаллары бир-бириндән фәргләндирәчәјик.

Һамилтон операторy үчүн алынмыш (17.5) вә (17.6) ифадәләри зәррәчијин, онун сүр'әтиндән асылы гүввәләр саһәсиндәки һәрәкәти үчүн доғру дејилдир. Бу нөв јеканә гүввә јүклү зәррәчијин харичи електромагнит саһәсиндә һәрәкәти заманы мејдана чыхан Лоренс гүввәсидир. Белә һәрәкәтин Һамилтон операторуну јазмаг үчүн јенә дә ујғунлуг

принсипинә мүрачиәт едәк. Електромагнит саһәси нәзәријјәсиндән (електродинамикадан) мә'лумдур ки, харичи електромагнит саһәсиндә һәрәкәт едән зәррәчијин Һамилтон функсијасы

$$H=\frac{1}{2m}(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2+e\varphi$$

шәклинә маликдир; бурада $\vec{p}$ – зәррәчијин үмумиләшдирилмиш импулсу, $\vec{A}(x,y,z,t)$ вә $\varphi(x,y,z,t)$ – саһәнин вектор вә скалјар потенсиалларыдыр. Һамилтон функсијасынын бу ифадәсинә дахил олан кәмијјәтләри ујғун операторла әвәз едиб, координат тәсвириндә $\vec{A}(x,t)$ вә $\varphi(x,t)$ потенсиалларына ујғун операторларын өз үзәринә дүшдүјүнү нәзәрә алсаг, белә һәрәкәтин Һамилтон операторy

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})^2+e\varphi \tag{17.7}$$

олар. Електромагнит саһәсиндә тә'сир едән гүввәләрдән (Лоренс гүввәси) әлавә $U(x,y,z,t)$ гүввә функсијасы илә тә'јин олунан башга гүввәләрин дә олдуғуну фәрз етсәк, һамилтонианын үмуми шәкли

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})^2+e\varphi+U \tag{17.7'}$$

олур вә она ујғун Шрединкер тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})^2\Psi+e\varphi\Psi+U\Psi \tag{17.8}$$

кими јазылыр.

Һамилтон операторунун (17.4) вә (17.7) ифадәләри бир зәррәчикли системин харичи саһәләрдәки һәрәкәти үчүн јазылмышдыр. Зәррәчикләр системи үчүн һамилтонианын ифадәсини алмаг үчүн, јухарыда олдуғу кими, ујғунлуг принсипиндән истифадә едилир. Классик механикада N зәррәчикли системин һамилтон функсијасы

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_i}+U_i(\vec{r}_i))+\sum_{i\neq k=1}^{N}U(\vec{r}_i,\vec{r}_k),$$

бурада $\vec{p}_i$, m_i вә $\vec{r}_i$ -чи – зәррәчијин импулсу, күтләси вә радиус вектору, $U_i(\vec{r}_i)$ –һәмин зәррәчијин харичи саһәдәки гүввә функсијасы, $U(\vec{r}_i,\vec{r}_k)$ – зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сир енержисидир. Бурадан N– зәррәчикли системин һамилтонианы

$$\hat{H}=\sum_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2+U(r_i)\right)+\sum_{i\neq k=1}^{N}U(\vec{r}_i,\vec{r}_k) \qquad (17.9)$$

вә ујғун Шрединкер тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\dots,\vec{r}_N,t)}{\partial t}= \qquad (17.10)$$
$$=\left\{\sum_i\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2+U(r_i)\right)+\sum_{i\neq k}U(r_i,r_k)\right\}\Psi(\vec{r}_1,\dots,\vec{r}_N,t).$$

Јүклү N – зәррәчикли системин харичи електромагнит саһәсиндәки һәрәкәтини тәсвир едән һамилтонианы алмаг үчүн (17.9) ифадәси (17.7)-јә охшар олараг үмумиләшдириләмәлидир.

Квант механики системин мүхтәлиф саһәләрдә һәрәкәтини тәсвир едән далға тәнлијини алмаг үчүн јухарыда апарылан әмәлијјатлары һеч дә Шрединкер тәнлијинин ријази чыхарылышы кими баша дүшмәк лазым дејилдир. Шрединкер тәнлији тәчрүби фактларын үмумиләшдирилмәси нәтичәсидир. Классик механикада Нјутон тәнлији, електродинамикада Максвел тәнликләри чыхарылмадығы кими, квант механикасында да Шрединкер тәнлији чыхарылмыр. О, садәчә постула едилир вә онун доғрулуғу ондан чыхан нәтичәләрин тәчрүби нәтичәләрә ујғун кәлмәси илә тәсдиг олунур.

Квант механикасында Шрединкер тәнлији классик механикада Нјутон тәнлијинин ролуну ојнајыр. Ону һәлл етмәклә квант механики системин һәрәкәт гануну тапылыр, јә'ни һәр истәнилән анда фәзанын истәнилән нөгтәсиндә $\Psi(x,t)$ далға функсијасынын гијмәти тә'јин олунур. Бунун үчүн Шрединкер тәнлијиндән әлавә, там тәсвиретмә принсипинә (§9-а бах) ујғун олараг, $\Psi(x,t)$-нин һәр һансы башланғыч, мәсәлән, $t=0$ анындакы $\Psi(x,0)$ гијмәти вә сәрһәд шәртләри верилмәлидир. Сәрһәд шәртләринин верилмәси, үмуми шәкилдә, далға функсијасынын үзәринә ашағыдакы үч шәртин гојулмасына еквивалентдир. Далға функсијасы системин квант һалыны биргијмәтли тәсвир етмәли, онун физики мә'насына ујғун олараг, еһтимал сыхлығы вә еһтимал чәрәјаны сыхлығы сонлу вә кәсилмәз галмалы олдуғундан, далға функсијасы вә онун биринчи тәртиб төрәмәләри биргијмәтли, кәсилмәз вә сонлу олмалыдыр. Мәһз бу шәртләр Шрединкер тәнлијинин јеканә һәллини тапмаға имкан верир.

Зәррәчикләр сајынын, маддә мигдарынын вә јүкүн сахланма ганунлары Шрединкер тәнлијиндән бир нәтичә кими алыныр. Доғрудан да, комплекс гошма далға функсијасынын өдәдији

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*+U\Psi^* \qquad (17.11)$$

тәнлијини сағдан Ψ-јә, (17.5) тәнлијини исә солдан Ψ^* вуруб, икинчидән биринчини чыхсаг,

$$i\hbar\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi\right)+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*\right)=0$$

аларыг. Дикәр тәрәфдән

$$\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi=\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)$$

вә

$$\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*=\vec{\nabla}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi-\Psi\vec{\nabla}\Psi^*)$$

олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)+\frac{i\hbar}{2m}\vec{\nabla}(\Psi\vec{\nabla}\Psi^*-\Psi^*\vec{\nabla}\Psi)=0$$

аларыг. Бурада

$$\rho=\Psi^*\Psi \quad \text{вә} \quad \vec{j}=\frac{i\hbar}{2m}(\Psi\vec{\nabla}\Psi^*-\Psi^*\vec{\nabla}\Psi) \qquad (17.12)$$

гәбул етсәк, ρ – еһтимал сыхлығы, $\vec{j}$ – еһтимал чәрәјаны (сели) сыхлығы олур вә ахырынчы тәнлик кәсилмәзлик тәнлији шәклинә дүшүр:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\operatorname{div}\vec{j}=0. \qquad (17.13)$$

ρ-ну зәррәчикләр сыхлығы кими баша дүшсәк, $\vec{j}$ – 1 см^2 сәтһдән бир санијәдә кечән зәррәчикләр сели олар вә (17.13) тәнлији зәррәчикләр сајынын сахланма ганунуну ифадә едир.

Ејнилә, ρ вә $\vec{j}$ -ны зәррәчијин m күтләсинә вә e јүкүнә вурсаг,

$$\rho_m=m\rho=m\Psi^*\Psi,\quad \rho_e=e\rho=e\Psi^*\Psi$$
$$\vec{j}_m=m\vec{j}=\frac{i\hbar}{2}(\Psi\vec{\nabla}\Psi^*-\Psi^*\vec{\nabla}\Psi^*) \qquad (17.14)$$
$$\vec{j}_e=e\vec{j}=\frac{ie\hbar}{2m}(\Psi\vec{\nabla}\Psi^*-\Psi^*\vec{\nabla}\Psi)$$

ујғун олараг, маддә мигдарынын вә јүкүн сахланма ганунларына кәтирән кәсилмәзлик тәнликләрини аларыг:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m = 0,$$

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_e = 0. \qquad (17.15)$$

§ 18. СТАСИОНАР ҺАЛЛАР

Бундан габагкы параграфда көстәрдик ки, Һамилтон оператору ашкар шәкилдә замандан асылы дејилсә, системин $U(x,t)$ гүввә функсијасы өзүн $U(x)$ потенсиал енержиси үзәринә дүшүр. Бу шәрт адәтән харичи сабит (бирчинс) саһәләрдә һәрәкәт едән гапалы системләр үчүн өдәнилир. Белә системләр үчүн (9.8) Шрединкер тәнлијини дәјишәнләрә ајырмаг олур. Доғрудан да, (9.8) тәнлијинин һәллини $\Psi(x,t)=\Psi(x)f(t)$ шәклиндә ахтарсаг,

$$i\hbar \frac{1}{f(x)} \frac{df}{dt} = \frac{\breve{H}(x)\Psi(x)}{\Psi(x)}$$

аларыг. Бу бәрабәрликдә сол тәрәф јалныз замандан, сағ тәрәф исә јалныз координатлардан асылы олдуғундан бәрабәрлик о заман өдәнилир ки, һәр ики тәрәф ејни бир сабитә бәрабәр олсун. Сабити E илә ишарә етсәк,

$$i\hbar \frac{df}{dt} = Ef \qquad (18.1)$$

$$\breve{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \qquad (18.2)$$

тәнликләри алынар. (18.1) тәнлији асанлыгла интегралланыр:

$$f(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \qquad (18.3)$$

бурада C—интеграллама сабитидир.

Операторун мәхсуси гијмәти анлајышындан (18.2) тәнлијиндә E сабити $\breve{H}$ операторунун мәхсуси гијмәти, $\Psi(x)$ функсијасы исә онун мәхсуси функсијасы олур.

$\breve{H}$ замандан асылы олмадығындан вә өзү илә коммутасија етдијиндән, (10.4) әсасән, јухарыдакы нөв системләр үчүн онларын енержиси сахланыр. Башга сөзлә, системин бахылан һалында енержи мүәјјән гијмәтә маликдирсә, онун бу гијмәти замана көрә сабит галыр.

Квант механикасында енержиси мүәјјән гијмәтә малик олан һаллар *стасионар һал* адланыр. Енержинин спектриндә енержинин ән кичик гијмәтинә ујғун олан стасионар һала системин әсас һалы дејилир.

Стасионар һалларын далға функсијасы кәсилмәз спектр үчүн

$$\Psi_E(x,t) = \Psi_E(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \qquad (18.4)$$

дискрет спектр үчүн исә

$$\Psi_{E_n}(x,t) = \Psi_n(x,t) = \Psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \qquad (18.5)$$

шәклиндә јазылыр.

Стасионар һалларын далға функсијасынын замандан асылылығынын ашкар шәкли мә'лум олдуғундан, онлар үчүн $\Psi(x,t)$ функсијасынын тапылмасы $\Psi_E(x)$ вә ја $\Psi_n(x)$ функсијаларынын тапылмасына кәлир. Бу функсијалар исә (18.2) тәнлијинин һәллиндән тапылыр. Она көрә дә (18.2) тәнлији *стасионар һалларын Шрединкер тәнлији* адланыр.

Стасионар һаллара ән садә мисал олараг зәррәчијин сәрбәст һәрәкәтини (даһа мүрәккәб һаллара сонракы фәсилдә бахылачагдыр) көстәрмәк олар. Харичи саһәнин потенсиал функсијасы $U(x,t)=0$ олдугда зәррәчијин һәрәкәти сәрбәст һәрәкәт* адланыр. Сәрбәст һәрәкәт үчүн (18.2) тәнлији

$$\nabla^2\Psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0 \qquad (18.6)$$

шәклинә дүшүр. Бу тәнлик E-нин һәр бир вә мүсбәт гијмәтләриндә бүтүн фәзада сонлу галан һәллә маликдир. $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 > 0$ гәбул етсәк, (18.6) тәнлијинин үмуми һәлли

$$\Psi(x) = Ae^{i\vec{k}\vec{r}} + Be^{-i\vec{k}\vec{r}}. \qquad (18.7)$$

Сәрбәст һәрәкәтдә там енержинин кинетик енержи үзәринә дүшдүјүнү, јә'ни $E = \frac{p^2}{2m}$ олдуғуну нәзәрә алсаг, $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ вә $\vec{k}$ – далға вектору олур. Сәрбәст һәрәкәт сонсуз фәзада баш вердијиндән (18.7) һәлли бир һәддә бирләшдирмәк олар:

* Әслиндә зәррәчији башга чисимләрин (саһәләрин) тә'сириндән там тәчрид етмәк мүмкүн дејилдир. Она көрә дә бурада сәрбәст һәрәкәтә идеал һәрәкәт кими бахмаг лазымдыр.

$$\Psi(x) = Ae^{i\vec{k}\vec{r}} = Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} . \qquad (18.8)$$

Бу ифадәнин (11.18′) илә мугајисәси көстәрир ки, (18.8) функсијасы импулсун мәхсуси функсијасыдыр ($A = (2\pi\hbar)^{-3/2}$). Беләликлә, системин стасионар һалларынын далға функсијасы, сәрбәст һәрәкәт һалында

$$\Psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\vec{r})} \qquad (18.9)$$

олур. Мүстәви далға шәклиндә олан бу функсија системин E енержисинин вә $\vec{p}$ импулсунун ејни заманда мүәјјән гијмәтә малик олдуғу һалları тәсвир едир.

Импулс кәсилмәз дәјишдијиндән сәрбәст һәрәкәтин енержи спектри кәсилмәз олур вә сыфырдан мүсбәт сонсузлуға гәдәр гијмәт алыр. Импулсун верилмиш мүтләг гијмәтинә онун истигамәти илә фәргләнән сонсуз сајда мүхтәлиф (18.9) далға функсијасы ујғун кәлдијиндән, системин һәр бир стасионар һалы $\vec{p}$ =0, E=0 һалындан башга сонсуз тәртибдән чырлашмыш олур.

(18.4) вә (18.5) ифадәләриндән көрүнүр ки, стасионар һалларын далға функсијасынын замандан асылылығы һармоник ганунла верилир. Бу асылылыг стасионар һаллар үчүн ашағыдакы хассәләри көтирир.

1. Стасионар һалларда еһтимал сыхлығы вә еһтимал чәрәјаны сыхлығы замандан асылы олмур. Далға функсијасынын (18.4) вә ја (18.5) ифадәсини (17.12)-дә јеринә јаздыгда $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ вә $e^{\frac{i}{\hbar}Et}$ вуруғларынын һасили ваһидә бәрабәр олдуғундан

$$\rho_n(x,t) = \Psi_n^*(x,t)\Psi_n(x,t) = \Psi_n^*(x)\Psi_n(x) = \rho_n(x,0)$$

$$\vec{j}_n(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi_n(x)\vec{\nabla}\Psi_n^*(x) - \Psi_n^*(x)\vec{\nabla}\Psi_n(x)) = \vec{j}_n(x,0)$$

алыныр.

2. Оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олмајан физики кәмијјәтин стасионар һаллардакы орта гијмәти замана көрә сабит галыр. Орта гијмәтин (6.4) тә'рифиндән

$$(\bar{L}(t))_{nn} = \int \Psi_n^*(x,t)\hat{L}(x)\Psi_n(x,t)(dx) =$$

$$\int \Psi_n^*(x)\hat{L}(x)\Psi_n(x)(dx) = \bar{L}_{nn}(0) = \text{const} .$$

3. Ихтијари L физики кәмијјәтин стасионар һалларда мүәјјән L_k гијмәтини алма еһтималы $W(L_k)$ замандан асылы олмур. §8-дән билдијимиз кими бу еһтимал

$$C_{nk}(t) = \int \Psi_n(x,t)\Psi_{L_k}^*(x)(dx) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\int \Psi_n(x)\Psi_{L_k}^*(x)(dx)$$

әмсалы модулунун квадраты илә тә'јин олунур (бурада $\Psi_n(x,t) = \sum_k C_{nk}(t)\Psi_{L_k}(x)$ бәрабәрлијиндән истифадә олунур):

$$W(L_k,t) = C_{nk}^*(t)C_{nk}(t) = |C_{nk}(t)|^2 = \left|\int \Psi_n(x,t)\Psi_{L_k}^*(x)(dx)\right|^2 = W(L_k,0) .$$

4. (9.8) тәнлији хәтти диференсиал тәнлик олдуғундан онун $\Psi(x,t)$ үмуми һәлли, суперпозисија принсипинә әсасән (18,4) вә (18.5) хүсуси һәлләринин ихтијари комбинасијасы шәклиндә јазыла биләр. Енержи спектри дискрет оланда

$$\Psi(x,t) = \sum_k C_k\Psi_k(x,t) = \sum_k C_k e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\Psi_k(x) , \qquad (18.10)$$

кәсилмәз оланда исә

$$\Psi(x,t) = \int C(E)\Psi_E(x,t)dE = \int e^{-\frac{i}{\hbar}Et}C(E)\Psi_E(x)dE \qquad (18.11)$$

олур.

Системин (18.10) вә ја (18.11) функсијалары илә тә'јин олунан бахылан һалын енержиси мүәјјән гијмәтә малик олмур. Онлар үчүн јалныз енержинин орта гијмәтинин физики мә'насы олур вә о замандан асылы олмур:

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

$$= \int C^*(E')C(E)e^{-\frac{i}{\hbar}(E-E')t}\Psi_{E'}^*(x)\hat{H}(x)\Psi_E(x)(dx)dE'dE .$$

(18.2)-дән истифадә едиб, $\int \Psi_{E'}^*(x)\Psi_E(x)(dx) = \delta(E-E')$ олдуғуну нәзәрә алсаг (8.9-а бах),

$$\bar{E} = \int C^*(E')C(E)Ee^{-\frac{i}{\hbar}(E-E')t}dEdE'\delta(E-E') = \int C^*(E)C(E)EdE = \text{const}$$

олар. Лакин онлар үчүн еһтимал сыхлығы заманын функсијасы олур. (18.10)-дан

$$\rho(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \sum_{n,m} C_n^*C_m\Psi_n^*(x)\Psi_m(x)e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t} .$$

Беләликлә, (18.10) вә (18.11) һаллары үчүн стасионарлыг шәрти өдәнилмир.

Енержинин тә'јининдә (өлчүлмәсиндә) бурахылан хәта (јә'ни гејри-мүәјјәнлик) енержинин орта гијмәтиндән кифајәт гәдәр кичик оларса, системин белә һаллары алəтән *квазистасионар һаллар* адланыр. (18.9) – (18.11) һаллары белә һаллардыр.

5. Оператору Һамилтон оператору илә коммутасија едән физики кәмијјәтләр енержи илә ејни заманда мүәјјән гијмәт ала билдијиндән стасионар һаллар јалныз енержи илә јох, ејни заманда башга физики кәмијјәтләрлә дә характеризә олуна биләр. Белә кәмијјәтләр импулс, һәрәкәт мигдары моменти (квадраты), онун пројексијасы вә бунлар кими башга кәмијјәтләрдир. Стасионар һаллар ичәрисиндә елә һаллар ола биләр ки, онларын һамысы үчүн енержинин гијмәти ејни, лакин ејни заманда өлчүлә билән физики кәмијјәтләрин гијмәти исә мүхтәлиф олсун. Системин белә һаллары (енержи сәвијјәләри) *чырлашмыш һаллар* адланыр. Квант механикасында системин һәр бир һалы үчүн далға функсијасы илә верилдијиндән енержинин мүәјјән бир гијмәтинә (јә'ни чырлашмыш сәвијјәјә) јеканә бир далға функсијасы јох, чырлашманын тәртиби (чырлашмыш сәвијјәнин тәркибинә дахил олан һалларын сајы) гәдәр бир-бириндән хәтти асылы олмајан мүхтәлиф далға функсијасы ујғун кәләр. Ејни бир чырлашмыш һала ујғун далға функсијаларынын ихтијари хәтти комбинасијасы шәклиндә верилмиш далға функсијасы да енержинин һәмин гијмәтинә ујғун олар. Башга сөзлә, чырлашмыш сәвијјәнин мәхсуси функсијаларынын сечилмәси биргијмәтли дејилдир, белә ки, хәтти комбинасијаја дахил олан сабитләри истәнилән шәкилдә сечмәклә ејни бир сәвијјә үчүн истәнилән сајда мүхтәлиф далға функсијасы алмаг олар. Чырлашмыш сәвијјәнин ихтијари шәкилдә сечилмиш далға функсијалары үмумијјәтлә ортогонал олмур. Хәтти комбинасијалары үчүн шәкилдә сечмәклә, олдугча мүхтәлиф јолларла ортогоналлашдырылмыш [illegible] функсијалар системи алмаг олар.

7. Системин стасионар һалларынын енержиси дискрет олдугда, јә'ни стасионар һаллар (18.5) функсијасы илә верилдикдә онун һәрәкәти **финит** олур: бу [illegible] системин һәрәкәти мәһдуд (сонлу) фәзада баш верир, системин өзү вә ја онун һәр һансы бир һиссәси сонсузлугда ола билмир. Бу онунла әлагәдардыр ки, дискрет спектрин (18.5) мәхсуси функсијаларынын модулунун квадратындан бүтүн фәза үзрә көтүрүлмүш $\int|\Psi_n(x,t)|^2(dx)$ интегралы сонлу галыр (§9-ун (9.6) мүнасибәтинә бах). Дикәр тәрәфдән, бу интегралын сонлу галмасы үчүн $|\Psi_n(x,t)|^2$ -ы x артдыгча азалмалы вә сонсузлугда сыфра бәрабәр олмалыдыр. Бурадан x-ин сонсуз гијмәт алма еһтималы сыфыр олур, систем сонсузлуға кедә билмир, онун һәрәкәтинин баш вердији фәза һәмишә мәһдуд галыр. Әкс теорем дә доғрудур: квант механики системин һәрәкәти сонлу (мәһдуд) фәзада баш верирсә, онун стасионар һалларынын енержи спектри һәмишә дискрет олур (бах IV вә V фәсилләр).

Системин стасионар һаллары кәсилмәз спектрин (18.4) мәхсуси функсијалары илә тәсвир олундугда, $\int|\Psi_E(x,t)|^2(dx)$ интегралы дағылыр ((8.9)

вә (8.10) мүнасибәтләринә бах). $|\Psi_E(x,t)|^2$ -ы бахылан [illegible] ларын мүхтәлиф гијмәтләринин еһтимал сыхлығыны тә'јин етмир, јалныз онунла мүтәнасиб олур вә сонсузлугда сыфра бәрабәр олмур. Она көрә дә системин сонсузлугда олма еһтималы сыфырдан фәргли галыр вә системин һәрәкәти сонсуз (гејри-мәһдуд) фәзада баш верир. Системин белә һәрәкәтинә **инфинит** һәрәкәт дејилир, башга сөзлә, кәсилмәз спектрин стасионар һалларына инфинит һәрәкәт ујғун кәлир. Бурада әкс теорем дә доғрудур. Системин һәрәкәти гејри-мәһдуд фәзада баш верирсә, онун стасионар һалларынын енержи спектри кәсилмәз олур.

8. Стасионар һалларда истәнилән $\hat{F}$ операторунун $\hat{H}$ оператору илә коммутасијасынын орта гијмәти һәмишә сыфра бәрабәрдир. Доғрудан да, мәсәлән, дискрет спектрдә

$$\int\Psi_n^*(\hat{H}\hat{F}-\hat{F}\hat{H})\Psi_n(dx)=\sum_n(HF-FH)_{nn}=\sum_{nn'}(H_{nn'}F_{n'n}-F_{nn'}H_{n'n}),$$

бурада $H_{nn'}=\int\Psi_n^*\hat{H}\Psi_{n'}(dx)=E_{n'}\int\Psi_n^*\Psi_{n'}(dx)=E_{n'}\delta_{nn'}$ олдуғуну нәзәрә алсаг вә $\delta_{nn'}$ символу васитәсилә n' үзрә чәми көтүрсәк

$$\int\Psi_n^*(\hat{H}\hat{F}-\hat{F}\hat{H})\Psi_n(dx)=\sum_n E_n(F_{nn}-F_{nn})=0 \qquad (18.12)$$

олар.

9. Импулс вә координат операторларынын хассәләри илә таныш олдугда көстәрдик ки, $\hat{p}_i$ илә x_i операторлары бир-бири илә коммутасија етмир. Онлардан һәр бири ермит оператордур. Лакин онларын һасили олан $\sum\hat{p}_i\hat{x}_i$ вә ја $\sum x_i\hat{p}_i$ операторлары исә ермит дејилдир. Белә ки, һасилин ермит олмасы үчүн онда иштирак едән операторлар коммутасија етмәлидир.

§7-дә көстәрилдији кими белә һалда

$$\hat{F}=\frac{1}{2}\sum_i(p_ix_i+x_ip_i)=\frac{1}{2}(\hat{\vec{p}}\vec{r}+\vec{r}\hat{\vec{p}}) \qquad (18.13)$$

оператору һәмишә ермит оператордур.

Стасионар һалларда $\hat{F}$ илә $\hat{H}$ -ын коммутасијасы (18.12)-јә әсасән

$$\int\Psi^*(\hat{H}\hat{F}-\hat{F}\hat{H})\Psi(dx)=i\hbar\int\Psi^*\frac{\hat{P}^2}{m}\Psi(x)(dx)-\int\Psi^*\vec{r}\nabla V(r)\Psi(dx) \qquad (18.14)$$

олмалыдыр.

(18.14)-дә биринчи интеграл системин K кинетик енержисинин орта гијмәтинин ики мислидир. Саһәнин $V(r)$ потенсиал функсијасынын координатлардан асылылығы $V=cr^n$ шәклиндә олан һалларда $\vec{r}\vec{\nabla}V = nV$ олур вә икинчи интеграл системин потенсиал енержисинин орта гијмәтинин n-ә һасилидир. Беләликлә (18.14) мүнасибәтиндән

$$2\overline{K} = n\overline{V} \tag{18.15}$$

алыныр. (18.15) мүнасибәти **Вириал теореми** адланыр.

Мәсәлән, зәррәчик нөгтәви јүкүн Кулон (сферик симметрик) саһәсиндә һәрәкәт етдикдә (бах §40) $n=-1$, $\overline{K} = -\frac{1}{2}\overline{V}$; үч өлчүлү изотроп һармоник оссилјатор үчүн исә $n=2$, $\overline{K} = \overline{V}$ алыныр (бах §43).

§ 19. КВАНТ ТӘНЛИКЛӘРИНДӘН КЛАССИК ТӘНЛИКЛӘРӘ КЕЧИД

Квант нәзәријјәси классик физикада мејдана чыхан мүхтәлиф чәтинликләрин һәлли јолларынын ахтарылмасы нәтичәсиндә мејдана чыхмышды. Она көрә дә классик механика квант механикасындан хүсуси бир һал кими алынмалыдыр. Буну көстәрәк.

Квант механикасынын әсасыны ики тәнлик тәшкил едир. Онлардан бири Шрединкер тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \breve{H}\Psi(x,t), \tag{9.8}$$

икинчиси исә һәрәкәт тәнлијидир

$$\dot{\breve{L}} = \frac{d\breve{L}}{dt} = \frac{\partial\breve{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{L}\right]. \tag{10.4'}$$

Әввәлчә (10,4′) тәнлијинә еквивалент олан классик тәнликләри тапаг. Бунун үчүн бир дәфә $\breve{L} = \breve{x}_i$, дикәр дәфә исә $\breve{L} = \breve{p}_i\,(i=1,2,3)$ фәрз едәк. Координат вә импулс операторлары замандан ашкар шәкилдә асылы олмадығындан онлар үчүн (10.4′) тәнлији

$$\dot{\breve{x}}_i = \frac{d\breve{x}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{x}_i\right], \qquad \dot{\breve{p}}_i = \frac{d\breve{p}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{p}_i\right] \tag{19.1}$$

кими јазылар.

Үмумилији позмадан фәрз етмәк олар ки, квант механики системин һәрәкәти (17.3) Һамилтон оператору илә верилир. Бизим мәгсәдимиз үчүн ону

$$\breve{H} = \frac{1}{2m}\sum_k \breve{p}_k^2 + U(x,t)$$

шәклиндә јазаг. $\breve{x}_i$ координат операторунун $U(x,t)$ илә вә импулсун мүхтәлиф индексли операторларынын исә бир-бирилә коммутасија етдијини нәзәрә алсаг, (19.1) тәнликләри

$$\frac{d\breve{x}_i}{dt} = \dot{\breve{x}}_i = \frac{i}{2m\hbar}\sum_k(\breve{p}_k^2 x_i - x_i\breve{p}_k^2) \tag{19.2}$$

$$\frac{d\breve{p}_i}{dt} = \dot{\breve{p}}_i = \frac{i}{\hbar}(\breve{U}(x,t)p_i - \breve{p}_i\breve{U}(x,t))$$

шәклинә дүшәр.

Биринчи тәнлијин сағ тәрәфини

$$\breve{p}_k^2 x_i - x_i\breve{p}_k^2 = \breve{p}_k(\breve{p}_k x_i - x_i\breve{p}_k) + (\breve{p}_k x_i - x_i\breve{p}_k)\breve{p}_k$$

кими дәјишәндән сонра (11.32) јердәјишмә мүнасибәтләрини нәзәрә алыб k үзрә чәми δ_{ik} символу васитәсилә көтүрсәк,

$$\frac{d\breve{x}_i}{dt} = \frac{\breve{p}_i}{m}; \qquad \frac{d\breve{p}_i}{dt} = -\frac{\partial\breve{U}(x,t)}{\partial x_i} \qquad (i=1,2,3) \tag{19.3}$$

алынар.

Бурадан көрүнүр ки, сүр'әт оператору илә импулс оператору вә тә'чил оператору илә гүввә функсијасы оператору арасындакы (19.3) мүнасибәтләри онлара ујғун физики кәмијјәтләр арасындакы мүнасибәтләр кимидир (ујғунлуг принсипи). Икинчи иддианы даһа ајдын көрмәк үчүн биринчи тәнликдән бир дә замана көрә төрәмә алыб, икинчи тәнлији нәзәрә алаг,

$$m\frac{d^2\breve{x}_i}{dt^2} = m\ddot{\breve{x}} = -\frac{\partial\breve{U}(x,t)}{\partial x_i}. \tag{19.4}$$

Бу, Нјутон тәнлијинә ујғун оператор тәнликдир.

(19.3) вә (19.4) тәнликләрини сол тәрәфдән $\Psi^*(x,t)$-јә, сағ тәрәфдән исә $\Psi(x,t)$ вуруб, x-ин бүтүн дәјишмә областы үзрә интеграл алсаг,

$$\int\Psi^*\frac{d\breve{x}_i}{dt}\Psi(dx) = \frac{1}{m}\int\Psi^*\breve{p}_i\Psi(dx), \tag{14.5}$$

$$\int \Psi^* \frac{d\hat{p}_i}{dt}\Psi(dx) = -\int \Psi^* \frac{\partial U}{\partial x_i}\Psi(dx)$$

вә

$$m\int \Psi^* \frac{d^2\hat{x}_i}{dt^2}\Psi(dx) = -\int \Psi^*\frac{\partial U}{\partial x_i}\Psi(dx) \qquad (19.6)$$

олар. Физики кәмијјәтин орта гијмәти тә'рифиндән

$$\dot{\bar{x}} = \frac{\bar{p}_i}{m}; \qquad \dot{\bar{p}}_i = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} \qquad (19.7)$$

вә

$$m\ddot{\bar{x}}_i = -\frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} \qquad (19.8)$$

аларыг. (19.5), (19.6) вә ја (19.7), (19.8) мүнасибәтләри **Еренфест теоремләри** адланыр.

(19.3) вә (19.4) тәнликләри оператор шәклиндә, (19.7) вә (19.8) тәнликләри исә физики кәмијјәтләрин орта гијмәти үчүн бизә, ујғун олараг, классик механикадакы Һамилтон тәнликләрини вә Нјутон тәнлијини хатырладыр. Она көрә дә онлара квант Һамилтон тәнликләри вә квант Нјутон тәнлији дејилир.

Билдијимиз кими, классик механикада Нјутон тәнлији

$$m\ddot{x}_i = -\frac{\partial U(x,t)}{\partial x_i} \qquad (19.9)$$

шәклиндә јазылыр, бурада x_i –зәррәчијин классик координатларыдыр. Квант механикасында исә зәррәчијин классик координатлары ролуну $\bar{x}_i$ кәмијјәтләри ојнајыр. Демәли, квант механикасында Нјутон тәнлији

$$m\ddot{\bar{x}}_i = -\frac{\partial U(\bar{x},t)}{\partial \bar{x}_i} \qquad (19.10)$$

шәклинә малик олмалыдыр. Лакин (19.10) тәнлији әслиндә (19.8) тәнлијинин үзәринә дүшмүр. Онларын нә дәрәчәдә бир-биринә ујғун олдуғуну мүәјјән едәк.

(19.8) тәнлијинин сол тәрәфиндәки $\ddot{\bar{x}}_i$-ин ифадәсиндә интеграл координатлара, төрәмә исә замана көрә алыныр. x_i вә t гејри-асылы дәјишәнләр олдуғундан, интеграл илә төрәмәнин нөвбәсини дәјишмәк, јә'ни

$\ddot{\bar{x}} = \bar{\ddot{x}}$ көтүрмәк олар (бах §10). Онда (19.8) тәнлијинин (19.10)-нун үзәринә дүшмәси үчүн сағ тәрәфләр бәрабәр олмалыдыр. Лакин белә бәрабәрлик үмумијјәтлә өдәнилмир. Онун өдәнилмәсини тә'мин едән шәртләри тапаг.

$\Psi(x,t)$ – далға функсијасынын $\bar{x}_i$-ин јахын әтрафындакы кичик областда сыфырдан фәргли олдуғуну фәрз едәк. Онда системин чари координаты $x_i = \bar{x}_i + \eta_i$ кими тә'јин олунар. Системин белә һалларына *далға пакети* дејилир. $\bar{x}_i$ исә далға пакети мәркәзинин координатлары олур. Бурада $\eta_i = x_i - \bar{x}_i = \Delta x_i$ вә $(dx) = (d\eta)$ олдуғундан

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} = \int \Psi^*(\bar{x}_i+\eta_i,t)\frac{\partial U(\bar{x}_i+\eta_i,t)}{\partial \bar{x}_i}\Psi(\bar{x}_i+\eta_i,t)(d\eta)$$

олар. $U(x)$ – ин һәмин областда x-ә көрә кифајәт гәдәр јаваш дәјишдијини фәрз етсәк, $\frac{\partial U(\bar{x}+\eta)}{\partial \bar{x}_i}$ функсијасыны $\bar{x}_i$ нөгтәси әтрафында η-нин үстләринә көрә сыраја ајырмаг олар:

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} = \frac{\partial U(\bar{x},t)}{\partial \bar{x}_i}\int\Psi^*\Psi d\eta + \frac{\partial^2 U(\bar{x},t)}{\partial \bar{x}_i^2}\int\Psi^*\eta_i\Psi d\eta + \frac{1}{2}\frac{\partial^3 U(\bar{x},t)}{\partial \bar{x}_i^3}\int\Psi^*\eta_i^2\Psi d\eta .$$

Биринчи интеграл ваһидә, икинчиси сыфра $(\bar{\eta}_i = \Delta\bar{x}_i = 0)$, үчүнчүсү исә $\overline{\eta_i^2} = \overline{(\Delta x_i)^2}$ бәрабәр олдуғундан, (19.8) квант Нјутон тәнлији

$$m\ddot{\bar{x}}_i = -\frac{\partial U(\bar{x}_i)}{\partial \bar{x}_i} - \frac{1}{2}\frac{\partial^3 U(\bar{x}_i)}{\partial \bar{x}_i^3}\overline{(\Delta x_i)^2} \qquad (19.11)$$

шәклинә дүшәр. Бу тәнлијин (19.10)-нун үзәринә дүшмәси үчүн, јәгин ки,

$$\frac{\partial U(\bar{x})}{\partial \bar{x}_i} \gg \frac{1}{2}\left|\frac{\partial^3 U(\bar{x})}{\partial \bar{x}_i^3}\right|\overline{(\Delta x_i)^2} \qquad (19.12)$$

шәрти өдәнилмәлидир. Бу заман (19.11) тәнлији бүтүн күтләси далға пакети мәркәзиндә топланмыш классик зәррәчијин һәрәкәтини тәсвир едәр.

$U(x,t)$ потенсиал функсијасы x-ә көрә јаваш дәјишдикчә вә далға пакети дар, јә'ни $\overline{(\Delta x_i)^2}$ кичик олдугча, (19.12) шәрти јахшы өдәнилир. Анҹаг $\overline{(\Delta x_i)^2}$ кичик олдугда, гејри-мүәјјәнлик мүнасибәтиндән, импулсун гијмәтинин тә'јининдәки $\overline{(\Delta p_i)^2}$ гејри-мүәјјәнлик бөјүк олур вә импулс вә еләҹә дә кинетик енержинин классик мә'насы позулур. Она көрә дә (19.12) шәрти (19.10) вә (19.11) тәнликләринин саг тәрәфләринин бәрабәр олмасы үчүн лазыми шәрт олуб, кафи дејилдир.

Пакет дар ($\overline{(\Delta x_i)^2}$ кичик) олдугча зәррәҹијин орта потенсиал енержиси, квант механикасында далға пакети мәркәзиндә олан мадди нөгтәнин потенсиал енержисинә бәрабәрдир. Доғрудан да сыфырынҹы тәртиб һәддә нисбәтән $\eta_i = \Delta x_i$ вә $\eta_i^2 = (\Delta x_i)^2$ вә даһа јүксәк тәртибдән кичик һәдләри атсаг,

$$\bar{U} = \int \Psi^*(\bar{x}+\eta)U(\bar{x}+\eta)\Psi(\bar{x}+\eta)d\eta = U(\bar{x})$$

олар.

Лакин буну кинетик енержи үчүн демәк олмаз:

$$\frac{\overline{p_i^2}}{2m} = \frac{1}{2m}\overline{(p_i-\bar{p}_i+\bar{p}_i)^2} = \frac{1}{2m}\overline{(\bar{p}_i+\Delta p_i)^2} = \frac{\bar{p}_i^2}{2m}+\frac{\overline{(\Delta p_i)^2}}{2m} \neq \frac{\bar{p}_i^2}{2m}.$$

$\frac{\overline{p_i^2}}{2m}$ илә $\frac{\bar{p}_i^2}{2m}$ енержиләринин бир-биринә тәхмини дә олса бәрабәр олмасы үчүн (гејри-мүәјјәнлик мүнасибәтинә көрә)

$$\frac{\bar{p}_i^2}{2m} \gg \frac{\overline{(\Delta p_i)^2}}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m\overline{(\Delta x_i)^2}} \qquad (19.13)$$

олмалыдыр. Беләликлә, (19.8) тәнлијинин (19.10) классик Нјутон тәнлији үзәринә дүшмәси үчүн (19.12) вә (19,13) шәртләри ејни заманда өдәнилмәлидир. Бу исә јаваш дәјишән харичи саһәләрдә һәрәкәт едән бөјүк импулслу зәррәчикләр үчүн мүмкүн олур, јә'ни квант механики системин белә һәрәкәти классик һәрәкәтә јахын олур.

Инди дә Шредингер тәнлијинә еквивалент олан классик тәнликләрин тапылмасы илә мәшғул олаг. Бу һалда Шредингер тәнлијиндә $\Psi(x,t)$-ни квант механикасынын классик област үчүн јазылмыш

$$\Psi(x,t) = ae^{\frac{i}{\hbar}S}$$

далға функсијасы илә әвәз едәк. a әмсалынын үмуми шәкилдә x,t-нин функсијасы олдуғуну нәзәрә алыб (17.1) тәнлијинә дахил олан төрәмәләри һесабласаг,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(i\hbar\frac{\partial a}{\partial t} - a\frac{\partial S}{\partial t}\right)e^{\frac{i}{\hbar}S},$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla^2 a+\frac{2i}{\hbar}\vec{\nabla} a\vec{\nabla} S+\frac{i}{\hbar}a\nabla^2 S-\frac{a}{\hbar^2}(\vec{\nabla} S)^2\right]e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

Бу ифадәләри (17.1) тәнлијиндә јазанда

$$i\hbar\frac{\partial a}{\partial t}-a\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 a-\frac{i\hbar}{m}\vec{\nabla} a\vec{\nabla} S-\frac{i\hbar}{2m}a\nabla^2 S+\frac{1}{2m}a(\vec{\nabla} S)^2+U \qquad (19.14)$$

аларыг. Бунлары Шредингер тәнлијиндә јеринә јазыб, ики хәјалы әдәдин бәрабәрлији шәртиндән

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\vec{\nabla} S)^2+U(x,t)-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 a=0 \qquad (19.14')$$

$$\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{1}{m}\vec{\nabla} a\vec{\nabla} S+\frac{a}{2m}\nabla^2 S=0 \qquad (19.15)$$

тәнликләрини аларыг. (19.14′) тәнлијиндә $\hbar^2$ илә мүтәнасиб кичик һәдди нәзәрә алмасаг, классик механикада тә'сир үчүн јазылмыш Һамилтон–Јакоби тәнлијини аларыг:

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\vec{\nabla} S)^2+U(x,t)=0. \qquad (19.16)$$

Бурадан көрүнүр ки, квант механикасындан классик механикаја кечмәк үчүн $\hbar\to 0$ јахынлашдырмаг лазымдыр. Лакин асанлыгла көстәрмәк олар ки*, классик механика $\hbar$-ын сыфырынҹы тәртиби илә јох, биринҹи тәртиби илә мүтәнасиб һәдләр дәгиглији илә доғрудур.

(19.15) тәнлијинин физики маһијјәтини ајдынлашдырмаг үчүн онун һәр һәддини $2a$-ја вуруб, ону

$$\frac{\partial a^2}{\partial t}+\vec{\nabla}\left(a^2\frac{\vec{\nabla} S}{m}\right)=0 \qquad (19.17)$$

шәклиндә јазаг. Бурада $a^2=\Psi^*\Psi$ – зәррәҹијин фәзанын һәр һансы

* Бах [1], сәһ 117.

нөгтәсиндә олма еhтимал сыхлығы, $\frac{\nabla S}{m} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{\upsilon}$ – зәррәчијин классик сүр'әти, $a^2\vec{\upsilon} = \Psi^* \Psi \vec{\upsilon}$ исә еhтимал сыхлығы чәрәјаны (сели) олдуғундан, (19.17) тәнлији кәсилмәзлик тәнлији олур, јә'ни еhтимал сыхлығынын "јердәјишмәси" классик механика ганунлары илә баш верир вә фәзанын hәр бир нөгтәсиндә онун сүр'әти $\vec{\upsilon}$-јә бәрабәр олур.

III ФӘСИЛ

ТӘСВИР НӘЗӘРИЈЈӘСИ ЕЛЕМЕНТЛӘРИ

§20. ДАЛҒА ФУНКСИЈАСЫ МУХТӘЛИФ ТӘСВИРЛӘРДӘ

Биз јухарыда көрдүк ки, классик механикада системин бахылан hалыны тә'јин едән физики кәмијјәтләрин hамысы квант механикасында ејни заманда мүәјјән гијмәт алмыр. Квант механикасында системин hалыны тә'јин етмәк үчүн онларын ејни заманда өлчүлә билән јалныз бир гисми көтүрүлүр, јә'ни hал, классик тәсвирә нисбәтән даhа аз тәфсилатла тәсвир олунур. Системин hалы мәсәлән, координат вә онларын ихтијари функсијасы олан $f(x)$ (мәсәлән, $U(x)$ потенсиал енержи) кәмијјәтләрин өлчүлмәси илә тә'јин олунурса, hәмин hалда импулс вә онун ихтијари функсијасы олан (мәсәлән, $K(p)$ кинетик енержи) кәмијјәтләри өлчүлә билмир. Беләликлә, квант механикасында системин hалыны тә'јин (тәсвир) етмәк үчүн, классик механикада олдуғу кими, јалныз бир јолдан истифадә олунмур. Бурада ејни бир hал мухтәлиф јолларла тәсвир олуна билир. Һәр ејни заманда өлчүлә билән кәмијјәтләр чохлуғу бу тәсвир јолларындан бири олур. Бу сәбәбдән, квант механикасында системин hалыны тә'јин етмәк үчүн ики груп өлчү чиhазындан истифадә олунур. Бу чиhазларын бир групу, дикәр груп чиhазларын өлчә билмәдији әламәтләринә көрә системи характеризә едир вә әксинә (тамамлама принсипи). Һалын тә'јин едилмәси үчүн истифадә олунан мухтәлиф тәсвирләр там еквивалентдир. Онлардан hәр hансы биринин сечилмәси бахылан мәсәләнин hәлли үчүн hансынын даhа әлверишли олмасы илә мүәјјән олунур. Тәсвирләрин еквивалентлијиндән чыхыр ки, бир тәсвирдән hәмишә дикәринә кечмәк мүмкүндүр.

Бундан әввәлки параграфларда көстәрдик ки, системин үмуми вә мүәјјән hаллары ујғун олараг Ψ вә Ψ_L (вә ја $\Psi_{L_n} = \Psi_n$) функсијалары илә тәсвир олунур, бурада L вә ја n hалын индексидир, о hалы тә'јин едән физики кәмијјәтләр чохлуғуну вә ја квант әдәдләр чохлуғуну (V фәслә бах) көстәрир.

Системин hалынын координат тәсвири $\Psi(x,t)$, импулс тәсвири $C(p)$, енержи тәсвири $C(E)$ вә и.а. илә тәсвир олундуғу гејд едилмишдир. Далға

функсијаларынын аргументи (x, p, E вә и.а.) тәсвирин индекси адланыр. Бурадан координат тәсвири – "x-тәсвири", импулс тәсвири – "p-тәсвири", енержи тәсвири – "E-тәсвири" вә и.а. адланыр. Дедикләримиздән алыныр ки, (8.8) ифадәси илә верилмиш $C(E)$ вә $C(p)$ ($L=p,E$ гәбул едилдикдә) функсијалары системин ујғун тәсвирдә верилмиш үмуми далға функсијалары олур. Системин мүәјјән hалынын далға функсијасыны мухтәлиф тәсвирләрдә јазмаг үчүн исә далға функсијасы бахылан hалын индекси илә тә'мин едилир. Мәсәлән, $\Psi_L(x), \Psi_{L_n}(x) = \Psi_n(x)$, $C_L(p)$, $C_{L_n} = = C_n(p)$, $C_L(E)$ вә и.а. функсијалары системин мүәјјән L вә ја $n(L_n)$ hалынын мухтәлиф тәсвирдәки функсијалары олур.

Вектор hесабындан мә'лумдур ки, hәр hансы $\vec{a}$ векторунун үч өлчүлү фәзада сечилмиш ихтијари истигамәт үзрә пројексијасыны тапмаг үчүн $\vec{a}$-ны hәмин истигамәтдәки $\vec{e}$ ваhид вектора скалјар вурмаг лазымдыр: $(\vec{a}\vec{e}) = a_e$, бурада $a_e - \vec{a}$-нын $\vec{e}$ истигамәтиндәки пројексијасы адланыр. Үч өлчүлү фәза, билдијимиз кими, мәсәлән, декарт координат системиндә охлар үзрә көтүрүлмүш гаршылыглы ортогонал олан үч ваhид векторла характеризә олунур: $\vec{e}_1 = \vec{i}$, $\vec{e}_2 = \vec{j}$, $\vec{e}_3 = \vec{k}$. Чох өлчүлү абстракт фәзаларда да онларын сајы фәзанын өлчүсүнә бәрабәрдир. Мәсәлән, n-өлчүлү фәза $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \ldots, \vec{e}_n$ векторлары илә тә'јин олунур вә онлар бахылан фәзанын **базис векторлары** адланыр. Адәтән базис векторлар чохлуғу ортогонал векторлар системи тәшкил едир.

$(\vec{a}\vec{e})$ скалјар hасилә $\vec{e}$ векторунун $\vec{a}^{\,o}$ ($\vec{a} = a\vec{a}^{\,o}$) истигамәтиндәки пројексијасы кими дә бахмаг олар. $\vec{a}^{\,o}$ ваhид векторларын сајы да $\vec{a}$ вектор фәзанын өлчүсү илә тә'јин олунур. $\{\vec{e}_i\}$ вә $\{\vec{a}_i^{\,o}\}$ векторлары чохлуғу биринчи hалда $\vec{e}$ вектор фәзаны, икинчи hалда исә $\vec{a}$ вектор фәзаны әмәлә кәтирир.

Ејнилә бунун кими, системин мүәјјән hалыны тә'јин едән $\Psi_L(x)$ функсијасына $\Psi(x,t)$ комплекс векторун $C(L)$ комплекс векторлар фәзасында көтүрүлмүш ваhид вектора скалјар hасил вә ја $\Psi(x,t)$-нин hәмин вектор истигамәтиндәки пројексијасы кими бахмаг олар. x вә L кәсилмәдән (L_n–дискрет) дәјишдијиндән $\{\Psi_L(x)\}$ вә $\{C(L)\}$ векторлар чохлуғу сајыла билмәјән ($\{C(L_n)\}$ сајыла билән) чохлуг олур.

$\Psi(x)$ вә ја $C(L)$ далға функсијалары **hал векторлары** адланыр. Суперпозисија принсипинә көрә, бу векторлары чәмләмәк вә ја hәр hансы комплекс скалјар кәмијјәтә вурмагла јени векторлар алыныр. $\{\Psi_L(x)\}$ вә ја $\{C(L)\}$ векторлары чохлуғу x-ә вә ја L-ә көрә сонсуз өлчүлү абстракт комплекс вектор фәзасы тәшкил едир. Белә (Ψ^*, Ψ) скалјар һасили тә'јин олунмуш сонсуз өлчүлү вектори фәзаја функсионал *Һилберт фәзасы* дејилир.

Һәр бир $\Psi(x,t)$ һал векторуна* комплекс гошма $\Psi^*(x,t)$ һал вектору гаршы гојулур. $\{\Psi^*(x,t)\}$ һал векторлары чохлуғу векторлар фәзасында *гошма Һилберт фәзасы* тәшкил едир. Системин һалы ја $\Psi(x,t)$ вә ја да $\Psi^*(x,t)$ һал вектору илә тәсвир олунур. Бу сәбәбдән онлар тәбиәтчә мүхтәлиф векторлардыр вә буна көрә дә бир-бирилә чәмләнә билмир. $\check{L}=\check{L}^+$ ермит оператору $\Psi(x,t)$ векторуна солдан, $\Psi^*(x,t)$ векторуна исә сағдан тә'сир едир:

$$\check{L}\Psi(x,t)=\varphi(x,t) \tag{20.1}$$

$$(\check{L}\Psi)^+=(\Psi^+\check{L}^+)=\varphi^+(x,t)$$

Суперпозисија принсипинә көрә $\Psi(x,t)$ вә $C\Psi(x,t)$ һал векторлары ејни бир һалы тә'јин етдијиндән (§5-ә бах), квант механики системин һалы $\Psi(x,t)$-векторунун гијмәти илә јох, онун Һилберт фәзасындакы истигамәти илә характеризә олунур. Буна көрә дә һал вектору ваһидә нормаланыр, јә'ни Ψ^* вектору илә Ψ векторунун (Ψ^*, Ψ) скалјар һасили ваһидә бәрабәр олур:

$$(\Psi^*,\Psi)=\int\Psi^*\Psi(dx)=1 \tag{20.1'}$$

Ади үч өлчүлү фәзада һәр бир вектор, ихтијари шәкилдә сечилмиш $\vec{e}_1$, $\vec{e}_2$, $\vec{e}_3$ ортогонал ваһид базис векторлар системиндә өз координатлары илә тә'јин олундуғу кими, Һилберт фәзасында да һал вектору "өз координатларынын" гијмәти – базис далға функсијалары илә тә'јин олунур. Һилберт фәзасында базис векторлар системи вә ја там базис функсијалары системи сечилир. Истәнилән ермит операторунун мәхсуси функсијалар системи сечилир. Истәнилән ермит операторунун мәхсуси функсијалар чохлуғу ортонормаланмыш там функсијалар системи тәшкил етдијиндән, истәнилән белә чохлуг базис функсијалар системи кими истифадә олуна биләр.

Фәрз едәк ки, $\check{F}\Psi_F=F\Psi_F$ тәнлијинин һәлли олан $\Psi_F(x)$ мәхсуси функсијалар чохлуғу бизә мә'лумдур вә бу $\{\Psi_F(x)\}$ чохлуғу там систем тәшкил едир. Јухарыда дедикләримизә әсасән бу чохлуг базис функсијалар системи кими сечилә биләр. Дикәр тәрәфдән, суперпозисија принсипинә көрә системин истәнилән $\Psi(x,t)$ вә ја мүәјјән һалынын $\Psi_L(x,t)$ функсијасыны верилмиш операторун мәхсуси функсијалары үзрә көтүрүлмүш сыра шәклиндә көстәрмәк олар: дискрет спектр һалында

* Бир тәсвирдә верилмиш һал вектору (далға функсијасы) һаггында сөјләнән бүтүн фикирләр истәнилән башга тәсвирдә верилмиш һал вектору үчүн дә өз гүввәсини сахлајыр.

$$\Psi(x)=\sum_{F_n}C(F_n)\Psi_{F_n}(x), \tag{20.2}$$

$$\Psi_L(x)=\sum_{F_n}C_L(F_n)\Psi_{F_n}(x); \tag{20.3}$$

кәсилмәз спектр һалында исә

$$\Psi(x)=\int C(F)\Psi_F(x)dF, \tag{20.4}$$

$$\Psi_L(x)=\int C_L(F)\Psi_F(x)dF \tag{20.5}$$

олар. Бурада $C(F)$ вә ја $C_L(F)$ (еләчә дә $C(F_n)$ вә $C_L(F_n)$) әмсаллар чохлуғу системин үмуми вә мүәјјән һалынын F тәсвириндәки далға функсијалары олур вә онлар (8.4) вә (8.8) әсасән ујғун олараг

$$C_n=C(F_n)=\int\Psi^*_{F_n}(x,t)\Psi(x,t)(dx);\ C(F)=\int\Psi^*_F(x,t)\Psi(x,t)(dx), \tag{20.6}$$

$$C_L(F_n)=\int\Psi_L(x)\Psi^*_{F_n}(x,t)(dx);\ \ C_L(F)=\int\Psi_L(x)\Psi^*_F(x)(dx) \tag{20.7}$$

кими тә'јин олунур.

Беләликлә, (20.2)–(20.5) бәрабәрликләри F-тәсвириндән x-тәсвиринә, (20.6)–(20.7) бәрабәрликләри исә әксинә x-тәсвириндән F-тәсвиринә кечиди характеризә едир. $\check{F}$ оператору ихтијари ермит оператору олдуғундан бу бәрабәрликләр координат тәсвириндән истәнилән оператор тәсвиринә вә әксинә кечидләри ифадә едир. Мәсәлән, $\check{F}$ оператору системин $\check{H}$ Һамилтон оператору үзәринә дүшәрсә, онлар енержи вә ја E-тәсвириндән, $\check{p}$ импулс оператору үзәринә дүшәрсә – импулс вә ја p-тәсвириндән координат тәсвиринә вә әксинә кечидләри көстәрир.

$\check{H}$ вә $\check{p}$ операторларынын координат тәсвириндә верилмиш вә $\check{H}\Psi_E(x)=E\Psi_E(x)$, $\check{p}\Psi_p(x)=p\Psi_p(x)$ тәнликләринин һәлли олан $\Psi_E(x)$ вә $\Psi_p(x)$ мәхсуси функсијаларыны базис функсијалары кими сечиб, мәхсуси функсијалар спектринин дискрет олдуғуну ($\Psi_p(x)$-нин спектри һәмишә кәсилмәздир) гәбул етсәк, (20.2)–(20.7) ифадәләринә әсасән E вә p-тәсвирләриндән x-тәсвиринә кечид үчүн

$$\Psi(x,t)=\sum_n C(E_n)\Psi_{E_n}(x,t)=\sum C_n\Psi_n(x,t), \tag{20.8}$$

$$\Psi_L(x)=\sum_{E_n}C_L(E_n)\Psi_{E_n}(x)$$

вә

$$\Psi(x) = \int C(p)\Psi_p(x)(dp),$$
$$\Psi_L(x) = \int C_L(p)\Psi_p(x)(dp); \qquad (20.9)$$

x-тәсвириндән E- вә p-тәсвирләринә кечид үчүн исә

$$C(E_n) = \int \Psi^*_{E_n}(x)\Psi(x,t)(dx)$$
$$C_l(E_n) = \int \Psi^*_{l_n}(x)\Psi_l(x,t)(dx) \qquad (20.10)$$

вә

$$C(p) = \int \Psi^*_p(x,t)\Psi(x,t)(dx)$$
$$C_L(p) = \int \Psi^*_p(x,t)\Psi_L(x,t)(dx) \qquad (20.11)$$

аларыг. Бурада $C(E_n)$, $C_L(E_n)$ вә $C(p)$, $C_L(p)$ әмсаллары, уйғун олараг енержи вә импулс тәсвирләриндәки далға функсијаларыдыр.

Бахылан тәсвирдә верилмиш далға функсијалары нормаланмыш оларса, кечилмиш тәсвирдәки далға функсијалары да нормаланмыш олур. Мәсәлән, фәрз едәк ки, координат тәсвириндә далға функсијалары нормаланмышдыр:

$$\int \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)(dx) = 1.$$

Мисал үчүн (20.9) ифадәсиндән

$$\int C^*(p')C(p)(dp')(dp)\int \Psi^*_{p'}(x,t)\Psi_p(x,t)(dx) = 1$$

аларыг. Импулс операторунун Ψ_p мәхсуси функсијалары үчүн алынмыш (11.19) нормаланма шәртиндән вә δ-функсијанын (8.11) хассәсиндән истифадә етсәк,

$$\int C^*(p')C(p)\delta(p'-p)(dp')(dp) = \int C^*(p)C(p)(dp) = 1$$

олар, јә'ни p-тәсвиринин $C(p)$ далға функсијалары да нормаланма шәртини өдәјир.

Ејни сөзләри мүәјјән һалын далға функсијалары үчүн дә демәк олар, јә'ни $\Psi_L(x,t)$ функсијалары үчүн

$$\int \Psi^*_L(x)\Psi_L(x)(dx) = 1$$

шәрти өдәнилирсә, $C_L(p)$ -ләр үчүн дә һәмин шәрт өдәнилир:

$$\int C^*_L(p)C_L(p)(dp) = 1.$$

E вә p-тәсвирләринин далға функсијаларынын физики мә'насы вә башга хассәләри §8-дә верилмишдир.

§ 21. ОПЕРАТОРЛАР МҮХТӘЛИФ ТӘСВИРЛӘРДӘ

§20-дә далға функсијаларынын мүхтәлиф тәсвирләрдәки ифадәләрини тапдыг вә бир тәсвирдә верилмиш далға функсијасындан ихтијари башга тәсвирдәки далға функсијасына кечмәји тә'мин едән мүнасибәтләри мүәјјән етдик. Инди дә бу иши операторлар үчүн көрәк. Әввәлҹә операторлары мүхтәлиф тәсвирләрдә ифадә етмәји өјрәнәк, сонра исә онун бир тәсвирдә верилмиш ифадәси илә дикәр тәсвирдәки ифадәси арасындакы әлагәни тапаг.

Ихтијари $\breve{L}(x)$ операторунун координат тәсвириндә верилдијини фәрз едәк. Бу һалда $\breve{L}$ оператору, јәгин ки, координатларын вә онлара көрә төрәмәләрин функсијасы олар: $\breve{L}(x, -i\frac{\partial}{\partial x}, \dots)$. Белә оператор координат тәсвириндә верилмиш далға функсијасына тә'сир етдикдә, ону һәмин тәсвирдәки дикәр функсијаја чевирир:

$$\varphi(x,t) = \breve{L}(x)\Psi(x,t). \qquad (21.1)$$

Һәр һансы ихтијари $\breve{F}(x)$ операторунун $\{\Psi_F(x,t)\}$ вә ја $\{\Psi_{F_n}\} = \{\Psi_n\}$ мәхсуси функсијаларын там системи мә'лумдурса, системин истәнилән функсијасы һәмин операторун мәхсуси функсијаларынын ихтијари хәтти комбинасијасы (суперпозисијасы) шәкилдә көстәрилә биләр: $\breve{F}(x)$ операторунун дискрет спектрә малик олдуғу һала бахаг:

$$\Psi(x,t) = \sum_n C_n\Psi_n(x,t),$$
$$\varphi(x,t) = \sum_m b_m\Psi_m(x,t). \qquad (21.2)$$

Бурада (20.6)-ја көрә $\{C_n\}$ вә $\{b_m\}$ чохлуглары F тәсвириндәки далға функсијаларыдыр.

(21.2) ифадәләрини (21.1)-дә јазыб, $\breve{L}$-ин јалныз x-дәјишәнинә тә'сир етдијини нәзәрә алсаг,

$$\sum_m b_m\Psi_m(x,t) = \sum_n C_n\breve{L}(x)\Psi_n(x,t).$$

Бу тәнлији сол тәрәфдән $\Psi_k^*(x,t)$-функсијасына вуруб, x-ин бүтүн дәјишмә областы үзрә интегралласаг,

$$b_k = \sum_n L_{kn} C_n \qquad (21.3)$$

алынар, бурада $\int \Psi_k^*(x,t)\Psi_n(x,t)(dx) = \delta_{kn}$ олдуғу нәзәрә алынмыш вә

$$L_{kn} = \langle k|L|n\rangle = \int \Psi_k^* L \Psi_n(dx) \qquad (21.4)$$

ишарәси гәбул олунмушдур. $\{C_n\}$ вә $\{b_m\}$ чохлуглары F-тәсвириндә верилмиш Ψ вә φ функсијаларына ујғун функсијалар системи олдуғундан (21.1) вә (21.3) тәнликләри мүхтәлиф тәсвирләрдә верилмиш ејни бир тәнликдир. (21.1) тәнлијиндә $\breve{L}(x)$ операторунун ојнадығы ролу (21.3) тәнлијиндә $\{L_{kn}\}$ чохлуғу ојнајыр. Демәли, $\{L_{kn}\}$ чохлуғу F-тәсвириндә верилмиш $\breve{L}(x)$ оператору олур. Дискрет спектр һалында $\{L_{kn}\}$ чохлуғу адәтән сонсуз (вә ја сонлу) сәтир вә сүтунлара малик чәдвәл шәклиндә көстәрилир вә о **матриса** адланыр. Белә чәдвәл (матриса) $\underline{L}$ вә ја $|L_{kn}|$ кими ишарә олунур*:

$$\underline{L} = |L_{kn}| = \begin{vmatrix} L_{11}\ L_{12} \ldots\ L_{1k} \ldots \\ L_{21}\ L_{22} \ldots\ L_{2k} \ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ L_{n1}\ L_{n2} \ldots\ L_{nk} \ldots \end{vmatrix} \qquad (21.5)$$

Бу чәдвәлин һәр бир L_{ik} елементи (үмумијјәтлә комплекс) **матриса елементи** адланыр. Матриса елементи, көрүндүјү кими, ики индексә маликдир, биринчи индекс чәдвәлдә сәтрин, икинчи индекс исә сүтунун нөмрәсини көстәрир. Чәдвәлин сәтир вә сүтунларынын сајы бәрабәр оларса, белә матриса **квадрат матриса** адланыр. Үмумијјәтлә матрисанын сәтир вә сүтунларынын сајы бәрабәр олмаја да биләр.

Индексләри ејни олан L_{ii} матриса елементләринә **диагонал елементләр** дејилир. Белә елементләрдә сәтир нөмрәси сүтун нөмрәсинә бәрабәр олур. Јалныз диагонал елементләри сыфырдан фәргли олан

$$|L_{kn}| = \begin{vmatrix} L_{11}\ \ 0\ \ldots\ 0 \ldots \\ 0\ \ L_{22} \ldots\ 0 \ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ L_{kk} \end{vmatrix} \qquad (21.6)$$

* Бә'зән бахылан матрисаја ујғун детерминанты һесабламаг лазым олур. (21.4) матрисасына ујғун детерминант $\|L_{kn}\|$ кими ишарә олуначагдыр.

матриса **диагонал матриса** адланыр. Диагонал матрисаја ән јахшы мисал **ваһид матриса** ола биләр. Ваһид матрисанын елементләри

$$\delta_{ik} = \int \Psi_i^* \Psi_k(dx) = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases} \qquad (21.7)$$

кими тә'јин олунур вә ваһид матриса

$$I = |\delta_{ik}| = \begin{vmatrix} 1\ 0\ 0 \ldots \\ 0\ 1\ 0 \ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots 1 \end{vmatrix} \qquad (21.8)$$

шәклиндә јазылыр.

Бүтүн елементләри сыфра бәрабәр олан матриса **сыфыр матриса** адланыр вә

$$\underline{0} = |0| = \begin{vmatrix} 0\ 0 \ldots\ 0 \\ 0\ 0 \ldots\ldots 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots \\ 0\ 0 \ldots\ 0 \end{vmatrix} \qquad (21.8')$$

кими јазылыр.

Истәнилән ермит операторун там систем тәшкил едән $\{\Psi_i\}$ мәхсуси функсијалар чохлуғу үчүн (21.7) шәрти һәмишә өдәнилдијиндән (21.8) ваһид матриса истәнилән тәсвирдә ваһид галыр. Бурадан чыхыр ки, ваһид матриса бүтүн матрисалар илә коммутасија едир.

Координат тәсвириндә олдуғу кими, истәнилән башга тәсвирдә дә верилмиш матриса (оператор) илә јанашы төрәмә матрисалары (операторлары) билмәк лазым олур. Төрәмә матрисалардан әввәлчә **транспозисија олунмуш** матрисаны көстәрәк. Бу матриса верилмиш $|L_{mn}|$ матрисадан сәтир вә сүтунларын гаршылыглы јердәјишмәси илә алыныр. Транспозисија олунмуш $\underline{\tilde{L}}$ — матрисанын елементи $\underline{L}$ матрисанын ујғун елементиндән индексләрин јердәјишмәси илә алыныр.

$$(\tilde{L})_{mn} = L_{nm}. \qquad (21.9)$$

Верилмиш $\underline{L}$ матрисасы илә она комплекс гошма $\underline{L}^*$ матрисанын матриса елементләри бир-биринә комплекс гошма олур вә матриса *комплекс гошма матриса* адланыр:

$$(L_{mn})^* = (\int \Psi_m^* \breve{L} \Psi_n(dx))^* = \int \Psi_m \breve{L}^* \Psi_n^*(dx) = L_{mn}^*. \qquad (21.10)$$

Транспозисија олунмуш (21.9) матрисасындан комплекс гошма көтүрсәк, алынан матриса *гошма матриса* адланыр

$$(\widetilde{L})^*_{mn} = L_{nm}. \qquad (21.11)$$

Гошма матриса бахылан $\underline{L}$ матрисасына бәрабәр олдугда, јә'ни

$$(\widetilde{L}_{mn})^* = \widetilde{L}^*_{nm} = L^+_{nm} = L_{nm} \qquad (21.12)$$

олдугда матриса *ермит матриса* олур.

Инди дә бахылан матрисаны өз тәсвириндә јазмагы өјрәнәк. Јухарыда көрдүк ки, координат тәсвириндә верилмиш $\breve{L}(x)$ операторуну $\breve{F}$ оператору тәсвириндә јазмаг үчүн (21.4) ифадәсинә дахил олан $\Psi_n(x)$ функсијалары $\breve{F}$ операторунун мәхсуси функсијалары олмалыдыр. Бурадан алыныр ки, һәр истәнилән матриса өз тәсвириндә јазыла биләр. Бунун үчүн (21.4) ифадәсинә дахил олан $\Psi_n(x)$ функсијалары $\breve{L}(x)$ операторунун мәхсуси функсијалары олмалыдыр. Бу һалда (21.4) ифадәси

$$L_{kn} = \int \Psi^*_k \breve{L}\, \Psi_n (dx) = L_n \int \Psi^*_k \Psi_n (dx) = L_n \delta_{kn} \qquad (21.13)$$

шәклини алыр. Онда (21.8)-а әсасән $\underline{L}$ матрисасы

$$\underline{L} = \left| L_{kn} \right| = L_n \delta_{kn} = \begin{vmatrix} L_1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & L_2 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & \ldots & \ldots & L_k \end{vmatrix} \qquad (21.13')$$

олар. Демәли, һәр бир матриса өз тәсвириндә диагонал матриса илә ифадә олунур вә онун диагонал елементләри бахылан операторун мәхсуси гијмәтләри үзәринә дүшүр.

$\breve{L}$ операторуну, мәсәлән, енержи тәсвириндә јазмаг үчүн Һамилтон операторунун мәхсуси функсијалары верилмәлидир. $\breve{H}$ -ын дискрет спектрә малик олдуғуну фәрз етсәк, (21.5) матрисасы енержи тәсвириндә верилмиш $\breve{L}(x)$ оператору олар вә и.а.

$\breve{F}$ операторунун кәсилмәз спектрә малик олдуғу һала бахаг. Бу һалда $\{\Psi_F(x)\}$ чохлуғу F индексинә көрә сајыла билмәјән чохлуг тәшкил етдијиндән (21.1) тәнлијинә дахил олан $\Psi(x,t)$ вә $\varphi(x,t)$ функсијалары үчүн (21.2) суперпозисија мүнасибәтләри

$$\Psi(x,t) = \int C(F) \Psi_F(x) dF,$$

$$\varphi(x,t) = \int b(F) \Psi_F(x) dF \qquad (21.14)$$

шәклиндә јазылар. Бурада $C(F)$ вә $b(F)$–F -тәсвириндә верилмиш функсијалар олур.

(21.14) ифадәләрини (21.1)-дә јазыб, алынан бәрабәрлији солдан $\Psi^*_{F'}(x)$ функсијасына вурандан сонра x-ин бүтүн дәјишмә областы үзрә интегралласаг вә $\Psi_F(x)$ функсијасы үчүн (8.9) ортонормаланма шәртини нәзәрә алсаг,

$$b(F') = \int L_{F'F} C(F) dF \qquad (21.15)$$

алыныр. Бурада

$$L_{F'F} = \int \Psi^*_{F'}(x) \breve{L}(x) \Psi_F(x)(dx) \qquad (21.16)$$

ишарә олунмушдур. $\{L_{F'F}\}$ чохлуғу F-тәсвириндә верилмиш $\breve{L}(x)$ оператору олур. О, F' вә F индексләринин кәсилмәдән дәјишән функсијасыдыр. Ону (21.5) чәдвәли шәклиндә көстәрмәк мүмкүн дејилдир. Буна бахмајараг бу һалда да $|L_{F'F}|$ матриса, $L_{F'F}$ исә матриса елементи адланыр.

Дискрет спектрә ујғун матрисаларын јухарыда садаладығымыз бүтүн хассәләри кәсилмәз спектрә ујғун матрисалар үчүн дә гүввәдә галыр.

Мәсәлән, $\breve{L}(x)$ операторуну өз тәсвириндә јазаг. Бу һалда, $\Psi_F(x)$ функсијалары, јухарыда гејд етдијимиз кими $\breve{L}(x)$ операторунун мәхсуси функсијалары олмалыдыр, јә'ни $\breve{L}(x)\Psi_F(x) = L(F)\Psi_F(x)$. Онда (21.16)

$$L_{F'F} = L(F) \int \Psi^*_{F'}(x) \Psi_F(x)(dx) = L(F)\delta(F'-F) \qquad (21.17)$$

шәклинә дүшәр. Бу ифадә дискрет спектрдә (21.13) бәрабәрлијини хатырладыр, лакин δ_{nk} символу әвәзиндә бурада $\delta(F'-F)$ функсија дурур. δ-функсија јалныз $F' = F$-дә сыфырдан фәргли галдығындан (§11-ә бах), $\delta(F'-F)$ кәсилмәз спектрдә ваһид матриса, $|L_{F'F}|$ исә диагонал матриса олур.

$\breve{L}(x)$ операторуну, мәсәлән, импулс тәсвириндә јазмаг үчүн $\breve{F}$ операторунун $\breve{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ импулс оператору үзәринә дүшдүјүнү гәбул етмәк кифајәтдир. Импулс оператору кәсилмәз спектрә маликдир. $\{\Psi_p(x)\}$ мәхсуси функсијалар вә $\{\vec{p}\}$ мәхсуси гијмәтләр спектрләри кәсилмәздир (§11-ә бах). Импулс тәсвири үчүн (21.14) бәрабәрликләри

$$\Psi(x,t) = \int C(p)\Psi_p(x)(dp)$$

$$\varphi(x,t) = \int b(p)\Psi_p(x)(dp) \qquad (21.18)$$

шәклиндә олур, бурада $\Psi_p(x)$ функсијасы (11.8′) илә верилир. $C(p)$ вә $b(p)$- импулс тәсвириндә верилмиш $\Psi(x)$ вә $\varphi(x)$ функсијалары олур, онлар арасында әлагә (21.15)-ә әсасән

$$b(p) = \int L_{p'p} C(p')(dp') \qquad (21.19)$$

вә

$$L_{p'p} = \int \Psi_p^*(x)\breve{L}(x)\Psi_{p'}(x)(dx) \qquad (21.20)$$

олур. $\{L_{p'p}\}$ чохлуғу импулс тәсвириндә верилмиш $\breve{L}(x)$ операторудур.

(21.16) вә (21.17) ифадәләри бизә квант механикасында ән чох истифадә олунан координат вә импулс операторларыны гаршылыглы тәсвирләрдә ифадә етмәјә вә еләчә дә мүхтәлиф физики кәмијјәтләрә ујғун дикәр операторлары бу тәсвирләрдә (јә'ни матриса шәклиндә) јазмаға имкан верир.

Әввәлчә $\breve{p} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ импулс операторуну өз тәсвириндә јазаг. Бунун үчүн (21.16)-да $\breve{F} = \breve{L} = \breve{p}$ көтүрәк. Онда (12.11) вә (12.14)-ә әсасән

$$p_{p'p} = \int \Psi_{p'}^*(x)\breve{p}\Psi_p(x)(dx) = p\int \Psi_{p'}(x)\Psi_p(x)(dx) = p\delta(p-p') \qquad (21.21)$$

аларыг. Көзләнилдији кими, импулс оператору өз тәсвириндә диагонал матриса илә ифадә олунур.

Импулс операторунун x-тәсвириндәки шәклини тапмаг үчүн (21.15) тәнлијиндә $\breve{F} = \breve{x}$, $\breve{L} = \breve{p}$ көтүрәк, координат тәсвириндә $b = \varphi(x)$ вә $C = \Psi(x)$ олдуғуну нәзәрә алсаг, бу тәнлик

$$\varphi(x') = \int p_{x'x}\Psi(x)(dx) \qquad (21.22)$$

шәклинә дүшәр. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, ахырынчы тәнлијә дахил олан $p_{x'x}$ оператору

$$p_{x'x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x') \qquad (21.23)$$

шәклиндә олмалыдыр. Буну исбат етмәк үчүн $p_{x'x}$-ин (21.23) ифадәсини (21.22)-дә јазыб, ахырынчыны һиссә-һиссә интеграллајаг:

$$\varphi(x') = i\hbar\int\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\Psi(x)(dx) = \left[\delta(x-x')\Psi(x)\right]_{-\infty}^{\infty} -$$
$$-i\hbar\int\delta(x-x')\frac{\partial\Psi}{\partial x}(dx).$$

δ-функсија јалныз $x=x'$ нөгтәсиндә сыфырдан фәргли галдығындан $\left[\delta(x-x')\Psi(x)\right]_{-\infty}^{\infty} = 0$ олар. Ахырынчы интеграл исә (8.11′)-ә әсасән δ-функсија васитәсилә көтүрүлә биләр:

$$\varphi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) = \breve{p}\Psi(x),$$

јә'ни $\breve{p}$ үчүн (21.1) тәнлији алыныр. Демәли, импулс оператору координат тәсвириндә (21.23) шәклиндәдир.

Инди дә $\breve{x}$ операторунун өз тәсвириндә вә импулс тәсвириндәки шәклини тапаг. (21.16)-да $\breve{F} = \breve{L} = \breve{x}$ көтүрүб (12.3) вә (12.3′)-и нәзәрә алсаг,

$$x_{xx'} = \int \Psi_x^*(x'')\breve{x}\Psi_{x'}(x'')dx'' = x'\int \Psi_x^*(x'')\Psi_{x'}(x'')(dx'') = x'\delta(x-x')$$

аларыг, демәли $\breve{x}$ оператору өз тәсвириндә диагонал матрисадыр.

(21.16)-ја көрә $\breve{x}$ оператору импулс тәсвириндә

$$x_{pp'} = \int \Psi_p^*(x)\breve{x}\Psi_{p'}(x)(dx) = \int \Psi_p^*(x)x\Psi_{p'}(x)(dx)$$

кими ифадә олунур. $\Psi_p(x)$-ин мә'лум (12.13) вә (12.21) ифадәләриндән истифадә едиб, импулса көрә төрәмә илә координата көрә көтүрүлмүш интегралын нөвбәсини дәјишсәк, x-ин импулс тәсвириндә ифадәси

$$x_{pp'} = i\hbar\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\partial}{\partial p}\int e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}(dx) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p-p') \qquad (21.26)$$

олар.

(21.21), (21.23), (21.24) вә (21.26) ифадәләринин көмәји илә истәнилән физики кәмијјәтә ујғун оператору координат вә ја импулс тәсвириндә јазмаг олар. Ики мисал көстәрәк.

Потенсиал енержи оператору координат тәсвириндә

$$\langle x|V|x'\rangle = V_{xx'} = V(x')\delta(x-x'), \qquad (21.27)$$

импулс тәсвириндә

$$\langle p|V|p'\rangle = V_{pp'} = V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\delta(p-p'). \qquad (21.28)$$

$\breve{H}$ Һамилтон оператору координат тәсвириндә

$$\langle x|H|x'\rangle = H_{xx'} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\delta(x-x') + V(x')\delta(x-x'), \qquad (21.29)$$

импулс тәсвириндә

$$\langle p|H|p'\rangle = H_{pp'} = \frac{p^2}{2\mu}\delta(p-p') + V(i\hbar\frac{\partial}{\partial p})\delta(p-p'). \qquad (21.30)$$

Гаршылыглы тә'сир енержиси координатларын функсијасы олан системләрин тәдгиги үчүн квант механикасында координат тәсвириндән истифадә олунур. Бу тәсвирдә гаршылыглы тә'сир функсијасы она ујғун операторун үзәринә дүшүр, кинетик енержи оператору исә садә шәклә малик олур (§11-ә бах).

Електромагнит, зәиф вә ја күчлү гаршылыглы тә'сирдә олан зәррәчикләр системиндә кедән сәпилмә, доғулма, удулма, чеврилмә (дағылма) вә и.а. просесләрин тәдгиги үчүн исә импулс тәсвири истифадә олунур. Бунун сәбәби ондан ибарәтдир ки, белә системләрдә зәррәчији фәзада локализә етмәк, јә'ни вәзијјәтини дәгиг тә'јин етмәк мүмкүн олмур, лакин енержи вә ја импулсу исә дәгиг өлчүлә билир.

§ 22. МАТРИСАЛАР ҮЗӘРИНДӘ ӘМӘЛИЈЈАТЛАР

Матрисалар үзәриндә апарыла билән әмәлијјатлар (матрисалар чәбри) илә таныш олаг.

а) **Матрисаларын топланмасы**

$\breve{C}$ оператору $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын

$$\breve{C} = \breve{L} + \breve{F} \qquad (7.1)$$

чәми кими тә'јин олунарса, $\breve{C}$-јә ујғун матриса да $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ ујғун матрисаларын чәминә бәрабәр олур.

(7.1) бәрабәрлијини сол тәрәфдән Ψ_m^*, сағ тәрәфдән исә Ψ_n вуруб, x-ин бүтүн дәјишмә областы үзрә интегралласаг,

$$\int\Psi_m^*\breve{C}\Psi_n(dx) = \int\Psi_m^*\breve{L}\Psi_n(dx) + \int\Psi_m^*\breve{F}\Psi_n(dx)$$

вә ја (21.7)-јә әсасән

$$C_{mn} = L_{mn} + F_{mn} \qquad (22.1)$$

олар. Бу мүнасибәт ики (вә ја икидән чох) матрисанын топланмасы гајдасыны верир: јекун матрисанын һәр бир елементи топланан матрисаларын ујғун елементләри чәминә бәрабәрдир.

(22.1)-дән алыныр ки, јалныз ранглары ејни олан, јә'ни сәтир вә сүтунларын сајы бәрабәр олан матрисалар топлана биләр:

$$\begin{pmatrix} a_{11}a_{12} \\ a_{21}a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11}b_{12} \\ b_{21}b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} \end{pmatrix}$$

Топланан матрисалар бир-биринә бәрабәр оларса, јекун матриса онлардан биринин ујғун мислинә бәрабәр олур. Ики матриса о вахт бир-биринә бәрабәр һесаб олунур ки, онларын ујғун елементләри бәрабәр олсун, јә'ни $L_{ik}=F_{ik}$ олдугда $|L| = |F|$ олур. Доғрудан да, $a_{ik}=b_{ik}$ оларса,

$$|a_{ik}| + |b_{ik}| = 2|a_{ik}| = 2|b_{ik}|$$

алыныр.

б) **Матрисаларын вурулмасы**

$\breve{C}$ оператору $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын

$$\breve{C} = \breve{L}\breve{F} \qquad (22.1')$$

һасили кими тә'јин олунурса, $|C|$ матрисасы $|L|$ вә $|F|$ матрисаларын һасилинә бәрабәр олар. Матрисаларын вурулмасы гајдасыны тапаг. Бунун үчүн (22.1′) мүнасибәтини (22.1)-ә охшар олараг

$$C_{mn} = \int\Psi_m^*\breve{C}\Psi_n(dx) = \int\Psi_m^*\breve{L}\breve{F}\Psi_n(dx) = \int\Psi_m^*\breve{L}(\breve{F}\Psi_n)(dx) \qquad (22.2)$$

шәклиндә јазаг.

$\breve{F}$-ин Ψ_n-ә тә'сири һәр һансы φ_n функсијасына кәтирир, φ_n-и исә Ψ_k функсијаларын ихтијари комбинасијасы шәклиндә көстәрилә биләр:

$$\varphi_n = \breve{F}\Psi_n = \sum a_{nk}\Psi_k,$$

буну солдан $\Psi_{k'}^*(x)$-ә вуруб x үзрә интегралласаг,

$$\int \Psi_{k'}^{*} \breve{F} \Psi_{n}(dx) = F_{k'n} = \sum_{k} a_{nk} \int \Psi_{k'}^{*} \Psi_{k}(dx) = \sum_{k} a_{nk}\delta_{kk'} = a_{nk'}$$

аларыг, онда

$$\breve{F}\Psi_{n}(x) = \sum_{k} F_{kn}\Psi_{k} \qquad (22.3)$$

олар. Буну (22.2)-дә јазсаг,

$$C_{mn} = \sum_{k} \int \Psi_{m}^{*} \breve{L} \Psi_{k}(dx) F_{kn} = \sum_{k} L_{mk} F_{kn}$$

вә ја

$$C_{mn} = \sum_{k} L_{mk} F_{kn} \qquad (22.4)$$

алынар.

(22.4) ифадәси ики матрисанын вурулма гајдасыны ифадә едир. Бу гајданы ифадә етмәк үчүн фәрз едәк ки, (22.4)-ә дахил олан матрисалар ики сәтир сүтунлу (2 рангли) матрисалардыр, јә'ни индексләри 1,2 гијмәтләрини алыр. Бу һал үчүн $|C|$ матрисасынын матриса елементләрини һесаблајаг:

$$C_{11} = \sum_{k=1,2} L_{1k} F_{k1} = L_{11}F_{11} + L_{12}F_{21},$$
$$C_{12} = \sum_{k} L_{1k} F_{k2} = L_{11}F_{12} + L_{12}F_{22}$$

вә и.а. Бурада C_{11}, C_{12} вә L_{11}, L_{12}–$|C|$ вә $|L|$ матрисаларынын биринчи сәтир елементләри, F_{11}, F_{21} вә F_{12}, F_{22} исә $|F|$ -ин, ујғун олараг биринчи вә икинчи сүтун елементләридир. Бурадан ики матрисанын вурулма гајдасыны белә ифадә етмәк олар: $|C|$ матрисанын C_{mn} елементини тапмаг үчүн $|L|$ матрисанын m-сәтр елементләрини $|F|$ матрисанын n-сүтунун ујғун елементләринә вуруб топламаг лазымдыр.

(22.4)-дән чыхыр ки, $|L|$ вә $|F|$ матрисаларыны о вахт $|LF|$ ардычыллығы илә вурмаг олар ки, $|L|$ матрисанын сүтунлары сајы $|F|$ матрисанын сәтирләр сајына бәрабәр олсун. Онда $|C|$ һасил матрисанын сүтунлары сајы $|L|$ -ин сүтунлары сајына, сәтирләри сајы исә $|F|$ -ин сәтирләри сајына бәрабәр олар. $|L|$ вә $|F|$ квадрат матрисалар оланда $|C|$ дә һәмин тәртибдән (рангдан) квадрат матриса олур.

Матрисаларын һасили, операторларын һасили кими, үмумиjјәтлә коммутатив дејилдир: $|LF| \neq |FL|$. Доғрудан да

$$(LF)_{mn} = \sum_{k} L_{mk} F_{kn}, \quad (FL)_{mn} = \sum_{k} F_{mk} L_{kn} \qquad (22.5)$$

бәрабәрликләри үмуми һалда бир-биринин үзәринә дүшмүр, белә ки, (22.5) ифадәләринин биринчисиндә $|L|$-ин сәтир елементләри $|F|$-ин сүтун елементләринә вурулдуғу һалда, икинчи ифадәдә исә $|F|$-ин сәтир елементләри $|L|$-ин сүтун елементләринә вурулур. Ашағыдакы мисал буну әјани шәкилдә нүмајиш етдирир. Тутаг ки,

$$|L| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, \qquad |F| = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Онда

$$|LF| = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}, \qquad |FL| = \begin{pmatrix} 7 & 2 \\ 9 & 4 \end{pmatrix},$$

јә'ни $|LF| \neq |FL|$-дир. $|LF|=|FL|$ оланда матрисалар коммутативдир дејәчәјик.

(22.1) вә (22.4) мүнасибәтләриндән алыныр ки, матрисаларын һасили дистрибутив хассәјә маликдир:

$$|L|(|F| + |C|) = |LF| + |LC|. \qquad (22.6)$$

Матрисаларын һасили һәмчинин ассосиатив хассәјә дә маликдир.

$$\breve{L}(\breve{F}\breve{C}) = (\breve{L}\breve{F})\breve{C}. \qquad (22.7)$$

(22.4) мүнасибәти васитәсилә үч вә чох матрисаларын һасили олан матрисаны тапмаг олар. Тутаг ки, $\breve{C} = \breve{L}\breve{F}\breve{Q}$ бәрабәрдир. (22.4)-ә көрә $\breve{C}$ -нин елементләри

$$C_{mn} = (LFQ)_{mn} = \sum_{k} (LF)_{mk} Q_{kn} = \sum_{k,i} L_{mi} F_{ik} \varphi_{kn} \qquad (22.8)$$

кими һесабланыр. Истәнилән сајда матрисаларын һасилиндән тәшкил олунмуш матрисанын елементләри дә буна охшар олараг тапылыр:

$$\breve{C} = \breve{L}\breve{F}\breve{Q}\breve{A}\ldots\breve{D},$$
$$C_{mn} = \sum L_{mk} F_{kl} \varphi_{lj} A_{jr} \ldots D_{fn}. \qquad (22.9)$$

Матрисаларын һасили олан матрисаја ермит гошма матрисаны тапмаг үчүн операторларын һасилинә ујғун гошма оператору тә'јин едән (8.12) вә ја (8.14) мүнасибәтләрини әсас көтүрмәк олар. $|C| = |LF|$ вә ја $|C| = |\ LFQA\ldots D\ |$ матрисаларына ермит гошма матрисалар

$$|C^{+}| = |(LF)^{+}| = |F^{+}||L^{+}|,$$
$$C_{mn}^{+} = (F^{*}L^{*})_{mn} = \sum (F^{*})_{mk} (L^{*})_{kn} \qquad (22.10)$$

вә

$$|C^{*}| = |D^{*} \ldots A^{*} Q^{*} F^{*} L^{*}|,$$

$$C^{*}_{mn} = \sum (D^{*})_{mi} \ldots (A^{*})_{lk} (Q^{*})_{kr} (F^{*})_{rr} (L^{*})_{rn} \qquad (22.11)$$

кими тә'јин олунур.

Инди дә тез-тез тәсадүф едилән бә'зи матрисаларын сечилмәси гајдасы илә танын олаг.

(21.8) илә верилмиш сыфырынчы матриса, һәр бахылан һалда, онун һәр һансы башга матрисаја вурулмасы ганунундан тә'јин олунур. $|O|$ матрисасы елә сечилир ки,

$$|O|\,|L| = 0 \quad \text{вә ја} \quad |L|\,|O| = 0 \qquad (22.12)$$

олсун. Демәли, $|O|$ матрисасынын сәтир вә сүтунларынын сајы $|L|$ матрисасынын сәтир вә сүтунларынын сајы илә тә'јин олунур. Она көрә дә (22.12)-дә биринчи вә икинчи бәрабәрликләрдәки сыфырынчы матрисанын сәтир вә сүтунларынын сајы үмумијјәтлә мүхтәлифдир.

Бунун кими дә һәр бахылан һал үчүн (21.8) ифадәси илә верилмиш $|I|$ ваһид матриса тә'јин олуна биләр. Ваһид матриса

$$|I|\,|L| = |L| \quad \text{вә} \quad |F|\,|I| = |F| \qquad (22.13)$$

мүнасибәтләриндән сечилир. Бурадан чыхыр ки, $|I|$ ваһид матриса квадрат матрисадыр. Онун тәртиби (рангы - сәтир вә ја сүтунларын сајы) $|L|$– матрисанын сүтунлары сајына, $|F|$ матрисанын сәтирләри сајына бәрабәрдир.

Чәбрдә ваһидин ојнадығы ролу матриса һесабында ваһид матриса ојнајыр. Мә'лумдур ки, ихтијари C сабит әдәди ваһидин мисли кими көстәрмәк олар. Буна охшар, C сабит әдәдинә ујғун матриса ваһид матрисанын C мисли кими көстәрилә биләр. Башга сөзлә C әдәдинә ујғун матрисанын елементләри

$$C_{ik} = C\delta_{ik} \quad \text{вә ја} \quad |C| = C\,|I| \qquad (22.14)$$

кими тә'јин олунур. Бу матрисаны ихтијари $|L|$ матрисасына вуруб, (22.4) вә (22.13) бәрабәрликләрини вә δ_{ik} символунун хассәсини нәзәрә алсаг,

$$(CL)_{mn} = (CIL)_{mn} = \sum_{k} C\delta_{mk} L_{kn} = CL_{mn}$$

вә ја

$$C|L_{ik}| = |CL_{ik}| \qquad (22.15)$$

олар. Демәли, C **сабит әдәди матрисаја вурмаг үчүн ону матрисанын һәр бир елементинә вурмаг лазымдыр.**

$|L|$ матрисасы гејри-сингулјар олдугда, она тәрс матриса гурула биләр. $|L|$-ә тәрс матрисаны $|L^{-1}|$ кими ишарә етсәк, о

$$|L|\,|L^{-1}| = I \quad \text{вә ја} \quad |L^{-1}|\,|L| = I \qquad (22.16)$$

тәнликләриндән тә'јин олунур. Тәрс матрисанын елементләрини тапмаг үчүн, онун (22.16) тә'јининдән алынан

$$\sum_{k} L_{mk} (L^{-1})_{kn} = \delta_{mn}; \qquad \sum_{k} (L^{-1})_{mk} L_{kn} = \delta_{mn} \qquad (22.17)$$

хәтти тәнликләр системини һәлл етмәк лазымдыр. Бу систем о вахт һәлл олуна биләр ки, $|L|$-ә ујғун детерминант сыфырдан фәргли галсын ($\det|L| \neq 0$). Онда тәрс матрисанын һәр бир елементи

$$(L^{-1})_{ik} = \frac{\min (L)_{ik}}{\det |L|} \qquad (22.18)$$

кими тапылыр.

Ихтијари матрисанын детерминантыны тапмаг үчүн әввәлчә о, мүәјјән сајда сәтир вә сүтунларыны позмагла квадрат матриса шәклинә салыныр. Сонра исә алынмыш квадрат чәдвәлдәки әдәдләрин ади гајда үзрә детерминанты һесабланыр.

Матрисанын детерминанты сыфра бәрабәр олдугда, белә матриса **сингулјар матриса** адланыр вә о, тәрс матрисаја малик олмур.

Һасилдә иштирак едән матрисалар гејри-сингулјар оларса, јә'ни онларын һәр бири тәрс матрисаја маликдирсә, $|LFD\ldots|$ һасил матрисаја ујғун тәрс матриса

$$|(LFD\ldots)^{-1}| = \ldots|D|^{-1}|F|^{-1}|L|^{-1} \qquad (22.19)$$

кими тапылыр. Доғрудан да (22.19)-у сағдан ардычыл олараг әввәлчә L-ә, сонра F-ә, даһа сонра D-јә вә и.а. вуруб, һәр дәфә (22.16) мүнасибәтләрини нәзәрә алсаг,

$$|(LFD\ldots)^{-1}|\cdot|LFD\ldots| = 1 \qquad (22.20)$$

алынар. Демәли, (22.16)-ја көрә $|(LFD\ldots)^{-1}|$ матрисасы $|LFD\ldots|$- јә тәрс матриса олур.

$L^{+} = L^{-1}$ шәрти өдәнилән матрисалар унитар матриса адланыр. (22.16)-дан L-ин унитарлыг шәрти

$$|L^{+}|L| = |L|L^{+}| = I \qquad (22.21)$$

олур.

Һасилдә иштирак едән матрисалар унитардырса, һасил матриса да унитар олур. (22.10) вә (22.16)-дан

$$(|LF|)^{+} = |F^{+}||L^{+}| = |F^{-1}||L^{-1}| = (|LF|)^{-1}$$

олур, јә'ни $|LF|$ – һасили үчүн унитарлыг шәрти өдәнилир.

Садә матрисаларла јанашы матрисаларын функсијасы олан $f(L)$ кими мүрәккәб матрисалара да тәсадүф олунур.

Матрисаларын топланмасы вә вурулмасы гајдалары мә'лум олдугда, белә матрисаларла ишләмәк, јәгин ки, чәтин олмаз. Мәсәлән, $|e^{L}|$ кими мүрәккәб матриса

$$|e^{L}| = |I| + |L| + \frac{|L^2|}{2!} + \frac{|L^3|}{3!} + \dots$$

шәкилли матрисалар сырасына еквивалентдир вә матрисаларын топланма вә вурулма гајдаларына әсасән, јәгин ки, бу сыраны һәмишә һесабламаг олар.

$|e^{L}|$ шәкилли мүрәккәб матрисада $|L|$ ермит матриса оларса, ($|L|^{+}=|L|$) $|e^{iL}|$ -дә унитар матриса олур. Билдијимиз кими, унитар матриса үчүн $|e^{iL}|^{+} = |e^{iL}|^{-1}$ шәрти өдәнмәлидир. Доғрудан да $|e^{iL}|^{-1}=|e^{-iL}|$ вә $|L|^{+}=|L|$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$|e^{iL}|^{+} = \left\{|1| + i|L| + \frac{i^2}{2}|L^2| + \frac{i^3}{3!}|L^3| + \dots\right\}^{+} = 1 - i|L| - \frac{|L^2|}{2!} + \frac{i}{3!}|L^3| + \dots = |e^{-iL}|$$

олур, демәли $|e^{iL}|$ унитар матрисадыр.

Биз јухарыда көрдүк ки, һәр һансы C сабит скалјар кәмијјәти, диагонал елементләри C әдәдинә бәрабәр диагонал матриса шәклиндә көстәрилә биләр. Инди дә һал векторунун матриса тәсвирини тапаг.

Бунун үчүн (21.3) тәнлијиндән истифадә едәк

$$b_k = \sum_n L_{kn} c_n . \qquad (21.3)$$

Бу тәнликдә b_k вә c_n далға функсијалары вә ја Һилберт фәзасында верилмиш векторлардыр. Тәнлијин сағ тәрәфиндә матрисанын вектора һасили дурур. Бу һасили ачмаг гајдасыны тапмаг үчүн k вә n-ин 1,2 гијмәтләри алдығыны фәрз едәк. Онда (21.3) тәнлијиндән

$$b_1 = L_{11}c_1 + L_{12}c_2 = \sum_{n=1,2} L_{1n}c_n , \qquad (22.22)$$

$$b_2 = L_{21}c_1 + L_{22}c_2 = \sum_{n=1,2} L_{2n}c_n$$

кими систем аларыг. Бурадан көрүнүр ки, L_{11}, L_{12} вә L_{21}, L_{22} елементләри $|L|$ -ин биринчи вә икинчи сәтир елементләридир. Матрисаларын јухарыда верилмиш вурулма гајдасына (сәтрин сүтуна һасили) көрә c_1 вә c_2 елементләри вектора ујғун матрисанын биринчи сүтун елементләри олмалыдыр.

Системин һәр ики тәнлијиндә јалныз c_1 вә c_2 елементләри иштирак етдијиндән, фәрз етмәк олар ки, бу матрисанын јалныз биринчи сүтун елементләри сыфырдан фәргли, галан елементләри исә сыфра бәрабәрдир. Доғрудан да, асанлыгла јохламаг олар ки, (22.22) системини матриса тәсвириндә јазмаг олар:

$$\begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ b_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 & 0 \\ c_2 & 0 \end{pmatrix}$$

Јалныз бир сүтун вә ја бир сәтир елементләри сыфырдан фәргли олан матрисалар бир сүтунлу вә ја бир сәтирли матрисалар адланыр вә ашағыдакы шәкилдә јазылыр:

$$b = \begin{vmatrix} b_1 & 0 & 0\dots \\ b_2 & 0 & 0\dots \\ b_3 & 0 & 0\dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix}; \qquad c = \begin{vmatrix} c_1 & 0 & 0\dots \\ c_2 & 0 & 0\dots \\ c_3 & 0 & 0\dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix} \qquad (22.23)$$

Бурадан көрүнүр ки, (21.6) тәнлији матриса шәклиндә

$$|b| = |L|\,|c| \qquad (22.24)$$

кими јазылар. Бурада $|b|$ вә $|c|$ (22.23)-дә, $|L|$ исә (21.8)-дә верилмиш матрисалардыр.

(22.24) охшар (21.1) тәнлијини дә матриса шәклиндә јазмаг олар:

$$|\varphi| = |L|\,|\Psi|. \qquad (22.25)$$

Бурада $|L|$ јенә дә (21.8)-дә верилмиш матриса, φ вә Ψ исә

$$\varphi = |\varphi| = \begin{vmatrix} \varphi_1 & 0 & 0\dots \\ \varphi_2 & 0 & 0\dots \\ \varphi_3 & 0 & 0\dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix} \qquad (22.26)$$

$$\Psi = \begin{vmatrix} \Psi_1 & 0 & 0 & \dots \\ \Psi_2 & 0 & 0 & \dots \\ \Psi_3 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix} \qquad (22.27)$$

шәклиндәки бир сүтунлу матрисалардыр.

Ајдындыр ки, (22.23) вә (22.26), (22.27) матрисалара ермит гошма матрисалар бир сәтирли матрисалар олар: мәсәлән, Ψ-јә гошма матриса

$$\Psi^{+} = \begin{vmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* & \Psi_3^* & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = \left| \Psi_1^* \Psi_2^* \Psi_3^* \dots \right| \qquad (22.28)$$

олар.

Демәли, Һилберт фәзасында верилмиш вектор бир сүтунлу (бир сәтирли) матриса шәклиндә ифадә олунур вә матрисанын вектора вурулмасы әмәлијјаты матрисанын матрисаја вурулмасы гајдасы илә ичра едилир. Һәр һансы матрисаны бир сүтунлу (сәтирли) матрисаја вурдугда бир сүтунлу (сәтирли) матриса алыныр.

Ашағыдакы матрисалары фәргләндирирләр: $|L^*| = |L|$ олдугда матриса **һәгиги матриса**, $|L^*| = |-L|$ олдугда – **мөвһуми (хәјали) матриса**. $|\tilde{L}| = |L|$ олдугда – **симметрик матриса**, $|\tilde{L}| = |-L|$ олдугда **антисимметрик матриса**, $|L^+| = |L|$ олдугда – **ермит матриса**, $|L^+| = |-L|$ олдугда – **антиермит матриса** вә нәһајәт $|L^+| = |L^{-1}|$ олдугда исә **унитар матриса** адланыр.

§ 23. УНИТАР ЧЕВРИЛМӘЛӘРИН ЕЛЕМЕНТАР НӘЗӘРИЈЈӘСИ

Квант механики системин һалыны характеризә едән Ψ далға функсијасы сонсуз өлчүлү Һилберт фәзасында көтүрүлмүш вектордур. Бу ба-

хымдан, системин хассәләрини характеризә едән һәр бир L физики кәмијјәтинә $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n \dots$ кими там систем тәшкил едән базис векторлар (базис функсијалар) чохлуғу вә ја һәмин өлчүлү координат охлары системи ујғундур. Демәли, бир тәрәфдән $\Psi_1, \Psi_2, \dots,$ функсијалар чохлуғу Һилберт фәзасында координат охлары үзрә көтүрүлмүш орт векторлардыр, дикәр тәрәфдән исә $\breve{L}$ операторунун $L_1, L_2, \dots$ гијмәтләринә ујғун там мәхсуси функсијалар системидир.

Һилберт фәзасында ихтијари L вә F физики кәмијјәтләринә ујғун $\Psi(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n \dots)$ вә $\varphi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n \dots)$ кими ики векторун верилдијини фәрз едәк. Башга сөзлә тутаг ки, $\breve{L}$ операторуна ујғун $\Psi_1, \Psi_2, \dots$ мәхсуси функсијалар вә $L_1, L_2, \dots$ мәхсуси гијмәтләр спектрләри (L -тәсвири) вә $\breve{F}$ операторуна ујғун $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ мәхсуси функсијалар вә $F_1, F_2, \dots,$ мәхсуси гијмәтләр спектрләри (F -тәсвири) бизә мә'лумдур*. Бу тәсвирләрин бириндән дикәринә гаршылыглы кечид гајдасы илә таныш олаг.

§22-дә координат тәсвириндән ихтијари башга бир тәсвирә (вә әксинә) кечид гајдасы илә таныш олдуг. Һәмин гајданы ихтијари ики тәсвир арасындакы кечид үчүн үмумиләшдирәк.

Һәр бир оператор өз тәсвириндә диагонал матриса илә ифадә олундуғундан L-тәсвириндән F -тәсвиринә кечид $|L|$ матрисасы диагонал олан тәсвирдән ($L_{mn} = L_n \delta_{mn}$) F матриса диагонал олан ($F_{\alpha\beta} = F_\beta \delta_{\alpha\beta}$) тәсвирә кечмәк демәкдир. Һилберт фәзасында бу кечид $\{\Psi_n\}$ базис (орт) векторларын јаратдығы координат системиндән $\{\varphi_\alpha\}$ базис (орт) векторларын јаратдығы координат системинә кечиддән башга бир шеј дејилдир.

Кечид дүстурларыны алмаг үчүн φ_α функсијасыны Ψ_n функсијаларынын комбинасијасы шәклиндә көстәрәк

$$\varphi_\alpha(x) = \sum S_{n\alpha} \Psi_n\,; \quad \varphi_\beta^+ = \sum_k \Psi_k^+ S_{\beta k}^+\,. \qquad (23.1)$$

$S_{n\alpha}$ әмсалларынын ифадәсини тапмаг үчүн (23.1)-и солдан $\Psi_{k'}^*$ функсијасына вуруб, x-ин бүтүн дәјишмә областы үзрә интеграллајаг:

$$\int \Psi_{k'}^*(x) \varphi_\alpha(x)(dx) = \sum_k S_{k\alpha} \int \Psi_{k'}^*(x) \Psi_k(x)(dx) = \sum_k S_{k\alpha} \delta_{k'k} = S_{k'\alpha}$$

вә ја

$$S_{k\alpha} = \int \Psi_k^*(x) \varphi_\alpha(x)(dx) \qquad (23.2)$$

олар.

---

* Бу §-да бүтүн дүстурлар операторларын дискрет спектрә малик олдуғу һал үчүн чыхарылыр. Онларда чәм апарылан индексләрә ујғун һаллар үзрә интеграла кечсәк, кәсилмәз спектрә ујғун дүстурлар алмыш оларыг.

$|S| = |S_{k\alpha}|$ матрисасы L-тәсвириндән F-тәсвиринә кечиди тә'мин едир вә о, **кечид матрисасы** адланыр. Бурада һәр ики операторун дискрет спектрә малик олдуғу гәбул едилмишдир. S матрисасынын һәр ики α вә k индексләри дискрет дәјишир. Операторлардан бири, мәсәлән, $\hat{L}$ дискрет $\hat{F}$ исә кәсилмәз спектрә малик олдугда $S_{k\alpha}$ үчүн (23.2) ифадәси сахланыр. Лакин индексләрдән α кәсилмәз, k исә дискрет гијмәтләр алыр. Һәр ики оператор кәсилмәз спектрә малик олдугда исә (23.1)-дә чәм k үзрә интеграла кечир:

$$\varphi_\alpha(x) = \int S_{k\alpha} \Psi_k(x)(dk) \tag{23.3}$$

вә $|S|$ кечид матрисасынын һәр ики индекси кәсилмәз дәјишир.

S кечид матрисасынын хассәләри илә таныш олаг.

Фәрзијјәмизә көрә $\{\Psi_n(x)\}$ вә $\{\varphi_\alpha(x)\}$ чохлуглары там систем тәшкил едир. Она көрә (23.1)-дән

$$\int \varphi^+_\alpha(x)\varphi_\beta(x)(dx) = \delta_{\alpha\beta} = \sum_{kk'} S_{\alpha k'} S_{k\beta} \int \Psi^*_{k'}(x)\Psi_k(x)(dx),$$

бурада $\int \Psi^*_{k'} \Psi_k (dx) = \delta_{k'k}$ вә

$$\delta_{\alpha\beta} = \sum_{k'k} S^+_{\alpha k'} S_{k\beta} \delta_{k'k} = \sum_k S^+_{\alpha k} S_{k\beta} = (S^+S)_{\alpha\beta} \tag{23.4}$$

олар. Бурада сол тәрәфдә I ваһид матрисанын елементи, сағ тәрәфдә исә ики S^+ вә S матрисаларын һасилиндән алынан матрисанын ујғун елементи дурур. Ики матрисанын бәрабәрлији шәртиндән (23.4)-ү матриса шәклиндә

$$S^+S=I \tag{23.5}$$

кими јазмаг олар.

Ψ_n функсијаларыны φ_α функсијаларынын комбинасијасы шәклиндә көстәрмиш олсајдыг, (23.5) әвәзинә

$$SS^+=I \tag{23.6}$$

алардыг.

(23.5) вә (23.6) мүнасибәтләри көстәрир ки, $|S|$ кечид матрисасы унитар матрисадыр: $|S^+| = |S^{-1}|$. Бир тәсвирдән дикәр тәсвирә унитар матрисалар васитәсилә апарылан кечид вә ја Һилберт фәзасында бир координат системиндән дикәр координат системинә кечид **унитар чеврилмә** вә ја **каноник чеврилмә** адланыр.

Ψ вә φ функсијалары бир сүтунлу матриса олдуғундан (§22-јә бах) (23.1) унитар чеврилмәни

$$\varphi = S\Psi \tag{23.7}$$

φ-дән Ψ-јә әкс кечиди исә

$$S^+\varphi= S^+S\Psi \quad \text{вә ја} \quad \Psi=S^+\varphi \tag{23.8}$$

кими јазмаг олар.

Ејни бир $\Psi(x)$ векторунун мүхтәлиф координат системләриндә (L вә F-тәсвирләриндә) көтүрүлмүш компонентләри арасындакы әлагәни мүәјјән етмәк олар. Бу әлагә

$$\Psi(x) = \sum C_k \Psi_k(x) = \sum_\alpha C_\alpha \varphi_\alpha(x) \tag{23.8$'$}$$

бәрабәрлијиндән тапыла биләр. Бурада $\{C_\kappa\}$ L-тәсвириндә, $\{C_\alpha\}$ исә F-тәсвириндә верилмиш вектордур. (23.1)-дән $\varphi_\alpha(x)$ -ин ифадәсини бурада јазсаг,

$$\sum_k C_k \Psi_k(x) = \sum_{\alpha,i} C_\alpha S_{i\alpha} \Psi_i(x)$$

аларыг. Бу бәрабәрлијин һәр ики тәрәфини солдан $\Psi^*_n(x)$-ә вуруб, x үзрә интегралласаг,

$$C_n = \sum_\alpha S_{n\alpha} C_\alpha \tag{23.9}$$

алынар (бурада $S_{n\alpha}$ – (23.2) илә верилмишдир). (23.9)-дан көрүнүр ки, ихтијари $\Psi(x)$ функсијасынын мүхтәлиф тәсвирләрдәки ифадәләрин бириндән дикәринә кечмәк дә унитар $|S|$ матрисасы илә апарылыр, јә'ни (23.9) кечиди унитар (каноник) чеврилмәдир.

$C=|C_\kappa|$ вә $C'=|C_\alpha|$ матрисалары бир сүтунлу матрисалар олдуғундан (23.9) чеврилмәси

$$C= S\,C' \qquad C'= S^+ C \tag{23.10}$$

кими јазыла биләр.

(23.1) вә ја (23.7) унитар чеврилмә васитәсилә һал вектору бир тәсвирдән дикәр тәсвирә кечирилдикдә, операторлар да јени тәсвирә кечирилмәлидир. Она көрә координат тәсвириндә верилмиш һәр һансы $\hat{D}(x)$ операторуну L-тәсвирдән F-тәсвирә (вә ја әксинә) кечирән унитар чеврилмәни тапаг.

$\breve{D}(x)$ операторуну әввәлчә L вә F-тәсвирләриндә јазаг. (21.7)-јә ујғун олараг, о, L -тәсвириндә

$$D_{nk} = \int \Psi_n^*(x)\breve{D}(x)\Psi_k(x)(dx), \qquad (23.11)$$

F -тәсвириндә исә

$$D_{\alpha\beta} = \int \varphi_\alpha^+(x)\breve{D}(x)\varphi_\beta(x)(dx) \qquad (23.12)$$

олар.

φ_α^* вә φ_β -функсијаларынын (23.1) илә верилмиш ифадәләрини (23.12)-дә јазыб, (21.11)-и нәзәрә алсаг,

$$D_{\alpha\beta} = \sum_{k'k} S_{\alpha k'}^+ \int \Psi_{k'}^+(x)\breve{D}(x)\Psi_k(x)S_{k\beta}$$

аларыг. (23.11)-ә әсасән бу бәрабәрлик

$$D_{\alpha\beta} = \sum_{k'k} S_{\alpha k'}^+ D_{k'k} S_{k\beta} \qquad (23.13)$$

шәклини алар. $\breve{D}(x)$ операторуну L -тәсвириндә $D' = \|D_{k'k}\|$, F -тәсвириндә $D'' = \|D_{\alpha\beta}\|$ кими ишарә етсәк, (23.13) ифадәси

$$D'' = S^+ D' S\,, \qquad (23.14)$$

F-тәсвириндән L -тәсвиринә кечид исә

$$D' = SD''S^+ \qquad (23.15)$$

олар. Демәли, далға функсијасы (23.7) каноник чеврилмәси васитәсилә бир тәсвирдән башга тәсвирә кечирсә, операторлар да (23.14) вә ја (23.15) ганунлары илә јени тәсвирә кечир.

(23.11)-ин (23.14) илә мүгајисәсиндән көрүнүр ки, (23.11)-ә, $\breve{D}(x)$ операторуну x-тәсвириндән L -тәсвиринә кечирән унитар чеврилмә кими бахмаг олар. Доғрудан да, $\breve{D}(x)$ операторуну (21.27)-јә ујғун олараг, x-тәсвириндә јазаг:

$$D_{x'x} = D(x')\delta(x - x')\,. \qquad (23.16)$$

(23.11)-дә $\breve{D}(x)$ операторуну (23.16)-дан алынан

$$\breve{D}(x) = \int D_{x'x}(dx') = \int \breve{D}(x')\delta(x - x')(dx') \qquad (23.17)$$

ифадәси илә әвәз етсәк,

$$D_{nk} = \int \Psi_n^+(x')D_{x'x}\Psi_k(x)(dx)(dx') \qquad (23.18)$$

олар. $\Psi_n^+(x') = S_{nx'}^+$, $\Psi_k(x) = S_{xk}$ гәбул едиб, S матрисанын x вә x' индексләринин кәсилмәз дәјишдијини нәзәрә алсаг, (23.18) бәрабәрлијини (23.14) шәклиндә јазмаг чәтин олмаз. Беләликлә, далға функсијалары $|S|$ унитар матрисанын матриса елементләри олур.

Бүтүн јухарыда дедикләримиздән чыхыр ки, һәр бир физики кәмијјәтә (23.14) унитар чеврилмә илә бири дикәринә кечән сонсуз сајда оператор ујғун кәлир. Башга сөзлә, араларындакы рабитә (23.14) вә ја (23.15) мүнасибәтләри илә верилән бүтүн операторлар ејни бир физики кәмијјәтә ујғундур.

Операторларын ашағыдакы хассәләри унитар (каноник) чеврилмәјә көрә инвариант галыр.

1) Верилмиш оператор бир тәсвирдә ермитдирсә, бүтүн башга тәсвирләрдә дә ермит олур. Фәрз едәк ки, $\breve{D}(x)$ оператору L-тәсвириндә ермитдир $D'^+ = D'$. Онда (23.14) вә (22.11)-дән

$$(D'')^+ = (S^+D'S)^+ = S^+D'^+S = S^+D'S = D'' \qquad (23.19)$$

олур, јә'ни $\breve{D}''$ оператору да (F-тәсвириндә) ермитдир.

2) Унитар чеврилмәдән сонра алынан $\breve{L}', \breve{F}', \breve{C}', \ldots$ операторлар чәбри әввәлки $\breve{L}, \breve{F}, \breve{C}, \ldots$ операторлар чәбри үзәринә дүшүр. Операторларын топланмасы вә вурулмасы әмәлијјатлары чеврилмәдән әввәл

$$C = L + F, \qquad D = LF \qquad (23.20)$$

кими јазыларса, унитар чеврилмәдән сонра да өз шәклини сахлајыр. Доғрудан да бунлары солдан S^+, сағдан исә S-ә вураг. Онда (23.14), (23.5) вә (23.6) мүнасибәтләринә әсасән онлары

$$S^+CS = S^+LS + S^+FS; \quad S^+DS = S^+LFS = S^+LSS^+FS$$

вә ја

$$C' = L' + F', \qquad D' = L'F' \qquad (23.20')$$

олар.

3) Операторлар арасындакы коммутативлик мүнасибәтләри унитар чеврилмәјә көрә инвариантлыр.

$$\breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L} = i\breve{G} \qquad (23.21)$$

оларса, чеврилмәдән сонра

$$S^+\check{L}\check{F}S - S^+\check{F}\check{L}S = \imath S^+\check{G}S\,,$$

(23.5,6)-ја көрә

$$S^+\check{L}SS^+\check{F}S - S^+\check{F}SS^+\check{L}S = \imath S^+\check{G}S$$

вә ја

$$L'F' - F'L' = \imath G' \qquad (23.21')$$

алынар вә и.а.

4) Операторун мәхсуси гијмәтләр спектри каноник чеврилмәјә көрә инвариантдыр.

$$\check{L}\Psi = L\cdot\Psi \qquad (23.22)$$

бәрабәрлијини солдан S-ә вураг:

$$S\check{L}\Psi = L\cdot S\Psi$$

вә ја

$$S\check{L}S^+S\Psi = L\cdot S\Psi\,.$$

(23.1) вә (23.14) -ә көрә

$$\check{L}'\varphi = L\cdot\varphi$$

олур. Демәли, $\check{L}$ вә $\check{L}'$ операторлары ејни L мәхсуси гијмәтләр спектринә малик олур.

5) Унитар чеврилмә васитәси илә ихтијари матрисаны диагонал матрисаја чевирмәк олар. Тутаг ки, унитар чеврилмәдән сонра $|L'|$ матрисасы диагонал матрисадыр. Белә унитар $|S|$ матрисаны тапаг. Бунун үчүн $L' = S^+LS$ ифадәсини

$$SL' = LS\,,$$

јахуд

$$\sum_\alpha S_{k\alpha}L'_{\alpha\beta} = \sum_n L_{kn}S_{n\beta}$$

шәклиндә јазаг. L' -ин диагонал олдуғуну нәзәрә алсаг, $L'_{\alpha\beta} = L'_\beta\delta_{\alpha\beta}$

$$\sum_\alpha S_{k\alpha}L'_\alpha\delta_{\alpha\beta} = \sum_n L_{kn}S_{n\beta}$$

вә ја

$$\sum_n L_{kn}S_{n\beta} = L'_\beta S_{k\beta} \qquad (23.23)$$

алынар. Бурада β фиксә едилмиш индекс олдуғундан $S_{k\beta}$ әвәзиндә S_k көтүрә биләрик. Онда (23.23) тәнлији

$$\sum_n L_{kn}S_n = L\cdot S_k\,. \qquad (23.24)$$

Бу тәнлик (21.3) тәнлијини хатырладыр. Онларын бир-биринин үзәринә дүшмәси үчүн $S_n = C_n$, $S_k = C_k$ көтүрмәк лазымдыр.

Беләликлә, ихтијари $|L|$ матрисаны диагонал матрисаја чевирән $|S|$ унитар матриса бир сәтир вә ја бир сүтун матриса шәклинә малик һал вектору (далға функсијасы) үзәринә дүшүр.

6) Матрисанын диагонал елементләри чәми (бу чәм шпур адланыр вә Sp кими ишарә олунур) унитар чеврилмәјә көрә инвариантдыр. Буну исбат етмәк үчүн $L' = S^+LS$ бәрабәрлијинин һәр ики тәрәфиндән шпур көтүрәк. Онда (22.4) вә (23.4) әсасән

$$\begin{aligned}\mathrm{Sp}L' &= \sum_\alpha L'_{\alpha\alpha} = \sum_\alpha (S^+LS)_{\alpha\alpha} = \sum_{\alpha lk} S^+_{\alpha l}L_{lk}S_{k\alpha} = \\ &= \sum_{lk} L_{lk}\sum_\alpha S_{k\alpha}S^+_{\alpha l} = \sum_{l,k} L_{lk}\delta_{kl} = \sum_k L_{kk} = \mathrm{Sp}L \qquad (22.25)\end{aligned}$$

олар, јә'ни унитар чеврилмә матрисанын шпуруну дәјишмир.

§ 24. МАТРИСА ШӘКЛИНДӘ ВЕРИЛМИШ ОПЕРАТОРЛАРЫН МӘХСУСИ ГИЈМӘТЛӘРИ, МӘХСУСИ ФУНКСИЈАЛАРЫ ВӘ ФИЗИКИ КӘМИЈЈӘТИН ОРТА ГИЈМӘТИ

Тутаг ки, Ψ далға функсијасы (һал вектору) координат тәсвириндә верилмиш $\check{L}(x)$ операторунун мәхсуси функсијасыдыр, јә'ни, о

$$\check{L}\Psi = L\cdot\Psi \qquad (24.1)$$

тәнлијини өдәјир. Инди дә (24.1) тәнлијини һәр һансы $\check{F}$ оператору тәсвириндә јазаг. Фәрз едәк ки, $\check{F}$ оператору дискрет спектрә маликдир вә $\{\Psi_k(x)\}$ чохлуғу онун мәхсуси функсијалар спектридир. Бу чохлуг там систем тәшкил етдијиндән

$$\Psi(x,t) = \sum_k C_k(t)\Psi_k(x,t) \qquad (24.2)$$

јазмаг олар. Билдијимиз кими (§20-јә бах) $C_к$ –L-операторунун $\breve{F}$ -тәсвириндәки далға функсијасыдыр.

Ψ-нин (24.2) ифадәсини (24.1)-дә јазаг,

$$\sum C_k \breve{L}(x)\Psi_k(x,t) = L\cdot\sum C_k\Psi_k(x,t)$$

алынар. Ахырынҹы бәрабәрлији сол тәрәфдән $\Psi^*_{k'}(x,t)$-јә вуруб, бүтүн фәза үзрә интеграллајаг. Онда $\int\Psi^*_{k'}(x)\Psi_k(x)(dx)=\delta_{k'k}$ вә $L_{k'k}=\int\Psi^*_{k'}\breve{L}(x)\,\Psi_k(x)(dx)$ олдуғуну нәзәрә алсаг, (24.1) тәнлији

$$\sum_k L_{k'k}C_k = LC_{k'}$$

вә ја

$$\sum_k (L_{k'k} - L\delta_{k'k})C_k = 0 \qquad (24.3)$$

шәклинә дүшәр. Бурада $|L_{k'k}|$ матрисасы F тәсвириндә верилмиш $\breve{L}$ операторудур.

(24.3) тәнлији $C_к$ дәјишәнләринә көрә бирҹинс хәтти ҹәбри тәнликләр системидир ($к'$-ә 1,2,3 вә и.а. гијмәтләри вермәклә бу системи асанлығла ашкар шәкилдә јазмаг олар). Бу системин сыфырдан фәргли һәллә малик олмасы үчүн $C_к$ -ларын әмсалларындан дүзәлмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр:

$$\|L_{k'k} - L\delta_{k'k}\| = \begin{vmatrix} L_{11}-L_1\ L_{12}\ L_{13}\dots \\ L_{21}\ L_{22}-L\ L_{23}\dots \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ L_{i1}\ L_{i2}\dots\dots L_{ii}-L\dots \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \end{vmatrix} = 0 \qquad (24.4)$$

(24.4) тәнлији L-дәјишәнинә көрә сонсуз тәртибли тәнликдир. Ону һәлл етсәк, L үчүн сонсуз сајда

$$L_1, L_2, ..., L_j,...$$

көкләр аларыг. $\{L_j\}$ чохлуғу L -физики кәмијјәтинин мәхсуси гијмәтләри, јә'ни онун спектри олур. Асанлығла исбат етмәк олар ки, L оператору ермит олдугда белә тәнлијин көкләри һәгиги олур. Лакин он-

ларын бә'зиләри бир-биринин үзәринә дүшә биләр. Белә һалда системин һалы чырлашмыш олур.

Бу көкләрдән һәр һансы бирини, мәсәлән $L=L_j$-ны (24.3)-дә јазандан сонра алынмыш

$$\sum_k L_{jk}C_k = L_jC_j \qquad (24.5)$$

системини $C_к$ дәјишәнләринә көрә һәлл етсәк, L_j мәхсуси гијмәтинә ујғун $C_1=C_1(L_j)$, $C_2=C_2(L_j)$,... мәхсуси функсијалар чохлуғуну аларыг. Бу чохлуг бир сүтунлу матриса кими јазылыр:

$$C_{kj} = \begin{vmatrix} C_1(L_j) \\ C_2(L_j) \\ \dots\dots\dots \\ C_i(L_j) \\ \dots\dots\dots \end{vmatrix} \qquad (24.6)$$

Билдијимиз кими C_{kj} функсијасыны истәнилән башга тәсвирдә дә јазмаг олар. Мәсәлән, бахылан тәсвирдән координат тәсвиринә кечид (24.2)-јә әсасән,

$$\Psi_j(x,t)=\sum_k C_{kj}\Psi_k(x,t) \qquad (24.7)$$

чеврилмәси илә әлдә едилир. $\Psi_j(x,t)$ -координат тәсвириндә $L=L_j$ һалына ујғун функсијадыр.

(24.5)-дән көрүнүр ки, (24.4) тәнлијинин көкләри диагонал матриса тәшкил едир. Доғрудан да, (24.5) тәнлијинин ејнилик кими өдәнилмәси үчүн

$$L_{jk} = L_j\delta_{jk} \text{ вә ја } |L_{jk}| = \begin{vmatrix} L_1\ 0\ 0\dots\dots\dots \\ 0\ L_2\ 0\dots\dots\dots \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ 0\ 0\ \dots L_i\ 0\ \dots \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \end{vmatrix},$$

јә'ни $|L_{jk}|$ диагонал матриса олмалыдыр. Демәли, матриса шәклиндә верилмиш операторун мәхсуси гијмәтләрини тапмаг үчүн ону диагонал матриса шәклинә салмаг, јә'ни диагоналлашдырмаг лазымдыр. Јәгин ки, бу әмәлијјаты унитар чеврилмә васитәси илә апармаг олар. Операторун мәхсуси гијмәтләр спектри унитар чеврилмәјә көрә инвариант олдуғундан (§23 бах), елә унитар чеврилмә сечмәк олар ки, ихтијари тәсвирдә верилмиш матриса јени тәсвирдә диагонал олсун. Белә унитар чеврилмәни биз 23-чү §-да тапмышдыг, она көрә дә биз бу мәсәлә үзәриндә дајанмајачағы.

Бир мүһүм теорем исбат едәк. Ихтијари тәсвирдә верилмиш ики $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторлары коммутасија едирсә ($\breve{L}\breve{F} - \breve{F}\breve{L} = 0$), онлара ујғун матрисалары ејни бир каноник (унитар) чеврилмә васитәси илә диагонал шәклә салмаг олар.

Фәрз едәк ки, $|L|$ матриса унитар чеврилмәдән сонра $|L'|$ диагонал матрисаја кәтирилмишдир:

$$|L'| = S^+ L S = \begin{vmatrix} L_1 & 0 & 0 \ldots \\ 0 & L_2 & 0 \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots L_i \; 0 \end{vmatrix}$$

F матрисасы үзәриндә дә һәмин әмәлијјаты апараг:

$$|F'| = S^+ F S .$$

F' диагонал олдуғуну әввәлчәдән сөјләмәк мүмкүн дејилдир. Лакин операторлар чәбри унитар чеврилмәјә көрә инвариант олдуғундан (§23 бах) $\breve{L}'\breve{F}' - \breve{F}'\breve{L}' = 0$ олмалыдыр.

Бурада L' матрисасынын $L'_{ik} = L_i \delta_{ik}$ диагоналлыг шәртини нәзәрә алсаг,

$$(L'F' - F'L')_{ik} = \sum_j (L'_{ij} F'_{jk} - F'_{ij} L'_{jk}) = (L_i - L_k) F'_{ik} = 0$$

олур. $i \neq k$ олдугда $L_i \neq L_k$ олдуғундан $F'_{ik} = 0$, $i = k$ олдугда исә $F'_{ii} \neq 0$ олмалыдыр, јә'ни $|F'|$ матрисасы да диагонал матрисадыр.

L_k мәхсуси гијмәтләр ичәрисиндә бир нечәси бир-биринин үзәринә дүшә биләр. Онда L-ин бу гијмәтинә бир нечә далға функсијасы ујғун кәлир. Белә груп далға функсијалары үчүн гејри-диагонал F'_{ik} матриса елементләри үмумијјәтлә сыфра бәрабәр олмур. Анчаг белә груп далға функсијаларынын хәтти комбинасијасы L-ин һәмин гијмәтинә ујғун мәхсуси функсија олдуғундан, бу комбинасијаны елә сечмәк олар ки, гејри-диагонал F'_{ik} матриса елементләри сыфра бәрабәр олсун. Беләликлә, бу һалда да $|F'|$ матрисасы диагоналлашдырыла билир.

Јухарыда дејиләнләр операторун кәсилмәз спектрә малик олдуғу һала, башга сөзлә, операторун кәсилмәз матрисаларла ифадә олунан тәсвирләр һалына да үмумиләшдирилә биләр. Бу һалда $\breve{F}$ операторун мәхсуси функсијалары $\Psi_F(x,t)$ кими ишарә олундуғундан (24.2) ифадәси

$$\Psi(x,t) = \int C(F)\Psi_F(x,t)dF , \qquad (24.2')$$

(24.3) тәнлији исә

$$\int L_{FF'} C(F)(dF) = LC(F') \qquad (24.3')$$

кими интеграл тәнлик шәклиндә јазылар, бурада $L_{FF'} = \int \Psi^*_{F'} \breve{L} \Psi_F (dx)$ - дир. Беләликлә, $\breve{L}$ операторунун мәхсуси гијмәтләринин вә мәхсуси функсијаларынын тапылмасы мәсәләси (24.1) диференсиал тәнлијинә еквивалент олан (24.3′) – интеграл тәнлијинин һәллинә кәтирилир.

Нәһајәт физики кәмијјәтин орта гијмәтинин һесабланмасы үзәриндә дајанаг. Координат тәсвириндә $\bar{L}$ -ин орта гијмәти

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

кими тә'јин олунур. Бурада $\Psi^x(x,t)$ вә $\Psi(x,t)$ функсијаларыны онларын (24.2) ифадәләри илә әвәз етсәк, F-тәсвириндә L-ин орта гијмәти

$$\bar{L} = \sum_{k'k} C^x_{k'} L_{k'k} C_k$$

ифадәси илә һесабланар.

§ 25. ШРЕДИНКЕР, ҺЕЈЗЕНБЕРГ ВӘ ГАРШЫЛЫГЛЫ ТӘ'СИР (ДИРАК) ТӘСВИРЛӘРИ

Һал векторуну вә операторлары бир тәсвирдән дикәр тәсвирә кечирмәк үчүн §24-дә истифадә олунан унитар (каноник) чеврилмәләр һал векторунун вә операторларын шәклини дәјишсә дә системин һалынын дәјишмәсинә сәбәб олмур. Бу чеврилмәләр системин бахылан андакы ејни бир һалыны мүхтәлиф тәсвирләрдә ифадә едир. Системин һалынын замана көрә дәјишмәси исә Шрединкер тәнлији илә верилир. Һәр һансы t=0 анында системин $\Psi(x,0)$ һал вектору мә'лум олдугда, Шрединкер тәнлијини һәлл едәрәк системи истәнилән t анында тәсвир едән $\Psi(x,t)$ һал векторуну тапмаг олур.

Системин һалынын замана көрә дәјишмәсини унитар чеврилмә васитәси илә дә тәсвир етмәк олар. Бу, бир нечә јолла едилир. Онларын үзәриндә дајанаг.

а) **Шрединкер тәсвири**. Шрединкер тәсвири елә тәсвирә дејилир ки, системин һалынын замана көрә дәјишмәси һал векторунун замана көрә дәјишмәси илә тә'јин олунур, физики кәмијјәтләрә ујғун операторлар исә ашкар шәкилдә замандан асылы олмур.

Далға функсијасы Һилберт фәзасында верилмиш вектор олдуғундан, бу тәсвир, Һилберт фәзасында тәрпәнмәз галан базис векторларына көрә һал векторунун дөнмәси (фырланмасы) кими тәсәввүр олунур.

Бу тәсвирдә һал векторунун замандан асылылығы, јухарыда гејд етдијимиз кими, Шрединкер тәнлији илә тә'јин олунур. $\Psi(x,t)$-нин замандан бу асылылығыны унитар чеврилмә илә верәк.

Һал векторуну башлангыч $t=t_o$ анында верилмиш $\Psi(x,t_o)$ гијмәтиндән һәр һансы t анындакы $\Psi(x,t)$ гијмәтинә кечирән унитар чеврилмәни $S(t,t_o)$ илә ишарә етсәк, бу кечиди

$$\Psi(x,t)=S(t,t_o)\Psi(x,t_o) \qquad (25.1)$$

кими јазмаг олар. Бурадан көрүнүр ки, (25.1) бәрабәрлијинин t_o анында өдәнилмәси үчүн

$$S(t_o,t_o)=1 \qquad (25.2)$$

олмалыдыр.

Далға функсијалары (һал векторлары) һәмишә (t-нин истәнилән гијмәтиндә) нормаланма шәртини өдәдији үчүн $S(t,t_o)$ оператору унитар олмалыдыр.

Доғрудан да (25.1)-дән

$$\int \Psi^{x}(x,t)\Psi(x,t)(dx)=\int (S^{*}\Psi^{*}(x,t_o))^{*}\,S\Psi(x,t_o)(dx)=$$
$$=\int \Psi^{+}(x,t_o)S^{+}S\Psi(x,t_o)(dx)=\int \Psi^{*}(x,t_o)\Psi(x,t_o)(dx)=1$$

бәрабәрлији

$$S^{+}(t,t_o)S(t,t_o)=1 \qquad (25.3)$$

унитар шәрти дахилиндә өдәнилир.

$S(t,t_o)$ унитар операторун ашкар шәклини тапаг. Ψ-нин (25.1) ифадәсини Шрединкер тәнлијиндә јазсаг,

$$i\hbar\frac{\partial S}{\partial t}\Psi(x,t_o)=\breve{H}S(t,t_o)\Psi(x,t_o)$$

јахуд

$$(i\hbar\frac{\partial S}{\partial t}-HS)\Psi(x,t_o)=0$$

алынар. Бу тәнлијә ујғун оператор тәнлик

$$i\hbar\frac{\partial S}{\partial t}=\breve{H}\breve{S} \qquad (25.4)$$

олар. $\breve{H}$ ашкар шәкилдә замандан асылы дејилсә, (25.4) тәнлијинин һәлли, формал олараг, (25.2)-јә көрә

$$S(t,t_o)=S(t_o,t_o)e^{-\frac{i}{\hbar}\breve{H}(t-t_o)}=e^{-\frac{i}{\hbar}\breve{H}(t-t_o)} \qquad (25.5)$$

шәклиндә јазыла биләр.

Беләликлә, системин һалынын замана көрә дәјишмәси (25.1) вә (25.5)-дән

$$\Psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}\Psi(x,t_o) \qquad (25.6)$$

функсијасы илә тә'јин олунар. Бурада $e^{-\frac{i}{\hbar}\breve{H}(t-t_o)}$ операторунун $\Psi(x,t_o)$ тә'сири, она ујғун сонсуз сыранын $\Psi(x,t_o)$ тә'сири кими тә'јин олунур.

Шрединкер тәсвириндә операторлар ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан $\frac{\partial\breve{L}}{\partial t}=0$ вә (10.4′) һәрәкәт тәнлији

$$\breve{\dot{L}}=\frac{d\breve{L}}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{L}\right] \qquad (25.7)$$

шәклиндә јазылыр.

Гејд едәк ки, бурада "тәсвир" сөзүнү, она §24-дә верилән мә'надан даһа кениш мә'нада баша дүшмәк лазымдыр. Бурада тәсвир дедикдә һалын замана көрә дәјишмәсинин тәсвир үсулу (гајдасы) баша дүшүлүр. Јухарыда исә системин ејни бир һалынын мүхтәлиф јолларла тәсвир олунмасы нәзәрдә тутулурду. Она көрә дә унитар чеврилмәләр васитәси илә бири дикәриндән алынан координат, импулс, енержи вә и.а. тәсвирләри әслиндә Шрединкер вә ја Һејзенберг координат тәсвири, Шрединкер вә ја Һејзенберг импулс тәсвири вә и.а. кими баша дүшмәк лазымдыр.

Мисал үчүн (25.7) тәнлијини Шрединкер енержи тәсвириндә, јә'ни $\breve{H}$ матрисанын диагонал олдуғу тәсвирдә јазаг:

$$(\dot{L})_{mn}=\frac{i}{\hbar}\left[HL\right]_{mn}=\frac{i}{\hbar}\sum_k(H_{mk}L_{kn}-L_{mk}H_{kn}).$$

$H_{mn}=E_n\delta_{mn}$ диагоналлыг шәртини нәзәрә алсаг,

$$(\dot{L})_{mn}=\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)L_{mn}=i\omega_{mn}L_{mn} \tag{25.8}$$

аларыг, бурада

$$\omega_{mn}=\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n).$$

(25.8) тәнлијиндә $(\dot{L})_{mn}$ вә L_{mn} матрисаларын һеч бири ашкар шәкилдә замандан асылы дејилдир.

б) **Һејзенберг тәсвири**. Бу тәсвирдә системин һалынын замана көрә дәјишмәси һал векторундан операторлара кечирилир. Һал векторунун өзү исә замандан асылы олмур. Бу тәсвир Һилберт фәзасында тәрпәнмәз галан һал векторуна нәзәрән базис векторларынын дөнмәси кими тәсәввүр олунур.

Һејзенберг тәсвириндә һал векторуну $\varphi(x)$, Шрединкер тәсвириндә исә $\Psi(x,t)$ кими ишарә етсәк, (25.6) унитар чеврилмәјә Һејзенберг тәсвириндән Шрединкер тәсвиринә кечид кими бахмаг олар

$$\Psi(x,t)=S\Psi(x,t_o)=S\varphi(x)=e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}\varphi(x). \tag{25.6'}$$

Әксинә, Шрединкер тәсвириндән Һејзенберг тәсвиринә кечиди алмаг үчүн (25.6')-и S^{+}-ја вуруб, S үчүн (25.3) унитарлыг шәртини нәзәрә алмаг лазымдыр. Онда

$$\varphi(x)=S^{-1}\Psi(x,t)=e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}\Psi(x,t) \tag{25.9}$$

алынар.

Һал векторлары бир тәсвирдән дикәринә кечирсә, операторлар да көһнә тәсвирдән јени тәсвирә кечирилмәлидир. Физики кәмијјәтләрин орта гијмәтинин мүхтәлиф тәсвирләрдә инвариант галмасы шәртиндән вә ја §23-дә верилмиш үмуми гајдаја әсасән, ихтијари $\breve{L}$ оператору үчүн бу кечид

$$\breve{L}^{h}(t)=S^{+}\breve{L}^{ш}S=e^{\frac{i}{\hbar}\breve{H}(t-t_o)}\breve{L}^{ш}e^{-\frac{i}{\hbar}\breve{H}(t-t_o)} \tag{25.10}$$

шәклиндә олар, бурада «h» вә «ш» ишарәләри операторун ујғун олараг Һејзенберг вә Шрединкер тәсвириндә верилдијини көстәрир. Шрединкер тәсвириндә оператор замандан асылы дејилсә, Һејзенберг тәсвириндә о, замандан асылы олур вә бу асылылыг (25.10) гануну илә верилир. $t=t_o$ олдугда $S(t_o,t_o)=S^{-1}(t_o,t_o)=1$ олдуғундан башланғыч анда һал векторлары вә операторлар һәр ики тәсвирдә бир-биринин үзәринә дүшүр.

(25.10)-дан чыхыр ки, системин Һамилтон оператору да һәр ики тәсвирдә ејнидир. Доғрудан да, (25.10)-да $\breve{L}=\breve{H}$ көтүрсәк, $\breve{H}$ илә $e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}$ операторлары һәмишә коммутасија етдијиндән $\breve{H}^{h}=\breve{H}^{ш}$ олур.

Һејзенберг тәсвириндә һәрәкәт тәнлијини алмаг үчүн (25.10)-дан t-јә көрә төрәмә көтүрәк: $\frac{\partial\breve{L}^{ш}}{\partial t}=0$ олдуғундан

$$\frac{\partial\breve{L}^{h}}{\partial t}=\frac{\partial S^{+}}{\partial t}\breve{L}^{ш}S+S^{+}\breve{L}^{ш}\frac{\partial S}{\partial t}$$

олар. (25.5)-дән алынан $\frac{\partial S^{+}}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}\breve{H}S^{+}$ вә $\frac{\partial S}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\breve{H}S$ ифадәләри вә (25.10)-ну нәзәрә алсаг,

$$\frac{\partial\breve{L}^{h}}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}(\breve{H}\breve{L}^{h}-\breve{L}^{h}\breve{H})=\frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{L}\right] \tag{25.11}$$

һәрәкәт тәнлијини алырыг. (25.11) тәнлијинин сол тәрәфиндә операторун билаваситә замана көрә төрәмәси дурур. Она көрә дә $\frac{\partial\breve{L}}{\partial t}$ төрәмәси бурада L физики кәмијјәтинә ујғун $\breve{L}$ операторунун билаваситә замана көрә төрәмәсини ифадә едир. Һалбуки, Шрединкер тәсвириндә буна ујғун (25.7) тәнлији, мүхтәлиф физики кәмијјәтләрә ујғун операторлар арасындакы әлагәни ифадә едир.

(25.10) вә (25.11) ифадәләриндән чыхыр ки, Һамилтон оператору илә коммутасија едән операторлар замана көрә дәјишмир вә онларын Һејзенберг тәсвириндәки ифадәси Шрединкер тәсвириндәки ифадәси үзәринә дүшүр. Јәгин ки, онлар һәрәкәт интегралларына ујғун операторлар олар.

в) **Гаршылыглы тә'сир тәсвири**. Бу тәсвири квант механикасына илк дәфә Дирак дахил етмишдир. Харичи саһәләрлә вә ја башга системләрлә гаршылыглы тә'сирдә олан квант механики системин $\breve{H}$ Һамилтон операторуну сәрбәст (гаршылыглы тә'сирдә олмајан) системләрин $\breve{H}_o$ Һамилтон оператору илә $\breve{V}$ гаршылыглы тә'сир операторунун

$$\breve{H} = \breve{H}_o + \breve{V} \tag{25.12}$$

чәми шәклиндә јазмаг мүмкүн олдуғу һалларда, системин һалынын замана көрә дәјишмәсини гаршылыглы тә'сир тәсвириндә вермәк даһа әлверишли олур.

Бу заман Шрединкер тәсвириндә верилмиш $\Psi(x,t)$ һал векторундан гаршылыглы тә'сир тәсвириндә верилмиш $\Phi(x,t)$ һал векторуна кечид

$$\Phi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}\Psi(x,t) \tag{25.13}$$

каноник чеврилмәси илә јеринә јетирилир.

Јухарыдакылара ујғун олараг оператор үчүн каноник кечид

$$\breve{L}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\breve{H}_o(t-t_o)}\breve{L}^ш e^{-\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)} \tag{25.14}$$

шәклиндә јазылыр.

(25.13) вә (25.14)-дән көрүнүр ки, $t=t_o$ башланғыч анда бу тәсвирләрдә һал векторлары вә операторлар бир-биринә бәрабәр олур: $\Phi(x,t_o) = \Psi(x,t_o)$, $\breve{L}(t_o) = \breve{L}^ш$. Ејнилә бунун кими (25.14)-дән $\breve{H}_o = H_o^ш$ алыныр.

(25.9) вә (25.10) дүстурларындан фәргли олараг (25.13) вә (25.14) чеврилмәләринә системин там Һамилтон оператору јох, сәрбәст системин $\breve{H}_o$ һамилтон оператору дахил олур.

Бу тәсвирдә систем замандан асылы $\Phi(t)$ һал вектору илә характеризә олунур вә физики кәмијјәтләрә замандан асылы $\breve{L}(t)$ операторлары гаршы гојулур. Башга сөзлә, гаршылыглы тә'сир тәсвири, Һилберт фәзасында һал векторунун вә базис векторларынын дөнмәси кими тәсәввүр олунур. Гаршылыглы тә'сир тәсвири мүәјјән мә'нада Шрединкер вә Һејзенберг тәсвирләри арасында јерләшән аралыг тәсвирдир. Шрединкер вә Һејзенберг тәсвирләри онун ики хүсуси һалы кими алыныр.

Инди дә $\Phi(t)$ һал векторунун вә $\breve{L}(t)$ операторунун замана көрә дәјишмә ганунларыны тапаг. (25.13)-дән

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = -\hbar\breve{H}_o e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}\Psi(x,t) + e^{\frac{i}{\hbar}\breve{H}_o(t-t_o)} i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

бурада $i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = \breve{H}\Psi = (H_o + V)\Psi$ олдуғуну вә (25.14) нәзәрә алсаг;

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}V^ш e^{-\frac{i}{\hbar}\breve{H}_o(t-t_o)}\Phi(t)$$

вә ја

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = V(t)\Phi(t) \tag{25.15}$$

алынар. Бурада $V(t)$ (25.14)-ә ујғун олараг

$$V(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}\breve{V}^ш e^{-\frac{i}{\hbar}\breve{H}_o(t-t_o)} \tag{25.16}$$

гаршылыглы тә'сир тәсвириндә верилмиш гаршылыглы тә'сир операторудур.

Беләликлә, $\Phi(t)$ һал вектору Шрединкер тәнлијини өдәјир. Лакин тәнлијә $\breve{H}$ там Һамилтон оператору јох, јалныз гаршылыглы тә'сир оператору $\breve{V}(t)$ дахил олур.

Инди дә һәрәкәт тәнлијини тапаг. Бунун үчүн $\dfrac{\partial\breve{L}^ш}{\partial t} = 0$ шәрти дахилиндә (25.14) ифадәсиндән замана көрә төрәмә алаг:

$$\frac{\partial\breve{L}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}H_o e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}\breve{L}^ш S - \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\breve{H}_o(t-t_o)}\breve{L}^ш\breve{H}_o e^{-\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)} =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(\breve{H}_o SL^ш S^+ - SL^ш S^+\breve{H}_o) \quad \text{вә ја} \quad \frac{\partial\breve{L}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}_o\breve{L}\right] \tag{25.17}$$

олур. Бурадан көрүнүр ки, гаршылыглы тә'сир тәсвириндә операторун замана көрә дәјишмәси Һејзенберг тәсвириндә олдуғу кимидир. Лакин бурада тәнлијә там Һамилтон оператору әвәзиндә гаршылыглы тә'сирдә олмајан системин $\breve{H}_o$ оператору дахил олур. Беләликлә, гаршылыглы тә'сир тәсвириндә һал векторунун вә операторун замана көрә дәјишмә ганунларынын биринә там Һамилтон операторунун бир һиссәси, дикәринә исә икинчи һиссәси дахил олур.

Биз јухарыда Шрединкер тәсвириндән гаршылыглы тә'сир тәсвиринә кечидин үзәриндә дајандыг. Инди дә Һејзенберг тәсвириндән билаваситә гаршылыглы тә'сир тәсвиринә кечәк. (25.13)-дә $\Psi(x,t)$-ни онун (25.6) вә ја (25.6′) ифадәси илә әвәз етсәк,

$$\Phi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}\Psi(x,t_o) = e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}e^{-\frac{i}{\hbar}\breve{H}(t-t_o)}\varphi(x)$$

аларыг, бу кечиди

$$\Phi(t) = S(t,t_o)\varphi(x,t_o) \tag{25.18}$$

кими јазмыш олсаг, Һејзенберг–гаршылыглы тә'сир тәсвирләри арасындакы кечиди тә'мин едән унитар оператор

$$S(t,t_o)=e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}, \qquad S(t_o,t_o)=1 \qquad (25.19)$$

олур. (25.18)-дә $\varphi(x)$ замана көрә сабит галдығындан квант-механики системин һалынын замана көрә дәјишмәси (25.19) оператору илә там тә'јин олунур.

(25.18) ифадәсиндә $t=t_o$ көтүрсәк, гаршылыглы тә'сирдә верилмиш $\Phi(t)$ һал вектору, Һејзенберг тәсвириндәки $\Psi(0)$ һал вектору үзәринә дүшүр. Белә исә (25.18) каноник чеврилмә јалныз гаршылыглы тә'сир тәсвириндә јазыла биләр:

$$\Phi(t)=S(t,t_o)\Phi(t_o)\,. \qquad (25.18')$$

Бу бәрабәрлијә гаршылыглы тә'сир тәсвириндә t_o анында верилмиш $\Phi(t_o)$ һал векторуну һәмин тәсвирдә t анындакы $\Phi(t)$ векторуна кечирән каноник чеврилмә кими бахмаг олар.

(25.19) ифадәсиндән $S(t,t_o)$ замана көрә дәјишмә ганунуну тапаг:

$$i\hbar\frac{\partial S}{\partial t}=-H_oS+e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}(\breve{H}_o+\breve{V}^{ш})e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}\,.$$

$\breve{H}_o$ илә $e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}$ операторлары коммутасија етдијиндән

$$i\hbar\frac{\partial S}{\partial t}=e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}V^{ш}e^{-\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}e^{\frac{i}{\hbar}H_o(t-t_o)}e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_o)}$$

вә ја (25.16)-ја әсасән

$$i\hbar\frac{\partial S}{\partial t}=VS \qquad (25.20)$$

алыныр. Демәли, $S(t,t_o)$ унитар оператору илә $\Phi(t)$ һал векторунун өдәдији тәнликләр (бах: 25.15), јә'ни онларын замана көрә дәјишмә ганунлары ејни олур. Бу, (25.18)-дән дә билаваситә көрүнүр, $\varphi(x,t_o)$ замана көрә сабит галдығындан $\Phi(t)$ вә $S(t,t_o)$ кәмијјәтләри t-јә көрә ејни ганунла дәјишмәлидир.

Квант механики системин һалынын замана көрә дәјишмәсинин $(t,t_o)\to(-\infty,+\infty)$ интервалында баш вердијини фәрз етсәк, (25.18′) бәрабәрлији

$$\Phi(\infty)=S(\infty,-\infty)\Phi(-\infty) \qquad (25.21)$$

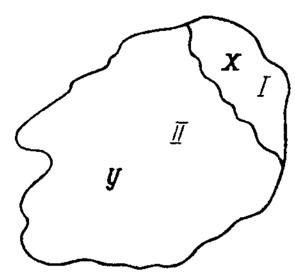
шәклиндә јазылар. Бурада $S(\infty,-\infty)$ оператору системин $t=-\infty$ верилмиш һалыны $t=+\infty$-дакы һалына кечирир. Белә оператор квант електродинамикада S матриси адланыр.

§ 26. СЫХЛЫГ МАТРИСАСЫ. СИСТЕМИН ҺАЛЫНЫН СЫХЛЫГ МАТРИСАСЫ ИЛӘ ТӘСВИРИ

Биз индијә гәдәр квант механики системи $\Psi(x,t)$ далға функсијасы илә тәсвир едирдик. Фәрз едирдик ки, систем һәр бахылан анда мүәјјән һалдадыр вә онун һәрәкәти там вә дәгиг верилир. Јухарыда көрдүјүмүз кими, белә тәсвирдән о заман истифадә етмәк олар ки, $\Psi(x,t)$ һәр һансы операторун мәхсуси функсијасы олсун, јә'ни систем мүәјјән далға функсијасына малик олсун. Бу һалда систем там тәсвир олунур, јә'ни онун ихтијари һалыны тә'јин едән вә ејни заманда өлчүлә билән физики кәмијјәтләрин һамысы һесаблана билир.

Системин елә һалларына да тәсадүф олунур ки, онлара мүәјјән далға функсијасы гаршы гојмаг вә бахылан анда системин һәр һансы мүәјјән һалда олдуғуна һөкм вермәк мүмкүн дејилдир. Даһа ајдын десәк, ола билсин ки, бахылан анда системин һансы һалда олдуғу мә'лум олмасын, јалныз онун ала биләчәк һаллар ардычыллығынын һәр бириндә ајрылыгда олма еһтималы верилсин. Бу заман систем там тәсвир олуна билмир, чүнки һалын тә'јин едилмәси үчүн ејни заманда өлчүлә билән асылы олмајан физики кәмијјәтләрин сајы, там тәсвирдәки максимал сајдан аз олур. Системин белә һаллары, ашағыда көрәчәјимиз кими, **сыхлыг матрисасы** адланан матриса илә тәсвир олунур. Квант механикасында системин далға функсијасы илә тәсвир олунан һалларына **тәмиз һаллар**, сыхлыг матрисасы илә тәсвир олунан һалларына исә **гарышыг һаллар** дејилир.

Мүәјјән һалда олан гапалы систем көтүрәк вә онун һәр һансы кичик һиссәсинә тәдгиг олунан систем кими бахаг (шәкил 5). Адәтән I һиссәнин (тәдгиг олунан системин) өлчүләри II һиссәнин өлчүләринә нисбәтән олдугча кичик көтүрүлүр. Онда I һиссәнин һалынын истәнилән дәјишмәләри II һиссәнин температурунун дәјишмәсинә сәбәб олмур (статистик физикада белә системләрә термостатда олан системләр дејилир).



Шәкил 5

I һиссәнин координатлар чохлуғуну X, II һиссәнин координатлар чохлуғуну $У$ илә ишарә етсәк, гапалы системин далға функсијасыны $\Psi(X,У,t)$ кими јаза биләрик. Гапалы системин һиссәләри һәмишә гаршылыглы тә'сирдә олдуғундан, јә'ни истилик енержиси мүбадиләсиндә вә ја бири дикәри үзәриндә иш көрә билдијиндән $\Psi(X,У,t)$ функсијасыны јалныз X-дән вә јалныз $У$-дән асылы ики функсијанын һасили шәклиндә көстәрмәк мүмкүн дејилдир. Она көрә дә тәдгиг олунан систем далға функсијаја малик олмур. Јухарыда гејд етдик ки, белә һалларда систем сыхлыг матрисасы (оператору) илә тәсвир олунур. Буну көстәрәк.

Фәрз едәк ки, L тәдгиг олунан системә мәхсус һәр һансы физики кәмијјәтдир. Она ујғун $\hat{L}$ оператору јалныз X координатларына тә'сир едәр. Гапалы системин бахылан һалында L-ин орта гијмәтини һесабламаг истәсәк, јәгин ки,

$$\overline{L} = \int \Psi^x(X,Y,t)\hat{L}(X)\Psi(X,Y,t)(dX)(dY) \qquad (26.1)$$

олар.

§21-дә көстәрдик ки, координат тәсвириндә верилмиш һәр ихтијари $\hat{L}(x)$ - оператору өз тәсвириндә

$$L_{x'x} = L(x')\delta(x-x') \qquad (26.2)$$

кими тә'јин едилмиш $L_{x'x}$ матрисасы илә әвәз едилә биләр. Онда (26.1) бәрабәрлији

$$\overline{L} = \int \Psi^x(X,Y,t)L_{x'x}\Psi(X',Y,t)(dX')(dX)(dY) \qquad (26.3)$$

шәклиндә јазылар. Буна инанмаг үчүн бурада $L_{x'x}$ -и өз ифадәси илә әвәз едиб, X' үзрә интеграл алмаг кифајәтдир:

$$\rho(X,X',t) = \rho_{xx'} = \int \Psi^x(X,Y,t)\Psi(X',Y,t)(dY) \qquad (26.4)$$

матрисасыны дахил едәк. Онда

$$\overline{L} = \int \rho_{xx'}(t)L_{x'x}(dX)(dX') \qquad (26.5)$$

алынар.

Елементләри (26.4) бәрабәрлији илә тә'јин олунан матрисаја ујғун $\hat{\rho}$ операторуна системин **сыхлыг оператору**, $|\rho_{xx'}|$ матрисанын өзүнә исә **сыхлыг матрисасы** дејилир. Сыхлыг матрисасы физикаја 1926-чы илдә Фон Нејман вә Ландау тәрәфиндән дахил едилмишдир. Сыхлыг матрисанын (26.4) тә'јининдән көрүнүр ки, о, квант механикасында истифадә олунан операторлар синфинә дахилдир; $\rho(X,X')$ матрисасы ермит матрисадыр:

$$\rho(X,X',t) = \rho^+(X',X,t) \qquad (26.6)$$

Онун диагонал елементләри

$$\rho(X,X,t) = \rho_{xx}(t) = \int \Psi^x(X,Y,t)\Psi(X,Y,t)(dY) \qquad (26.7)$$

бахылан системин координатларынын пајланма функсијасыны (еһтимал сыхлығыны) тә'јин едир. Доғрудан да, (26.7) ифадәси, II системин истәнилән һалында I системин координатларынын $\{X\}$ чохлуғу илә тә'јин олундуғуну көстәрән еһтимал сыхлығыдыр.

$\rho_{xx'}$ вә $L_{xx'}$ матрисаларында индексләрин (x вә x') кәсилмәз дәјишдијини нәзәрә алсаг, (26.5) ифадәсини

$$\overline{L} = \int \rho_{xx'}L_{x'x}(dX)(dX') = \int (\rho L)_{xx}(dX) = \mathrm{Sp}(\rho L) \qquad (26.7')$$

кими јазмаг олар, јә'ни физики кәмијјәтин $\overline{L}$ орта гијмәти $|\rho L|$ матрисасынын диагонал елементләринин чәминә бәрабәр олур.

Бурадан чыхыр ки, системин сыхлыг матрисасы мә'лум оларса, онун истәнилән физики кәмијјәтинин орта гијмәтини һесабламаг олар. Ашағыда көрәчәјик ки, $\rho(X,X')$ матрисасы мә'лум оланда системин мүхтәлиф һалларынын еһтималыны да тапмаг мүмкүн олур. Сыхлыг матрисасы, тә'јининдән көрүндүјү кими, гапалы системин II һиссәсинин (термостатын) координатларындан асылы дејилдир, лакин, о, гапалы системин бүтөвлүкдә һалындан асылыдыр. Статистикадан мә'лум олдуғу кими, бу асылылыг термостатын $\theta = kT$ (k — Болсман сабити, T — системин мүтләг температуру) температурунун сыхлыг матрисасына дахил олмасы илә тә'јин олунур ((26.26) бах).

I вә II системләр арасындакы гаршылыглы тә'сирин нәзәрә алынмајачаг дәрәчәдә зәиф олдуғуну фәрз етсәк, $\Psi(X,Y,t)$ функсијасыны јалныз X-дән вә јалныз $У$-дән асылы олан $\Psi(X,t)$ вә $\varphi(У)$ функсијаларынын һасили шәклиндә јазмаг олар:

$$\Psi(X,Y,t) = \Psi(X,t)\varphi(У). \qquad (26.8)$$

$\varphi(У)$ функсијалары үчүн нормаланма шәртинин өдәдијини гәбул етсәк, сыхлыг матрисасы

$$\rho(X,X',t) = \Psi^*(X,t)\Psi(X',t) \qquad (26.9)$$

олар. Бурада $\Psi(X,t)$ – I системин далға функсијасыдыр. Демәли, бу фәрзијјә дахилиндә бахылан систем далға функсијасына малик олур вә биз $\rho(X,X')$ - тәсвириндән $\Psi(X,t)$ тәсвиринә кечмиш олуруг. Бурадан көрүнүр ки, системин һалынын сыхлыг матрисасы илә тәсвири даһа үмуми квант механики тәсвирдир. Һалын $\Psi(X,t)$ функсијасы илә тәсвири исә сыхлыг матрисасынын (26.9) шәклиндә верилмиш хүсуси һалына ујғундур.

(26.4), (26.7) вә (26.9) ифадәләринин һамысында сыхлыг матрисасы координат тәсвириндә верилмишдир. Әдәбијјатда даһа чох ишләнән онун һәмин тәсвирдәки башга бир ифадәсини дә кестәрәк. Бунун үчүн $\rho(X,X')$ сыхлыг матрисасыны ихтијари операторун $\Psi_\kappa(X,t)$ функсијаларынын ихтијари комбинасијасы шәклиндә кестәрәк. Сыхлыг матрисасынын (26.4) вә (26.9) ифадәләриндән көрүнүр ки, бу сыра $\Psi_\kappa(X,t)$ функсијалары үзрә көтүрүлмүш ики гат сыра олар:

$$\rho(X,X',t)=\sum_{i,k}a_{ik}\Psi_i^*(X,t)\Psi_k(X',t). \qquad (26.10)$$

Сыхлыг матрисасы ермит олдуғундан, a_{ik} әмсаллары да, јәгин ки, ермитлик шәртини өдәмәлидир:

$$a_{ik}=a^*_{ki}$$

(26.2) вә (26.5) ифадәләриндән көрүнүр ки, физики кәмијјәтин орта гијмәти диагонал сыхлыг матрисасы илә тә'јин олунур. Дикәр тәрәфдән сыхлыг матрисасы (26.9) ифадәси илә верилдикдә, јә'ни систем далға функсијасы илә тәсвир едилдикдә (26.10) ифадәсиндәки a_{ik} әмсаллары, јәгин ки, a_i^* илә a_k әмсалларынын һасилинә бәрабәр олар. $\Psi(X',t)$ вә $\Psi^*(X,t)$ ајрылыгда Ψ_i-ләрин комбинасијасы шәклиндә кестәрилир: $a_{ik}=a_i^*a_k$. Бу заман системин $\Psi_\kappa(X,t)$ – тәмиз һаллардан һеч олмаса бириндә олма еһтималы сыхлығы $\rho(X,X,t)$ – диагонал матриса илә вериләр. Доғрудан да, (26.10)-дан

$$\rho(X,X,t)=\sum_k a_k^*a_k\Psi_k^*(X,t)\Psi_k(X,t)=\sum_k W_\kappa\Psi^*\Psi=W(X,t) \quad (26.11)$$

олур, бурада $W_\kappa=a^*_\kappa a_\kappa$ системин k-һалында олма еһтималы вә ја да k һалынын статистик чәкиси; $\rho(X,X,t)=W(X,t)$ гарышыг һалда системин X-координатларынын пајланма функсијасыдыр. ρ-матрисасынын (26.11) ифадәсини (26.5)-дә јеринә јазыб, $\delta(X-X')$ делта функсијасынын көмәји илә X'-ә көрә интеграл алаг:

$$\bar{L}=\sum_k W_\kappa\int\Psi_k^*(X,t)\breve{L}(X)\Psi_k(X,t)(dX)=\sum_k W_\kappa\,\overline{L^{(k)}} \qquad (26.12)$$

олур, бурада

$$\overline{L^{(k)}}=\int\Psi_k^*(X,t)\breve{L}(X)\Psi_k(X,t)(dX) \qquad (26.13)$$

системин k-тәмиз һалында L физики кәмијјәтин орта гијмәтидир.

(26.11) вә (26.13) ифадәләриндән чыхыр ки, системин гарышыг ($\rho(X,X')$ матрисасы илә тәсвир олунан) һалына статистик чәкиси W_κ олан $\Psi_\kappa(X,t)$ тәмиз һалларынын гарышығы кими бахмаг олар. Гарышыг һалда һәр һансы физики кәмијјәтин орта гијмәти исә, тәмиз һалларын һәр бириндә онун $\overline{L^{(k)}}$ орта гијмәти һесабланандан сонра, ону ујғун һалларын W_κ статистик чәкисинә вуруб, бүтүн тәмиз һаллар үзрә чәм көтүрмәклә тапылыр.

Инди дә сыхлыг матрисасыны башга тәсвирдә јазаг. Јухарыда дедијимиз кими сыхлыг матрисасынын (26.11) ифадәсиндән әдәбијјатда даһа чох истифадә олунур. Буна көрә дә онун јалныз бу ифадәсинин ихтијари башга тәсвирдәки шәклини кестәрмәклә кифајәтләнәчәјик.

Тутаг ки, $\varphi_\alpha(X,t)$ функсијалары ихтијари $\breve{F}$ операторунун мәхсуси функсијаларыдыр. Системин тәмиз һалларыны тә'јин едән бу функсијаларын $\{\varphi_\alpha(X,t)\}$ чохлуғу там систем тәшкил етдијиндән (26.13) ифадәсинә дахил олан $\Psi_\kappa(X,t)$ вә $\Psi_k^*(X,t)$ функсијаларыны онларын

$$\Psi_k(X',t)=\sum_\alpha C_{k\alpha}\varphi_\alpha(X',t);\ \Psi_k^*(X,t)=\sum_\beta C_{k\beta}^*\varphi_\beta^*(X,t) \qquad (26.14)$$

хәтти комбинасијасы шәклиндә кестәрмәк олар. Дедијимизи мисалла изаһ едәк. Тутаг ки, $\Psi_\kappa(X,t)$ функсијалары $\breve{L}=\left[\breve{\vec{r}}\breve{\vec{p}}\right]$ һәрәкәт мигдары моменти операторунун мәхсуси функсијалары, $\breve{F}$ оператору исә онун z оху үзәриндәки пројексијасыны тә'јин едән $\breve{L}_z$ оператору үзәринә дүшүр. Моментин һәр һансы мүәјјән гијмәти илә характеризә олунан һал $L_z=m\hbar$-ын мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун $(2l+1)$ сајда $\Psi_m(X,t)$ мүхтәлиф функсија илә тә'јин олунар. Онда ихтијари $\Psi_\kappa(X,t)$ тәмиз һалы

$$\Psi_k(X,t)=\Psi_{nl}(X,t)=\sum_{m=-l}^{l}C_m\Psi_{nlm}=\sum_{m=-l}^{l}C_m\Psi_m \qquad (26.15)$$

кими хәтти комбинасија илә вериләр (бурада $\Psi_{nlm}-\varphi_\alpha(X,t)$ функсијалары ролуну ојнајыр).

$\Psi_\kappa(X,t)$ -нин бу ахырынчы ифадәсини (26.13)-дә јеринә јазаг,

$$\bar{L}=\sum_{k,\alpha,\beta}W_\kappa C_{k\alpha}^*\int\varphi_\alpha^*(X,t)\breve{L}(X)\varphi_\beta(X,t)(dX)C_{k\beta}=$$

$$=\sum W_\kappa C_{k\alpha}^x L_{\alpha\beta}C_{k\beta} \qquad (26.16)$$

алынар.

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_k W_\kappa \, C^{*}_{\alpha k} C_{k\beta} \tag{26.17}$$

матрисасы дахил етсәк,

$$\bar{L} = \sum_{\alpha,\beta} \rho_{\beta\alpha} L_{\alpha\beta} = \sum_{\beta} (\rho L)_{\beta\beta} = \mathrm{Sp}(\rho L)\,. \tag{26.18}$$

Ахырынҹы ифадә (26.8) бәрабәрлијинә тамамилә еквивалентдир. Лакин (26.8) ифадәси координат тәсвириндә, (26.18) бәрабәрлији исә $\breve{F}$ тәсвириндә јазылмышдыр. Бу ифадәләрин мүгајисәсиндән бир даһа чыхыр ки, матрисанын диагонал елементләринин ҹәми (шпур–spur) бүтүн тәсвирләрдә ејнидир вә сыхлыг матрисасы мә'лум оларса, физики кәмијјәтин гарышыг һалдакы орта гијмәтини һесабламаг олар.

(26.8) вә ја (26.18) мүнасибәтинә сыхлыг матрисасыны тә'јин едән мүнасибәтләр кими бахмаг олар. Системин гарышыг һалында бир сыра физики кәмијјәтләрин орта гијмәтини өлчмәклә сыхлыг матрисасынын елементләрини тапмаг вә ону гурмаг олар.

Матрисанын сәтир вә сүтунларынын сајы, мәсәлән, (26.15) мүнасибәтиндә $\Psi_\kappa(X,t)$ тәмиз һалы тә'јин едән асылы олмајан $\Psi_m(X,t)$ һалларынын сајы илә тә'јин олунур. n сәтирли комплекс квадрат матриса үмумијјәтлә n^2 комплекс елементә маликдир. Лакин онларын һамысы ихтијари (асылы олмајан) дејилдир. Сыхлыг матрисасынын (26.6) ермитлик шәртиндән көрүнүр ки, сыхлыг матрисасы n^2 комплекс кәмијјәтлә јох, n^2 һәгиги параметрлә тә'јин олунур. Анҹаг ваһид матрисанын орта гијмәти

$$\bar{I} = \sum_{\alpha,\beta} \rho_{\alpha\beta}(I)_{\alpha\beta} = \sum \rho_{\alpha\beta}\delta_{\beta\alpha} = \sum_\alpha \rho_{\alpha\alpha}$$

вә ја

$$\mathrm{Sp}\rho = 1 \tag{26.19}$$

олдуғундан n^2 параметрдән јалныз n^2-1 параметри ихтијаридир. Демәли, квант механики системин n тәмиз һалдан тәшкил олунмуш гарышыг һалыны тә'јин етмәк үчүн n^2-1 ихтијари параметри өлчмәк лазымдыр вә бу параметрләр һәмин бу гарышыг һалын сыхлыг матрисасыны тә'јин едир. Мәсәлән, фермионларын ~~вә~~ ја фотонларын полјаризасија һалы $\Psi_{1/2}(s_z)$ вә $\Psi_{-1/2}(s_z)$ кими ики функсија илә характеризә олунур (§82-јә бах), јә'ни $n=2$ олур. Онларын полјариза олунмамыш гарышыг һалы $n^2-1=3$ ихтијари параметр илә тә'јин олунар. Доғрудан да, белә кәмијјәт үч өлчүлү $\vec{P}(P_x, P_y, P_z)$ полјаризасија векторудур.

Системин гарышыг һалынын сыхлыг матрисасы мә'лум оларса, һәмин һалда физики кәмијјәтин мүәјјән L_α гијмәтини өлчә билмәк еһтималыны тапмаг олар. Доғрудан да, (26.11) охшар олараг, (26.17) матрисасы

$$\rho_{\alpha\alpha} = \sum_k W_\kappa \, C^{*}_{k\alpha} C_{k\alpha}$$

диагонал оларса, (26.13) вә (26.16) ифадәләриндән алынан

$$\bar{L} = \sum_\alpha \rho_{\alpha\alpha} L_{\alpha\alpha} = \sum \rho_{\alpha\alpha} L_\alpha = \sum W_\alpha L_\alpha \tag{26.20}$$

бәрабәрлијиндә $\rho_{\alpha\alpha}=W_\alpha - L$ физики кәмијјәтин L_α гијмәтини алма еһтималы олар.

Систем Ψ_i далға функсијасы илә тәсвир олунанда системин тәмиз һаллары үчүн (26.13) вә (26.16) ифадәләриндә јалныз бир һәдд (мәсәлән, $k=i$ һәдди) галыр:

$$\bar{L} = \overline{L^i} = \sum_{\alpha,\beta} C^{*i}_\alpha C^i_\beta L_{\alpha\beta}\,.$$

Бу ифадәни (26.13) шәклиндә јазмаг истәсәк, тәмиз һалларын сыхлыг матрисасы

$$\rho_{\alpha\beta} = C^{*i}_\alpha C^i_\beta \tag{26.21}$$

олар. $\sum_i C^{*i}_k C^i_k = 1$ нормаланма шәрти дахилиндә бу матрисанын квадратыны һесабласаг,

$$(\rho^2)_{\alpha\beta} = (\rho\rho)_{\alpha\beta} = \sum_k \rho_{\alpha k}\rho_{k\beta} = \sum_k C^{*i}_k C^i_k C^{*i}_\alpha C^i_\beta = C^{*(i)}_\alpha C^{i}_\beta = \rho^{(i)}_{\alpha\beta} \tag{26.22}$$

алынар, јә'ни тәмиз һалларын сыхлыг матрисасынын квадраты өзүнә бәрабәрдир. (26.22) шәрти системин һалларынын тәмиз һаллар олмасы үчүн лазыми вә кафи шәртдир.

I систем II системлә термодинамик таразлыгда, јә'ни температуру θ олан термостатда оларса, бахылан системин ихтијари E_κ һалында олма еһтималы W_κ, статистик механикадан мә'лум олдуғу кими

$$W_\kappa = \mathrm{const}\; e^{-\frac{E_k}{\theta}} = Z^{-1} e^{-\frac{E_k}{\theta}} \tag{26.23}$$

Гиббс пајланмасы илә верилир. Бурада

$$\sum_k W_\kappa = 1$$

нормаланма шәртиндән тә'јин олунан

$$Z(\theta,V,N)=\sum_k e^{\frac{E_k}{\theta}}=\sum_k e^{\frac{F(\theta,V,N)}{\theta}} \qquad (26.24)$$

ифадəси статистик чəм адланыр. F–бахылан системин сəрбəст енержи функсијасы, V–һəчми, N–системи тəшкил едəн зəррəчиклəрин (атом, молекул вə и.а.) сајыдыр.

W_k -нын (26.23) ифадəсини (26.11)-дə јеринə јазсаг, термостатда олан системин сыхлыг матрисасы

$$\rho(X,X',t)=Z^{-1}\sum_k \Psi_k^*(X,t)\Psi_k(X',t)e^{\frac{E_k}{\theta}} \qquad (26.25)$$

вə ја оператор шəклиндə (26.24)-ə əсасəн

$$\rho(X,X',t)=Z^{-1}e^{\frac{H}{\theta}}=e^{\frac{F-H}{\theta}} \qquad (26.26)$$

олар. Статистик чəмин ифадəси исə

$$Z=\mathrm{Sp}(e^{\frac{H}{\theta}})=\mathrm{Sp}(\exp(-\frac{\breve{H}}{\theta}))$$

шəклиндə јазылар.

Бахылан һалда статистик чəми һесабламаг мүмкүн оларса, (26.24)-дəн сəрбəст енержи функсијасы

$$F(\theta,V,N)=-\theta\ln Z(\theta,V,N)$$

вə бу ахырынчысы васитəси илə термостатда олан системин бүтүн термодинамик параметрлəри тапылыр.

§ 27. СЫХЛЫГ МАТРИСАСЫНЫН ӨДƏДИЈИ ТƏНЛИК ВƏ ОНУН МҮХТƏЛИФ ТƏСВИРЛƏРИ

Инди дə сыхлыг матрисасынын замана көрə дəјишмə ганунуну тапаг. Бунун үчүн (26.11) ифадəсиндəн замана көрə төрəмə көтүрəк:

$$\frac{\partial\rho(x,x',t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\rho_{xx'}=$$

$$=\sum_k W_\kappa\left\{\frac{\partial\Psi_k^*(x,t)}{\partial t}\Psi_k(x',t)+\Psi_k^x(x,t)\frac{\partial\Psi_k(x',t)}{\partial t}\right\} \qquad (27.1)$$

(26.2) мүнасибəтиндəн истифадə едəрəк, Шрединкер тəнлијини

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_k(x,t)}{\partial t}=\int H_{xx''}\Psi_k(x'',t)(dx'')$$

шəклиндə јазсаг, (27.1) ифадəси

$$i\hbar\frac{\partial\rho_{xx'}(t)}{\partial t}=\sum_k\left\{\int\Psi_k^*(x',t)H_{xx''}\Psi_k(x'',t)(dx'')-\int H_{x'x''}^*\Psi_k^*(x'',t)\Psi_k(x,t)(dx'')\right\}$$

вə ја

$$i\hbar\frac{\partial\rho(x,x',t)}{\partial t}=\int\Big\{H_{xx''}\sum_k W_\kappa\Psi_k^*(x',t)\Psi'_k(x'',t)-$$

$$-H_{x'x''}^+\sum_k W_\kappa\Psi_k^*(x'',t)\Psi_k(x,t)\Big\}(dx'')$$

олар. Сыхлыг матрисасынын (26.11) ифадəсини вə Һамилтон операторунун $H_{x'x''}^+=H_{x''x'}$ ермитлик шəртини нəзəрə алсаг, ахырынчы ифадə

$$i\hbar\frac{\partial\rho_{xx'}(t)}{\partial t}=\int\left(H_{xx''}\rho_{x''x'}-\rho_{xx''}H_{x''x'}\right)(dx''),$$

јахуд

$$i\hbar\frac{\partial\rho_{xx'}(t)}{\partial t}=(H\rho)_{xx'}-(\rho H)_{xx'}$$

шəклинə дүшəр. Буну оператор шəклиндə јазсаг,

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}(\breve{H}\breve{\rho}-\breve{\rho}\breve{H});\qquad\frac{\partial\breve{\rho}}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{\rho}\right] \qquad (27.2)$$

тəнлији алынар. Бу тəнлик, сағ тəрəфдəки мəнфи ишарəни нəзəрə алмасаг, физики кəмијјəтлəрин замана көрə дəјишмəсини тə'јин едəн ади (бах §10) һəрəкəт тəнлији шəклиндəдир. Она көрə дə (27.2) тəнлијинə гарышыг һалларын замана көрə дəјишмəсини тəсвир едəн һəрəкəт тəнлији кими бахмаг олар. Белə ки, бу тəнлик, һəр һансы t=0 башланғыч анында сыхлыг матрисасы мə'лум олдугда, онун истəнилəн t анындакы ифадəсини (гијмəтини) тапмаға имкан верир.

(27.2) тəнлији бə'зəн Лиувилл квант тəнлији адланыр, чүнки, классик статистик физикада пајланма функсијасы (еһтимал сыхлығы) (27.2) тəнлијинə еквивалент

$$\frac{\partial W}{\partial t}=-\left[HW\right]$$

классик Лиувилл тəнлијини өдəјир, бурада W–еһтимал сыхлығы, $H(q,p,t)$ – Һамилтон функсијасы вə $\left[HW\right]=\frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial W}{\partial q}-\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial W}{\partial p}$ классик Пуассон мө'тәризәсидир (q вә p – системин координат вә импулслар чохлуғу).

Һамилтон оператору ашкар шәкилдә замандан асылы дејилсә, (27.2) тәнлијиндән

$$\rho(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\rho(0)e^{\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{27.3}$$

алыныр. Дикәр тәрәфдән (27.2) тәнлијини енержи тәсвириндә јазыб,

$$\frac{\partial\rho_{mn}(t)}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}((H\rho)_{mn}-(\rho H)_{mn})$$

H_{mn} матрисасынын өз тәсвириндә $H_{mn}=E_n\delta_{mn}$ диагонал матриса олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$i\hbar\frac{\partial\rho_{mn}(t)}{\partial t}=(E_m-E_n)\rho_{mn}(t) \tag{27.4}$$

алынар. Көрүндүјү кими бу тәнлији интегралламаг бөјүк чәтинлик төрәтмир. t=0 анында сыхлыг матрисасынын елементләрини $\rho_{mn}(0)$ кими ишарә етсәк, (27.4)-дән

$$\rho_{mn}(t)=\rho_{mn}(0)e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t} \tag{27.5}$$

алынар, јә'ни бу һалда сыхлыг матрисасынын елементләри замана көрә һармоник ганунла дәјишир вә дәјишмә тезлији $\omega_{nm}=\dfrac{E_n-E_m}{\hbar}$ олур.

§ 28. СЫХЛЫГ МАТРИСАСЫ ҮЧҮН ШРЕДИНКЕР, ҺЕЈЗЕНБЕРГ ВӘ ГАРШЫЛЫГЛЫ ТӘ'СИР ТӘСВИРЛӘРИ

Инди дә сыхлыг матрисасы вә онун өдәдији (27.2) тәнлијини Шрединкер, Һејзенберг вә гаршылыглы тә'сир (Дирак) тәсвирләриндә јазаг.

Сыхлыг матрисасынын замандан асылылығы (27.2) тәнлији илә верилән тәсвир **Шрединкер тәсвири** адланыр. Бу тәсвирдә истәнилән физики кәмијјәтин бахылан андакы орта гијмәти, (26.8)-ә әсасән

$$\bar{L}(t)=\mathrm{Sp}(\breve{\rho}(t)\breve{L}) \tag{28.1}$$

кими тә'јин олунур.

Һејзенберг тәсвириндә һал векторунун (далға функсијасынын) замандан асылы олмамасына ујғун олараг сыхлыг матрисасы да замандан асылы дејилдир. Физики кәмијјәтләрә ујғун операторлар исә замандан асылыдыр. Бурадан алыныр ки, (27.3) бәрабәрлији сыхлыг матрисасы үчүн онун $\rho(0)$ Һејзенберг тәсвириндән $\rho(t)$ Шрединкер тәсвиринә кечиди тәсвир едир. Бу тәсвирдә физики кәмијјәтин верилән андакы орта гијмәтини тапмаг үчүн $\rho(t)$-нин (27.3) ифадәсини (28.1)-дә јеринә јазыб, шпур алтында операторларын тсиклик јердәјишмә гајдасындан истифадә етмәк лазымдыр:

$$\bar{L}(t)=\mathrm{Sp}(e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\rho(0)e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\breve{L}^{ш})=\mathrm{Sp}(\rho(0)e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\breve{L}^{ш}e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$$

вә ја

$$\bar{L}(t)=\mathrm{Sp}(\breve{\rho}(0)\breve{L}(t)) \tag{28.2}$$

аларыг. Бурада $\breve{L}(t)$ – Һејзенберг тәсвириндә көтүрүлмүш вә (25.10) бәрабәрлији илә тә'јин олунан оператордур. Онун замана көрә дәјишмәси исә (25.11) тәнлији илә верилир.

Шрединкер тәсвириндә Һамилтон оператору замандан асылы олмајан $\breve{H}_o$ ("сәрбәст" системин Һамилтон оператору) вә замандан асылы олан $\breve{V}(t)$ – гаршылыглы тә'сир операторларынын (25.12) чәми шәклиндә ($\breve{H}=\breve{H}_o+V(t)$) көстәрилә биләрсә, јухарыда гејд етдијимиз кими, гаршылыглы тә'сир тәсвириндән истифадә етмәк әлверишли олур.

(27.3)-ә охшар олараг, сыхлыг матрисасы үчүн гаршылыглы тә'сир тәсвириндән Шрединкер тәсвиринә кечид

$$\rho(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}H_o t}\tilde{\rho}(t)e^{\frac{i}{\hbar}H_o t} \tag{28.3}$$

кими јазылар (мүгајисә мәгсәди илә (25.14)-ә бах), бурада $\rho(t)$ – Шрединкер тәсвириндә, $\tilde{\rho}(t)$ исә гаршылыглы тә'сир тәсвириндә верилмиш сыхлыг матрисаларыдыр. $\rho(t)$-нин бу ифадәсини (28.1)-дә јеринә јазыб, (28.2)-дәки кими, шпур алтында операторларын тсиклик јердәјишмә гајдасындан истифадә етсәк,

$$\bar{L}(t)=\mathrm{Sp}(\tilde{\rho}(t)\tilde{\tilde{L}}(t)) \tag{28.4}$$

аларыг. Бурада $\tilde{\tilde{L}}$ – (25.14) ифадәси илә тә'јин олунан гаршылыглы тә'сир тәсвириндә верилмиш $\breve{L}$ операторудур вә онун замана көрә дәјишмәси (25.17) тәнлији илә тә'јин олунур. $\tilde{\rho}(t)$-нин замана көрә дәјишмәсини характеризә едән тәнлији тапмаг үчүн исә онун (28.3) ифадәсини (27.2) тәнлијиндә јеринә јазаг. Онда

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}H_o t}\widetilde{\rho}(t)e^{\frac{i}{\hbar}\breve{H}_o t}\right)=$$

$$=(H_o+V)e^{\frac{i}{\hbar}H_o t}\widetilde{\rho}(t)e^{\frac{i}{\hbar}H_o t}-e^{\frac{i}{\hbar}H_o t}\widetilde{\rho}(t)e^{\frac{i}{\hbar}H t}(\breve{H}_o+V)$$

алынар. Сол тәрәфдәки замана көрә төрәмәни көтүрәндән сонра $\breve{H}_o$ илә $e^{\frac{i}{\hbar}H_o t}$ операторларынын коммутативлијини вә (25.16) ифадәсини нәзәрә алсаг, $\widetilde{\rho}(t)$ үчүн

$$i\hbar\frac{\partial\widetilde{\rho}(t)}{\partial t}=\left[\widetilde{\breve{V}}(t)\breve{\rho}(t)\right] \tag{28.5}$$

һәрәкәт тәнлијини аларыг, бурада $\widetilde{\breve{V}}(t)$ – (25.14) илә верилмиш гаршылыглы тә'сир тәсвириндәки $V(t)$ – операторудур.

§ 29. КЕТ- ВӘ БРА- ВЕКТОРЛАР

Јухарыда гејд етдик ки, квант механики системин һалыны характеризә етмәк үчүн (23.14) унитар чеврилмәләри илә бири дикәриндән алынан тәсвирләр там еквивалентдир. Һәр һансы мүәјјән бир тәсвирдән истифадә етмәдән квант механикасынын бүтүн мүддәаларыны ифадә етмәк үчүн даһа бир үмуми метод мөвчуддур. Бу метод **һал вектору** анлајышына әсасланыр. Бу вектор бир бирилә коммутасија едән операторларын мәхсуси гијмәтләрини тә'јин едән квант әдәдләри чохлуғу илә тә'јин олунур вә квант механики системин верилмиш һалыны там тәсвир едир.

Белә тәсвир методу илк дәфә физикаја Дирак тәрәфиндән дахил едилмишдир. Диракын тәклифи илә һал вектору $|\Psi>$ кими ишарә олунур вә о **кет-вектор** адланыр. Квант әдәдләри чохлуғу илә тә'јин олунан кет-вектор исә $|n>$ кими јазылыр, бурада n—системин һалыны там тә'јин едән L_f физики кәмијјәтләрә ујғун n_1, n_2, ..., n_f квант әдәдләри чохлуғудур.

Кет-векторлар хәтти вектор фәзасы тәшкил едир, кет-векторларын хәтти комбинасијасы да кет-вектордур.

Верилмиш чохлуғу тәшкил едән кет-векторлардан бири дикәрләринин хәтти комбинасијасы кими көстәрилә биләрсә, онлар хәтти асылы олмур.

Бахылан вектор фәзасы бир-бириндән асылы олмајан n кет-вектордан тәшкил олунарса, белә фәза сонлу өлчүлү фәза адланыр вә онун өлчүсү n-ә бәрабәр олур. Фәзаны тәшкил едән векторларын сајы сонсуз оларса, о, сонсуз өлчүлү фәза адланыр вә фәзанын өлчүсү сонсуз олур. Бу ахырынчы фәза, $\Psi(x)$ функсијалар фәзасы кими, Һилберт фәзасы адланыр. Системин бүтүн башга һал векторлары бу базис векторларын сонлу вә ја сонсуз хәтти комбинасијасы шәклиндә көстәрилә билир.

Һал-векторуна гошма вектор $<\Psi|$ вә ја $<n|$ кими ишарә олунур вә бра-вектор* адланыр.

Кет-векторлар фәзасы сонлу вә ја сонсуз өлчүлү олдугда бра-векторлар фәзасы да ујғун олараг сонлу вә ја сонсуз өлчүлү олур. Кет вә бра-векторлар арасындакы ујғунлуғ анти-хәттидир, јә'ни кет-вектор үчүн

$$|n> = \lambda_1|n_1> + \lambda_2|n_2> \tag{29.1}$$

олдугда, бра-вектор үчүн

$$<n = \lambda^*_1<n_1| + \lambda^*_2<n_2| \tag{29.2}$$

олур, бурада λ_1 вә λ_2 комплекс кәмијјәтләрдир. Кет-вектор сыфра бәрабәр олдугда бра-вектор да сыфыр олур. Бра-векторлар фәзасы кет-векторлар фәзасына нәзәрән дуал фәза адланыр. Башга сөзлә кет- вә бра-векторлар мүхтәлиф фәзаларда верилир.

Бу тәсвирдә ики векторун $\int\Psi^*\Psi(dx)$ скалјар һасили

$$<\Psi|\Psi>. \tag{29.3}$$

Һәр һансы операторун $\Psi_n(x)$ мәхсуси функсијалары исә

$$\Psi_n(x)=<x|n>, \tag{29.4}$$
$$\Psi^*_n(x)=<n|x>$$

кими ишарә олунур. (29.4) функсијалары $|n>$ һал векторунун координат тәсвири

$$\Psi_n(p)=<p|n>,$$
$$\Psi^*_n(p)=<n|p>, \tag{29.5}$$

функсијалары исә $|n>$ векторунун импулс тәсвири адланыр.

Ријази бахымдан $<x|n>$ кәмијјәтләри $|x>$ функсијалары базисиндә $|n>$ векторунун компонентләри һесаб олунур:

$$|n\rangle=\int|x\rangle\langle x|n\rangle(dx)=\int|x\rangle\Psi_n(x)(dx). \tag{29.6}$$

$|x>$ базис векторлары исә $\breve{x}$ операторунун мәхсуси функсијаларыдыр:

$$\breve{x}|x'\rangle=x'|x'\rangle. \tag{29.7}$$

* бра-вектор вә кет-вектор адлары инкилис дилиндә мө'тәризә мә'насыны дашыјан bracket сөзүнүн биринчи вә икинчи һечаларындан көтүрүлмүшдүр.

Дикәр тәрәфдән, $\langle x \mid n\rangle$ кәмијјәтләринә сәтирләри кәсилмәз x индексләри, сүтунлары исә n индексләри илә ишарә олунан матрисанын елементләри кими дә бахылыр.

Зәррәчијин x нөгтәси әтрафында олма еһтимал сыхлығы

$$|\Psi_n(x)|^2 = \Psi_n^*(x)\Psi_n(x) = \langle n \,|x\rangle\langle x \,|n\rangle \tag{29.8}$$

вә онун фәзанын һәр һансы ихтијари нөгтәсиндә олма еһтималы исә

$$\int \Psi_n^*(x)\Psi_n(x)(dx) = \int \langle n \,|x\rangle\langle x \,|n\rangle(dx) = \langle n \,|n\rangle = 1 \tag{29.9}$$

олур.

Квант механикасынын әсас мүддәасына көрә $\mid n\rangle$ һал векторлар чохлуғу там систем тәшкил етмәлидир. Онда системин ихтијари $\mid \Psi\rangle$ һал векторуну $\mid n\rangle$ векторлары илә ифадә етмәк олар (суперпозисија принсипи):

$$|\Psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n \,|\Psi\rangle, \tag{29.10}$$

бурада n – бүтүн мүмкүн олан гијмәтләри алыр. Бурадан $\mid n\rangle$ векторлар чохлуғунун там систем олмасы шәрти

$$\sum |n\rangle\langle n \,| = I \tag{29.11}$$

олур, I – ваһид матрисадыр, $\mid \Psi\rangle$ векторунун, мәсәлән, x-тәсвириндә верилдијини фәрз етсәк, (29.10) ифадәси

$$\langle x \,|\Psi\rangle = \sum_n \langle x \,|n\rangle\langle n \,| \tag{29.12}$$

шәклиндә јазылыр. Бу, $\Psi(x)$-ин

$$\Psi(x) = \sum C_n \Psi_n(x)$$

шәклиндә јазылмыш суперпозисијасы демәкдир.

Һәр һансы ихтијари $\breve{L}$ операторунун $\mid n\rangle$ векторлары илә тә'јин олунан матриса елементләри $\langle n' \,|L \,|n\rangle$ кими јазылыр. Бу матрисанын диагонал елементләри, јә'ни L-ин $\mid n\rangle$ һалында орта гијмәти үчүн

$$\langle L\rangle = \langle n \,|L \,|n\rangle \tag{29.13}$$

ишарәси гәбул олунур.

Матриса елементләрини һесабламаг үчүн адәтән мүәјјән бир тәсвирә кечмәк лазым олур. Мәсәлән, белә бир тәсвир x-тәсвирі сечилсә, $\breve{L}$ оператору вә $\mid n\rangle$ векторлары бу тәсвирдә

$$\langle x' \,|L \,|x\rangle = \delta(x'-x)L(x);\ \langle x \,|n\rangle;\ \langle n \,|x\rangle \tag{29.14}$$

кими јазылыр. Һәмин тәсвирдә $\langle n' \,|L \,|n\rangle$ матриса елементи исә

$$\langle n' \,|L \,|n\rangle = \int \langle n' \,|x\rangle\langle x' \,|L \,|x\rangle\langle x \,|n\rangle(dx)(dx') \tag{29.15}$$

вә ја $\langle x' \,|L \,|x\rangle$-ин (29.14) илә верилмиш ифадәсини бурада јазыб δ - функсија васитәсилә x' үзрә интеграл көтүрсәк:

$$\langle n' \,|L \,|n\rangle = \int \langle n' \,|x\rangle \breve{L}(x)\langle x \,|n\rangle(dx) = \int \Psi_{n'}^*(x)\breve{L}(x)\Psi_n(x)(dx) \tag{29.16}$$

олур, јә'ни матриса елементинин артыг бизә мә'лум олан ифадәси алыныр. Лакин квант механикасынын тәтбигинә һәср олунмуш фәсилләрдә көрәчәјимиз кими, бу үмуми методла операторун матриса елементләрини һесабламаг үчүн һеч дә мүәјјән бир тәсвирә кечмәјә еһтијач јохдур. Бунун үчүн операторларын вә һал векторларынын тәсвирин сечилмәсиндән асылы олмајан үмуми хассәләрини билмәк кифајәтдир.

Бу методда $\breve{L}$ вә $\breve{F}$ операторларынын матриса елементләри мә'лум оларса, онларын һасили олан $\breve{C} = \breve{L}\breve{F}$ операторунун матриса елементини биринчиләрлә ифадә етмәк олар:

$$\langle n' \,|C \,|/ n\rangle = \langle n' \,|LF \,|n\rangle = \sum_{n''} \langle n' \,|L \,|n''\rangle\langle n'' \,|F \,|n\rangle, \tag{29.17}$$

јахуд ади ишарәләрлә

$$C_{n'n} = \sum_{n''} L_{n'n''} F_{n''n} \tag{29.18}$$

олур.

II һ и с с ә

ГЕЈРИ-РЕЛЈАТИВИСТИК КВАНТ МЕХАНИКАСЫНЫН БӘ’ЗИ ТӘТБИГЛӘРИ

IV Ф Ә С И Л

БИРӨЛЧҮЛҮ ҺӘРӘКӘТЛӘРИН ТӘДГИГИ

§ 30. ЗӘРРӘЧИЈИН ПОТЕНСИАЛ ЧӘПӘРДӘН КЕЧМӘСИ

Шрединкер тәнлијинин физики маһијјәтини даһа дәриндән дәрк етмәк үчүн әввәлчә бирөлчүлү мәсәләләри араштырмағы, сонра исә әксәр һалларда тәнликләри бирөлчүлү Шрединкер тәнлијинә кәтирилә билән мәсәләләрә кечмәји мәгсәдә ујғун билдик.

Фәзанын ики областында зәррәчијин енержиси бу областлары ајыран сәтһдәки потенсиал енержидән кичикдирсә, областлар потенсиал чәпәрлә ајрылмыш олур. Потенсиал чәпәр мүхтәлиф һәндәси формаја малик ола биләр. Мәсәлән, шәкил 6-да ихтијари шәкилли бирөлчүлү потенсиал чәпәр көстәрилмишдир.

Координат башланғычында ($x=0$ нөгтәсиндә) потенсиал енержи U_{max} максимум гијмәтә маликдир. Бу нөгтәјә нәзәрән сол ($x<0$) вә сағ ($x>0$) областларда исә потенсиал енержи өзүнүн максимум гијмәтиндән кичикдир. Бу чәпәрин тимсалында классик һәрәкәтлә квант һәрәкәтин фәргиндә олан хүсусијјәтләри нүмајиш етдирмәк олар.

Фәрз едәк ки, там енержиси E, күтләси m олан зәррәчик солдан сағa x охунун мүсбәт истигамәтиндә һәрәкәт едир. Классик физикада зәррәчијин E там енержиси онун кинетик вә потенсиал енержиләри чәминә бәрабәрдир:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x) \qquad (30.1)$$

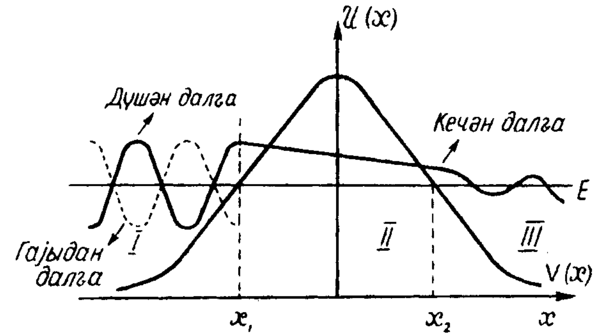
бурадан зәррәчијин импулсу p-ни тапсаг,

$$p = \pm\sqrt{2m(E - U(x))} \qquad (30.2)$$

олар.

Зәррәчијин енержиси потенсиал енержинин U_{max} гијмәтиндән бөјүкдүрсә ($E>U_{max}$), зәррәчик манеәсиз чәпәри ашыб онун сағ (сол) тәрәфинә кечәчәк. Зәррәчијин енержиси потенсиал енержинин $-x_1$ (вә ја x_2)

нөгтәсиндәки гијмәтинә бәрабәрдирсә, (30.2)-јә көрә һәмин нөгтәләрдә зәррәчијин импулсу $p(-x_1)=0$ ($p(x_2)=0$) олар. Бу һалда зәррәчик x-ин мүсбәт (мәнфи) истигамәтиндә һәрәкәтини давам етдирә билмәјиб, әкс истигамәтдә һәрәкәт етмәјә башлајачагдыр. $x=-x_1$ вә $x=x_2$ нөгтәләри *гајытма нөгтәләри* адланыр.



Шәкил 6. Ихтијари шәкилли бирөлчүлү потенсиал чәпәр.

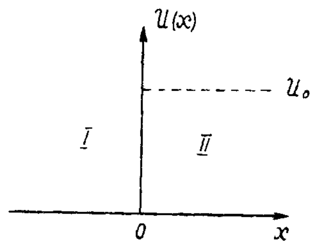
$x>-x_1$ вә $x<x_2$ областында $E<U(x)$ олдуғундан зәррәчијин импулсу хәјали гијмәт алыр, импулс өз классик физики маһијјәтини итирир вә белә зәррәчик һәмин областда (потенсиал чәпәрин дахилиндә) ола билмир. Беләликлә, классик механикада потенсиал чәпәр енержиси U_{max} -дан кичик олан зәррәчикләр үчүн гејри - шәффаф, енержиси U_{max} -дан бөјүк олан зәррәчикләр үчүн исә шәффаф олур. Потенсиал чәпәр термини бу классик мә’нада баша дүшүлүр.

Квант механикасында импулсун хәјали гијмәти јалныз далға функсијасынын координатлардан експоненсиал асылылығына дәлаләт едир вә далға функсијасы исә потенсиал чәпәрин дахилиндә сыфра бәрабәр олмур, зәррәчијин чәпәри кечиб кетмә еһтималы сыфырдан фәргли галыр. Демәли, микрозәррәчикләр үчүн $E<U(x)$ оланда потенсиал чәпәрдән кечмә һадисәси мүшаһидә олуна биләр. Белә һадисә квант механикасында **туннел еффекти** адланыр. Бу јалныз квант нәзәријјәсинә хас олан һадисәдир вә онун классик охшары (аналогу) јохдур.

Квант механикасында классик физиканын јухарыдакы ики иддиасынын һәр икиси, үмумијјәтлә, дүз дејилдир. Беләликлә, биз микрозәррәчикләрин микросаһәләрдәки һәрәкәтини тәдгиг едириксә, енержиси $E>U_{max}$ вә $E<U_{max}$ олан зәррәчик, һәр ики һалда, гисмән чәпәрдән кечмәк вә гисмән дә ондан әкс олунмаг еһтималына маликдир. Дедикләримизи нүмајиш етдирмәк үчүн бир нечә садә һала бахаг.

а) Потенсиал дивар

Фәрз едәк ки, енержиси E олан вә x охунун мүсбәт истигамәтиндә $x=-\infty$-дан һәрәкәт едән m күтләли зәррәчик потенсиал енержи $U(x)=0$ олан I областдан ($-\infty\leq x\leq 0$) $U(x)=U_o$ олан II областа ($0\leq x\leq\infty$) кечир (шәкил 7).



Шәкил 7. Потенсиал дивар.

Системин $\breve{H}$ Һамилтон оператору

$$\breve{H}=\frac{\breve{p}^2}{2m}+U(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U_o. \quad (30.3)$$

Һамилтон оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан belә зәррәчијин мүмкүн һаллары стасионар һаллар олар. Стасионар һалларын Шрединкер тәнлији

$$\breve{H}\Psi(x)=E\Psi(x)$$

вә ја

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}+U(x)\Psi(x)=E\Psi(x) \quad (30.4)$$

кими јазылыр.

$$k_o^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \text{ вә } k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_o) \quad (30.5)$$

ишарәләрини гәбул етсәк, I вә II областлар үчүн Шрединкер тәнлији, ујғун олараг,

$$\Psi_I''(x)+k_o^2\Psi_I(x)=0, \qquad x<0,\ U(x)=0,$$
$$\Psi_{II}''(x)+k^2\Psi_{II}(x)=0, \qquad x>0,\ U(x)=U_o. \quad (30.6)$$

Бу нөв тәнликләрин һәллиндә характеристик тәнликләрин гурулма јолундан истифадә етсәк, (30.6) тәнликләрин һәлләри үчүн

$$\Psi_I(x)=Ae^{ik_ox}+Be^{-ik_ox} \qquad x<0$$
$$\Psi_{II}(x)=Ce^{ikx}+De^{-ikx} \qquad x>0 \quad (30.7)$$

алынар. Бурада A, B, C, D — ихтијари сабитләрдир.

$U(x)$ потенсиал диварын U_o һүндүрлүјүнә нәзәрән зәррәчијин енержиси $E<U_o$ вә $E>U_o$ ола биләр. Бу ики һалы ајрылыгда тәһлил едәк.

1) Фәрз едәк ки, $E<U_o$ -дыр. Бу һалда (30.5)-дән k^2 үчүн хәјалы гијмәт алыныр. Ону $k=i\varkappa$ кими ишарә етсәк,

$$\varkappa=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_o-E)}, \quad (30.8)$$

(30.7)-дән исә

$$\Psi_{II}(x)=Ce^{-\varkappa x}+De^{\varkappa x} \quad (30.9)$$

алыныр.

Билдијимиз кими квант механики системин далға функсијасы үч стандарт шәрти өдәмәлидир. Ψ-функсија бахылан областда сонлу, кәсилмәз вә биргијмәтли олмалыдыр. (30.9)-дан көрүнүр ки, $\Psi_{II}(x)$ сонлу галмасы үчүн ихтијари сабит D=0 сечилмәлидир. Онда (30.7) һәлләри

$$\Psi_I(x)=Ae^{ik_ox}+Be^{-ik_ox} \qquad x<0$$
$$\Psi_{II}(x)=Ce^{-\varkappa x} \qquad x>0 \quad (30.7')$$

x=0 нөгтәсиндә $\Psi(x)$ -ин вә онун биринчи тәртиб төрәмәсинин кәсилмәз олдуғуну тәләб етсәк,

$$\Psi_I(x=0)=\Psi_{II}(x=0)$$
$$\Psi_I'(x=0)=\Psi_{II}'(x=0) \quad (30.10)$$

вә ја (30.7′)-дән

$$A+B=C$$
$$ik_o(A-B)=-\varkappa C \quad (30.11)$$

аларыг. Бурадан $\frac{B}{A}$ вә $\frac{C}{A}$ нисбәтләри үчүн

$$\frac{B}{A}=\frac{k_o-i\varkappa}{k_o+i\varkappa}, \qquad \frac{C}{A}=\frac{2k_o}{k_o+i\varkappa} \quad (30.12)$$

гијмәтләри алынар.

I областда зәррәчик сәрбәст һәрәкәт едир. Бу һәрәкәтин үмуми $\Psi_I(x)$ функсијасы $\Psi_I(x)=\Psi^{(+)}{}_I(x)+\Psi^{(-)}{}_I(x)$ кими јазыла биләр. Бурада $\Psi_I^{(+)}=Ae^{ik_ox}$ – x охунун мүсбәт истиғамәтиндә зәррәчијин мүсбәт импулслу һәрәкәтини, $\Psi_I^{(-)}(x)=Be^{-ik_ox}$ исә онун мәнфи импулслу, јә'ни потенсиал дивардан гајыдараг x-ин мәнфи истигамәтиндәки һәрәкәтини тәсвир едәчәкдир. Бу функсијалар $\breve{p}$ импулс операторунун мәхсуси функсијаларыдыр. Онларын $\{\Psi_p(x)\}$ чохлуғу кәсилмәз спектр тәшкил етдијиндән онлар үчүн ортонормаланма шәрти

$$\int \Psi^{*}_{p'}(x)\Psi_p(x)dx = \delta(p'-p)$$

олар. Бу шәртдән A үчүн $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ гијмәти алыныр (бах (11.18′)).

Беләликлә I вә II областларын далға функсијалары

$$\Psi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\left(e^{ik_o x} + \frac{k_o - i\text{æ}}{k_o + i\text{æ}}e^{-ik_o x}\right) \tag{30.13}$$

$$\Psi_{II}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\frac{2k_o}{k_o + i\text{æ}}e^{-\text{æ}x}$$

олур.

$U(x)$ саһәсиндә һәрәкәт едән E енержили зәррәчијин $\Psi(x)$ далға функсијасы $x=-\infty$ -да

$$\Psi_I(x) = Ae^{ik_o x} + Be^{-ik_o x} = \Psi_I^{+}(x) + \Psi_I^{(-)} \tag{30.14}$$

кими асимптотик шәклә маликдирсә,

$$R = \lim_{x\to-\infty}\frac{\left|j(\Psi_I^{(-)}(x))\right|}{\left|j(\Psi_I^{(+)}(x))\right|} \tag{30.15}$$

әмсалына *гајытма* вә ја *әксетмә* әмсалы дејилир. Бурада $j(\Psi_I^{(-)}(x))$ вә $j(\Psi_I^{(+)}(x))$ – ујғун истигамәтләрдәки еһтимал сыхлығы чәрәјанларыдыр (бах (17.12)).

(30.7′), (30.12) вә (30.15)-дән көрүнүр ки, $E<U_o$ һалында $U(x)$ потенсиаллы областда һәрәкәт едән зәррәчик әксетмә әмсалы

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k_o - i\,\text{æ}|^2}{|k_o + i\text{æ}\,|^2} = 1 \tag{30.16}$$

олур. Анчаг гејд едәк ки, бу һалда дүшән далға илә гајыдан далғанын фазалары арасында фазалар фәрги јараныр.

2) Инди дә $E>U_o$ олдуғуну фәрз едәк. Бу һалда (30.5)-дән көрүндүјү кими $k_o>0$, $k>0$ олур вә (30.6) тәнликләрин һәлли (30.7) ифадәләри илә верилир. D әмсалы илә мүтәнасиб олан һәдд, јәгин ки, II областда x охунун әкс истигамәтиндә јајылан далғалары характеризә едир. Белә далғалар II областда јаранмыр, беләки областда онлары әкс етдирәчәк манеә јохдур. Она көрә дә бурада $D=0$ көтүрүлә биләр. Беләликлә (30.7) һәлләри

$$\Psi_I(x) = Ae^{ik_o x} + Be^{-ik_o x}$$

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{ikx} \tag{30.7″}$$

шәклини алыр. $x=0$ нөгтәсиндә функсијаларын вә онларын биринчи тәртиб төрәмәләринин кәсилмәзлик шәртләриндән

$$A+B=C$$

$$k_o(A-B)=kC \tag{30.17}$$

алыныр. Бурадан

$$\frac{B}{A} = \frac{k_o - k}{k_o + k} \quad \text{вә} \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_o}{k_o + k} \tag{30.18}$$

олар. Бу һалда потенсиал дивардан әксетмә әмсалы

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|k_o - k|^2}{|k_o + k|^2} \tag{30.19}$$

$k<k_o$ олдуғундан әксетмә әмсалы $R<1$ олур вә о, өзүнүн максимум гијмәтинә јалныз $E=U_o$ вә ја $k=0$ -да чатыр.

Һәм $E<U_o$ вә һәм дә $E>U_o$ һалларыны өзүндә әкс етдирән R-ин E-дән асылылығы шәкил 8-дә верилмишдир.

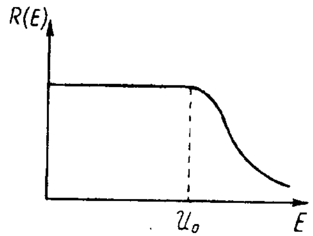
(30.7″)-дә $\Psi_I(x)$ вә $\Psi_{II}(x)$ далға функсијалары $x\to+\infty$ ујғун тәнликләрин асимптотик һәлләри олдуғундан потенсиал диварын (чәпәрин) шәффафлыг вә ја кечид әмсалы (30.18)-ә әсасән

$$D = \lim_{x\to+\infty}\frac{j(\Psi_{II}(x))}{j(\Psi_I^{(+)}(x))} = \frac{k\left|C^2\right|}{k_o|A|^2} = \frac{4kk_o}{(k_o + k)^2} \tag{30.20}$$

олар. Зәррәчикләр сајынын сахланма ганунундан

$$R+D=1 \tag{30.21}$$

олмалыдыр. R вә D -ин (30.19) вә (30.20) ифадәләриндән (30.21) мүнасибәтинин доғрулуғуна асанлыгла инанмаг олар.



Шәкил 8

Јухарыда гејд етдијимиз кими, класик механикада зәррәчијин E енержиси потенсиал чәпәрин U_o һүндүрлүјүндән бөјүкдүрсә, белә чәпәр онлар үчүн там шәффаф, јә'ни D=1, R=0 олур. Лакин, бахылан һалдан чыхыр ки, квант механикасында енержиси $E>U_o$ шәртини өдәјән зәррәчикләр үчүн потенсиал чәпәр там шәффаф дејил, белә ки, бу һалда D<1 вә зәррәчикләрин чәпәрдән гајытма еһтималы сыфырдан фәргли, јә'ни R>0 олур.

б) Дүзбучаглы потенсиал чәпәр

Потенсиал чәпәрин $U(x)$ потенсиал енержинин максимум гијмәти илә тә'јин олунан һүндүрлүјүнү U_o илә ишарә едәк (шәкил 9). Мүәјјәнлик үчүн фәрз едәк ки, зәррәчик солдан сағa x охунун мүсбәт истигамәтиндә һәрәкәт едир:

$$U(x)=0, \quad x<0, \quad x>l \qquad (30.22)$$
$$U(x)=U_o, \quad 0\le x\le l$$

$U(x)$-ин бу гијмәтләрини (30.4) тәнлијиндә јазыб, ону I, II вә III областлар үчүн (30.6) тәнликләр системинә кәтирәндән сонра, алынан тәнликләри a) бәндиндә көстәрилән јолла һәлл етсәк,

$$\Psi_I(x)=Ae^{ik_o x}+Be^{-ik_o x} \qquad x<0$$
$$\Psi_{II}(x)=Ce^{ikx}+De^{-ikx} \qquad 0\le x\le l \qquad (30.23)$$
$$\Psi_{III}(x)=Qe^{ik_o x}+Pe^{-ik_o x} \qquad x>l$$

аларыг, бурада A, B, C, D, Q, P ихтијари сабитләрдир вә

$$k_o^2=\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k^2=\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_o) \qquad (30.23')$$

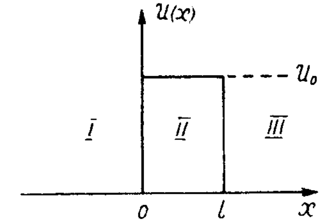
ишарәләри гәбул олунмушдур. III областда x-ин әкс истигамәтиндә јајылан далға олмадығына көрә P=0 көтүрүлә биләр.

Верилмиш областлар үчүн јазылмыш бир-бириндән асылы олмајан үч тәнлијин һәлли олан бу үч функсија зәррәчијин бахылан саһәдәки һәрәкәтини тәсвир едән һәр һансы јеканә бир $\Psi(x)$ функсијасы тәшкил етмир, онларын белә бир функсија тәшкил етмәси үчүн сәрһәд шәртләриндән истифадә етмәк лазымдыр. Бу шәртләр далға функсијасынын вә онун биринчи тәртиб төрәмәләринин x=0 вә x=l нөгтәләриндә кәсилмәз олмалары тәләбидир. Бу тәләбә көрә

$$\Psi_I(x=0)=\Psi_{II}(x=0)$$
$$\Psi_{II}(x=l)=\Psi_{III}(x=l)$$

вә

$$\Psi'_I(x=0)=\Psi'_{II}(x=0)$$
$$\Psi'_{II}(x=l)=\Psi'_{III}(x=l) \qquad (30.24)$$



Шәкил 9. Дүзбучаглы потенсиал чәпәр.

бәрабәрликләри өдәнилмәлидир. (30.23) функсијаларынын бу бәрабәрликләри өдәдијини тәләб етсәк,

$$A+B=C+D,$$
$$k_o(A-B)=k(C-D) \qquad (30.25)$$
$$Ce^{ikl}+De^{-ikl}=Qe^{ik_o l}$$
$$k(Ce^{ikl}-De^{-ikl})=k_oQe^{ik_o l}$$

системини аларыг.

(30.25) тәнликләр системинә беш ихтијари сабит дахилдир. Тә'јин олуначаг сабитләрин сајы тәнликләрин сајындан чох олдуғуна көрә бахылан систем јалныз онларын нисбәтләрини тә'јин етмәјә имкан верир. Лакин бизи чәпәрин R гајытма вә D шәффафлыг әмсаллары марагландырдығындан, бурада онлары тә'јин едән $\frac{B}{A}$ вә $\frac{Q}{A}$ нисбәтләрини тапмагла кифајәтләнәчәјик. (30.25)-дән бу нисбәтләр үчүн

$$\frac{B}{A}=\frac{(k_o^2-k^2)(e^{ikl}-e^{-ikl})}{(k+k_o)^2e^{-ikl}-(k-k_o)^2e^{ikl}} \qquad (30.26)$$

$$\frac{Q}{A}=\frac{4kk_o}{(k+k_o)^2e^{-ikl}-(k-k_o)^2e^{ikl}}$$

ифадәләри алыныр. (30.15), (30.20) вә (30.26) ифадәләриндән R вә D үчүн

$$R=\frac{4(k_o^2-k^2)^2\sin^2 kl}{(k+k_o)^4+(k-k_o)^4-2(k^2-k_o^2)^2\cos 2kl} \qquad (30.27)$$

$$D=\frac{16k^2k_o^2}{(k+k_o)^4+(k-k_o)^4-2(k^2-k_o^2)^2\cos 2kl}$$

алыныр. (30.27)-дә $\cos 2kl = 1 - 2\sin^2 kl$ бәрабәрлијиндән истифадә едиб, R вә D-нин ифадәләрини садәләшдирсәк,

$$R = \frac{(k_o^2 - k^2)^2 \sin^2 kl}{4k_o^2 k^2 + (k_o^2 - k^2)^2 \sin^2 kl}$$

вә

$$D = \frac{4k_o^2 k^2}{4k_o^2 k^2 + (k_o^2 - k^2)^2 \sin^2 kl}$$

ифадәләрини аларыг.

R вә D-нин ифадәләриндән көрүнүр ки,

$$R+D=1$$

шәрти, јә'ни зәррәчикләр сајынын сахланма гануну өдәнилир. Дикәр тәрәфдән $k \neq k_o$ олдуғундан R-ин сыфра вә D-нин ваһидә бәрабәр олмасы үчүн

$$\sin kl = 0 \qquad (30.30)$$

шәрти өдәнмәлидир, бурадан

$$kl = n\pi \text{ вә ја } \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - U_o)} = n\frac{\pi}{l},$$

ахырынчы ифадәни квадрата јүксәлтсәк,

$$E_n = U_o + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2 n^2}{l^2}, \quad n=0,1,2,... \qquad (30.31)$$

олур. Башга сөзлә, зәррәчијин E_n енержисинин (30.31) илә верилмиш мүсбәт дискрет гијмәтләр чохлуғу үчүн чәпәр там шәффаф олур. Гејд едәк ки, E_n -ин (30.31) гијмәтләр чохлуғу үчүн R гајытма әмсалынын сыфра бәрабәр олмасы дүзбучаглы чәпәрә хас олан хассәдир.

Дүшән зәррәчијин енержиси E потенсиал чәпәрин U_o һүндүрлүјүндән кичик оларса, $k = \frac{\sqrt{2m(E - U_o)}}{\hbar}$ ифадәси комплекс олур: $k = i\text{æ}$; бурада $\text{æ} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)} > 0$-дыр. Бу һалда (30.26) ифадәләриндә $e^{\text{æ}l}$ илә мүтәнасиб кифајәт гәдәр бөјүк һәдләрә нисбәтән дикәр һәдләри нәзәрә алмасаг, R~1-дә јахынлашар, D үчүн исә l-ин артмасы илә експоненсиал олараг азалан ифадә алынар:

$$D = D_o e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)}\, l}, \qquad (30.32)$$

бурада $D_o = \frac{16k_o^2 \text{æ}^2}{(k_o^2 + \text{æ}^2)^2}$. $E<U_o$ бәрабәрсизлијинин өдәнилмәсинә бахмајараг, классик физиканын әксинә олараг, квант механикасында белә зәррәчикләрин чәпәрдән кечмә еһтималы сыфырдан фәргли, јә'ни онлар үчүн чәпәр гисмән шәффаф олур.

Енержиси $E<U_o$ олан зәррәчикләрин чәпәрдән кечмә һадисәси квант механикасында, јухарыда гејд етдијимиз кими, *туннел еффекти* адланыр.

Туннел еффекти

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_o - E)}\, l \approx 1 \qquad (30.33)$$

шәрти өдәнилдикдә кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтә малик олур.

Гејд етмәк лазымдыр ки, туннел еффекти јалныз микроаләмдә мүшаһидә олуна биләр. Мәсәлән, $U_o - E$~10^{-11} eB, зәррәчијин күтләси 10^{-30} *кг* (електрон), $l = 10^{-10}$ *см* оланда $D \approx e^{-1}$ олур. l үчүн 1 *м* гијмәт көтүрүлмүш олсајды $D = 10^{-108}$ оларды. Беләликлә, $U_o - E$ фәрги вә зәррәчијин күтләси артдыгча D-нин гијмәти азалыр вә квант механикасы классик механикаја кечир. Бу кечид E-нин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә дә баш верир, бу һалда D=0, R=1 олур.

Дүзбучағлы потенсиал чәпәр үчүн алынан нәтичәләри шәкил 9-да көстәрилән ихтијари шәкилли потенсиал чәпәр үчүн дә үмумиләшдирмәк олар. Доғрудан да, һәмин чәпәри ени dx олан сонсуз кичик елементар чәпәрләрә бөлүб, һәр бир елементар чәпәрин шәффафлыг әмсалы үчүн

$$D' = D'_o e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(Uo - E)}\, dx}$$

јаза биләрик. Бүтөв чәпәрин шәффафлыг әмсалы D, елементар чәпәрләрин әмсаллары һасилинә бәрабәр олдуғундан,

$$D = D_o e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(U(x) - E)}\, dx} \qquad (30.34)$$

олар.

Јухарыда гејд етдик ки, зәррәчијин енержиси потенсиал чәпәрин һүндүрлүјүндән кичик оланда k-нын (30.23′) илә верилмиш ифадәси комплекс кәмијјәт олур. Һәмин шәрти

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}=E-U_o$$

кими јазыб, $\hbar k$ -нын зәррәчијин p импулсуна бәрабәр олдуғуну јадымыза салсаг, јухарыдакы ифадә

$$\frac{p^2}{2m}=E-U_o$$

шәклини алар. $E<U_o$ оланда бу ифадәдән алыныр ки, потенсиал чәпәрин дахилиндә зәррәчијин кинетик енержиси мәнфи гијмәт алмалыдыр. Бу нәтичә туннел ефектинин "**парадоксу**" адланыр. Лакин бурада һеч бир парадокс јохдур, чүнки зәррәчијин импулсу һәмишә һәгиги кәмијјәтдир, онун квадраты һеч вахт мәнфи ола билмәдији кими зәррәчијин кинетик енержиси дә мәнфи гијмәтләр ала билмәз. Туннел ефектиндә парадоксун мејдана чыхмасына сәбәб исә, она классик физика бахымындан јанашмағын нәтичәсидир. Доғрудан да, классик механикада потенсиал вә кинетик енержиләри ејни заманда гијмәт ала билдијиндән системин там енержиси онларын адитив чәминә бәрабәрдир. Квант механикасында исә там енержи кинетик вә потенсиал енержиләрин чәми кими тә'јин олуна билмәз, чүнки гејри-мүәјјәнлик принсипинә көрә системин кинетик (импулсу) вә потенсиал (координаты) енержиләри ејни заманда мүәјјән гијмәтә малик ола (өлчүлә) билмир. Енержи һиссәләрә бөлүнә билмәјән там бир кәмијјәт кими өзүнү апарыр.

§ 31. ДҮЗБУЧАГЛЫ ПОТЕНСИАЛ ЧУХУРДА ЗӘРРӘЧИЈИН ҺӘРӘКӘТИ

Күтләси m олан зәррәчијин

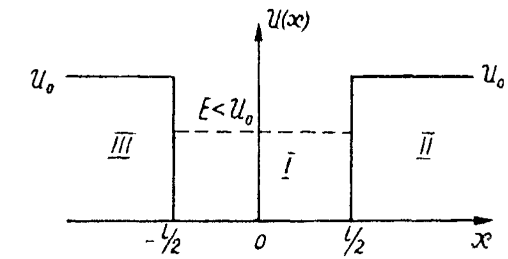
$$U(x)=\begin{cases}U_o & x<-\frac{l}{2},\ x>\frac{l}{2}\\ 0 & -\frac{l}{2}\le x\le\frac{l}{2}\end{cases} \qquad (31.1)$$

потенсиал саһәдәки һәрәкәтини тәдгиг едәк. Потенсиал чухурун дибиндә потенсиал енержинин гијмәти енержинин башланғычы кими көтүрүлмүшдүр.

II вә III областларда зәррәчијин потенсиал енержиси U_o, I областда исә зәррәчик сәрбәст һәрәкәт едир.

Зәррәчијин енержиси потенсиал чухурун U_o һүндүрлүјүндән бөјүк оларса ($E>U_o$), зәррәчик II вә III областлара кечә биләр. Бу һалда һәрәкәт инфинит олур (јә'ни зәррәчијин һәрәкәти бүтүн ($-\infty\le x\le\infty$) областда баш верә биләр) вә кечид (шәффафлыг) әмсалы (30.29) ифадәси илә вериләр.

$E<U_o$ һалы үзәриндә әтрафлы дајанаг. Бахылан мәсәлә x=0 нөгтәсинә көрә симметрик олдуғундан $x>0$ шәртини өдәјән I вә II областлар үчүн јазылмыш Шрединкер тәнликләринин һәллиндә x-и $-x$ илә әвәз етсәк, $x<0$ шәртини өдәјән областлара ујғун һәлләр алынмыш олар. Она көрә дә биз бурада $x>0$ һалыны тәдгиг етмәклә кифајәтләнәчәјик.



Шәкил 10. Дүзбучаглы потенсиал чухур.

I вә II областлар үчүн јазылмыш (30.6) Шрединкер тәнлијинин һәлләри, ујғун олараг,

$$\Psi_I(x)=C_1\cos k_ox+C_2\sin k_ox \qquad (31.2)$$

вә

$$\Psi_{II}(x)=Ae^{-\text{æ}x}+Be^{\text{æ}x} \qquad (31.2')$$

олар ($\Psi_1(x)$ функсијасында $e^{\pm ik_ox}=\cos k_ox\pm i\sin k_ox$ ифадәсиндән истифадә олунмушдур). Бурада C_1, C_2, A вә B ихтијары сабитләр, k_o вә æ исә ујғун олараг (30.5) вә (30.8) ифадәләри илә верилмишдир. $\Psi_{II}(x)$ далға функсијасынын x-ин бүтүн дәјишмә $0\le x\le\infty$ областында сонлу галмасы үчүн B=0 көтүрмәк лазымдыр. Дикәр тәрәфдән, $\Psi_I(x)$ функсијасы дахили чүтлүјү мүсбәт вә мәнфи олан далға функсијаларынын суперпозисијасыдыр. Билдијимиз кими, белә һалда зәррәчик ја чүт вә ја да тәк функсијаларла тәсвир олунан һалларда ола биләр. Буна көрә дә бу ики һалын һәр бирини ајрылыгда тәһлил едәк.

а) Фәрз едәк ки, зәррәчик чухурун дахилиндә $\Psi_I(x)=C_1\cos k_ox$ чүт функсија илә тәсвир олунур. Онда (31.2) ифадәләри

$$\Psi_I^{(+)}(x)=C_1\cos k_ox \qquad (31.3)$$

$$\Psi_{II}(x)=Ae^{-\text{æ}x} \qquad (31.3')$$

шәклинә дүшәр.

Далға функсијасынын вә онун биринчи тәртиб төрәмәсинин $x=l/2$ нөгтәсиндә (30.10) кәсилмәзлик шәртләриндән

$$C_1\cos\frac{k_o l}{2} - Ae^{-æ\frac{l}{2}} = 0$$

$$C_1 k_o \sin k_o \frac{l}{2} - æAe^{-æ\frac{l}{2}} = 0. \quad (31.4)$$

C_1 вә A сабитләринин сыфырдан фәргли гијмәтә малик олмасы үчүн онларын әмсалларындан дүзәлдилмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр:

$$\begin{vmatrix} \cos\frac{k_o l}{2} & -e^{-æ\frac{l}{2}} \\ k\sin k_o\frac{l}{2} & -æ\, e^{-æ\frac{l}{2}} \end{vmatrix} = 0,$$

бурадан

$$\operatorname{tg}\frac{k_o l}{2} = -\frac{æ}{k_o} = -\sqrt{\frac{2mU_o}{\hbar^2 k_o^2} - 1} \quad (31.5)$$

алыныр. (31.5)-и квадрата јүксәлдәндән сонра $\cos\frac{k_o l}{2}$-јә көрә һәлл етсәк,

$$\pm\cos\frac{k_o l}{2} = \frac{\hbar k_o}{\sqrt{2mU_o}} = \sin\left(\frac{\pi}{2}n - k_o\frac{l}{2}\right) \quad (31.6)$$

олар, бурада n=1, 3, 5, ... кими тәк там гијмәтләр алыр. (31.6)-дан k_o үчүн

$$k_{on} l = \pi n - 2\arcsin\frac{\hbar k_{on}}{\sqrt{2mU_o}} \quad (31.7)$$

тәнлији алыныр. (31.7) тәнлији k_o-ын k_{on} мүсбәт гијмәтләр спектрини тә'јин едән трансендент тәнликдир. k_{on} исә өз нөвбәсиндә чүтлүјү мүсбәт олан һалларын енержисини тә'јин едир.

Потенсиал чухурун диварлары кифајәт гәдәр һүндүр олдугда ($U_o \gg E$) $\arcsin\frac{\hbar k_o}{\sqrt{2mU_o}} \approx 0$ вә (31.7)-дән

$$k_{on} = n\frac{\pi}{l} \quad (31.8)$$

олур. $k_{on} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ олдуғундан, бахылан һалда зәррәчијин енержи спектри үчүн

$$E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2 k_{on}^2}{2m} = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2} \quad (n=1, 3, 5,...) \quad (31.9)$$

алыныр.

Чухурдан кәнарда (II областда) зәррәчијин һәрәкәтини тәсвир едән $\Psi_{II}(x)$ далға функсијасы (31.8) шәртиндә сыфра јахынлашыр, јә'ни U_o>>E оланда зәррәчик II областда ола билмир, I областын далға функсијасы исә

$$\int_{-l/2}^{l/2}\Psi_I^{(+)}(x)\Psi_I^{(+)}(x)dx = 1 = C_1^2\int_{-l/2}^{l/2}\cos^2 k_o x dx$$

нормаланма шәртиндән

$$\Psi_n^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\cos n\frac{\pi}{l}x \quad (31.10)$$

олур.

б) Инди дә икинчи хүсуси һала бахаг. Фәрз едәк ки, чухурун дахилиндә зәррәчијин һалы $\Psi_I(x) = -\Psi_I(-x) = C_2\sin k_o x$ тәк далға функсијасы илә тәсвир олунур. Онда x >0 областы үчүн

$$\Psi_I^{(-)}(x) = C_2\sin k_o x \quad (31.11)$$

$$\Psi_{II}(x) = Ae^{-æx} \quad (31.11')$$

олар. $x = \frac{l}{2}$ нөгтәсиндә $\Psi(x)$ вә $\Psi'(x)$ -ин кәсилмәзлик шәртиндән, јухардакына охшар олараг,

$$\operatorname{ctg}\frac{k_o l}{2} = -\frac{æ}{k_o} \quad (31.12)$$

алыныр. Ахырынчы бәрабәрлији квадрата јүксәлдиб $\sin\frac{k_o l}{2}$ -јә көрә һәлл етсәк,

$$\pm\sin\frac{k_o l}{2}=\frac{\hbar k_o}{\sqrt{2mU_o}}=\sin\left(\frac{\pi}{2}n-\frac{k_o l}{2}\right) \qquad (31.13)$$

тәнлији алынар, бурада n=2, 4, 6, ... там чүт гијмәтләр алыр. Гејд едәк ки, бурада n=0 ола билмәз, чүнки бу һалда $\Psi_l^{(-)}(x)=0$ олур. Бурадан k_o үчүн тамамилә (31.7)-нин үзәринә дүшән трансендент тәнлик алыныр.

$U_o>>E$ шәртиндә енержи вә далға функсијасынын спектрләри үчүн

$$\Psi_n^{(-)}(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x \qquad (31.14)$$

$$E_n^{(-)}=n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2ml^2}\quad (n=2,\ 4,\ 6,\ \ldots) \qquad (31.14')$$

ифадәләри алыныр.

Беләликлә, потенсиал чухурда зәррәчијин һәрәкәти ја (31.10), јахуд да (31.14) далға функсијалары илә тәсвир олунур. Зәррәчијин стасионар енержи сәвијјәләрини тә'јин едән k_o-ын спектри исә (31.6) вә (31,13) ифадәләри илә тә'јин олунур. Потенсиал чухур кифајәт гәдәр дајаз олдугда ($U_o\to 0$) (31.6) тәнлијинин һәмишә көкү вар, (31.13) тәнлијинин исә көкү јохдур ($\sin\alpha$ -нын хассәләриндән). Беләликлә, дүзбучаглы потенсиал чухурда зәррәчик һеч олмаса бир дискрет сәвијјәјә малик олур. Потенсиал чухур дәринләшдикчә k_o -ын көкләринин сајы артыр вә о, кифајәт гәдәр бөјүк ола билир. Сонсуз дәрин чухурда $U_o\to\infty$ исә енержи сәвијјәләринин гијмәти (31.9) вә (31.14′) ифадәләри илә верилир.

(31.10) вә (31.14) далға функсијаларынын ифадәләриндән көрүнүр ки, $x=\pm\frac{l}{2}$ оланда, һәр ики далға функсијасы сыфра бәрабәрдир. Демәли, потенсиал енержи сонсуз олан мүстәвиләрдә сәрһәд шәртләри, бу мүстәвиләрдә далға функсијасынын сыфра бәрабәр олмасы шәртинә кәтирир. Башга сөзлә $U(x)\to\infty$ оланда зәррәчик II областа нүфуз едә билмир: $\Psi_{II}(x)=Ae^{-æx}\to 0\ (x\to\infty)$. U_o сонлу олдугда исә зәррәчијин II областа нүфузетмә еһтималы сыфырдан фәргли олур ($æ$ - сонлудур). Далға функсијасына дахил олан A әмсалы (31.4) вә б) һалынын онлара ујғун тәнликләриндән C_1 вә C_2 әмсаллары илә тә'јин олунур.

Бүтүн бу тәһлилдән белә бир үмуми нәтичә чыхыр ки, квант механикасында зәррәчик сонлу фәзада сәрбәст һәрәкәт етдикдә онун һәрәкәти квантланыр – енержи вә импулсу дискрет гијмәтләр алыр.

Инди дә зәррәчијин $U(x,y,z)$ потенсиал саһәдә үч өлчүлү мәһдуд фәзада һәрәкәт етдији һала бахаг. Белә фәзаны, мәсәлән, өлчүләри l_1, l_2 вә l_3 олан паралелепипед гәбул едәк. Саһәнин $U(x,y,z)$ потенсиалынын паралелепипедин дахилиндә сыфыр, ондан харичдә сонсуз бөјүк гијмәтә малик олдуғуну гәбул едәк. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, бахылан һалда

$$E\Psi(x,y,z)=\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(x,y,z)\right)\Psi(x,y,z)\,. \qquad (31.15)$$

Шрединкер тәнлији (30.4) шәкилли үч хәтти тәнлијә парчаланыр.

Бу тәнликләрин һәллиндән зәррәчијин далға функсијасы

$$\Psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=\Psi_{n_1}(x)\Psi_{n_2}(y)\Psi_{n_3}(z) \qquad (31.16)$$

олур, бурада

$$\Psi_{n_1}(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{l_1}}\cos n_1\dfrac{\pi}{l_1}x, & n_1=1,3,5,\ldots\\[2mm] \sqrt{\dfrac{2}{l_1}}\sin n_1\dfrac{\pi}{l_1}x, & n_1=2,4,6,\ldots\end{cases} \qquad (31.17)$$

$\Psi_{n_2}(y)$ вә $\Psi_{n_3}(z)$ функсијаларынын ифадәләри (31.17)-дән n_1-и ујғун олараг n_2 вә n_3, x-и y вә z, l_1-и исә l_2 вә l_3 илә әвәз етмәклә алыныр. Зәррәчијин енержиси n_1, n_2 вә n_3 квант әдәдләри илә тә'јин олунур:

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{l_1^2}+\frac{n_2^2}{l_2^2}+\frac{n_3^2}{l_3^2}\right). \qquad (31.18)$$

Паралелепипедин хәтти өлчүләри бир-биринә бәрабәр дејилсә, ($l_1\neq l_2\neq l_3$) зәррәчијин квант һаллары чырлашмыр – енержинин һәр бир мүәјјән гијмәтинә јеканә бир далға функсијасы ујғун кәлир. Бу нәтичә потенсиал енержинин симметријасы илә әлагәдардыр. Потенсиал енержи һәр бир координат оху әтрафында 180° фырланмаја көрә инвариант галмадығындан системин һаллары чырлашмамыш олур.

Паралелепипедин хәтти өлчүләри ејни олдугда, јә'ни һәрәкәт өлчүләри $l_1=l_2=l_3=l$ олан кубун дахилиндә баш вердикдә, енержи

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) \qquad (31.19)$$

шәклинә дүшүр. Бу хүсуси һалда зәррәчијин һаллары чырлашмыш олур. Доғрудан да, 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=5 һаллары енержинин ејни бир гијмәтинә ујғун кәлир. Бундан башга n_1=3, n_2 =3, n_3 =3 һалы да енержинин һәмин гијмәтинә ујғундур. Бу әлавә симметрија саһәнин симметријасы илә јох, потенсиал енержинин координатлардан асылылыг характери илә әлагәдардыр. Белә әлавә чырлашма **тәсадүфи чырлашма** адланыр. Тәсадүфи чырлашмаја биз кәләчәкдә електронун сферик симметрик саһәдәки (Кулон саһәсиндәки) һәрәкәтини тәдгиг етдикдә l орбитал квант әдәдинә көрә алынан чырлашма шәклиндә тәсадүф едәчәјик. Бу чүр чырлашма јалныз Кулон саһәсиндәки һәрәкәтә хасдыр вә Кулон саһәсиндән һәр чүр кәнара чыхмалар l-ә көрә чырлашманы арадан көтүрүр (бах §89).

§ 32. КВАЗИКЛАССИК ЈАХЫНЛАШМА МЕТОДУ

Шрединкер тәнлијинин тәхмини һәллини тапмаг үчүн истифадә олунан методлардан бири дә квазиклассик методдур.

Билдијимиз кими классик механика квант механикасынын хүсуси бир һалыдыр. Квант механикасында енержи вә импулсун функсијасы олан истәнилән ифадә $h\to 0$ -да ујғун классик ифадәнин үзәринә дүшмәлидир. Буна көрә дә дәгиг һәлл олуна билмәјән квант тәнлијинин тәхмини һәлли h-ын үстлү сырасы шәклиндә ахтарыларса, h-ын үстүнүн сыфра бәрабәр олан һәдди, јәни ки, классик һәллин үзәринә дүшәр, h-ла мүтәнасиб олан һәдләр исә квант механикасынын дүзәлиши олар. Гејд едәк ки, Шрединкер тәнлијинин өзүнүн һәллини билаваситә h-ын үстлү сырасы шәклиндә ахтармаг мүмкүн дејил, чүнки координатларын икинчи тәртибли төрәмәси олан һәддә h-ын квадраты дахил олур. Бу исә онун һәлли үчүн даһа әлверишли јолун сечилмәсини тәләб едир.

Квант механикасы тәнликләриндән классик механика тәнликләринә кечидә һәср олунан §19-да квант механикасынын классик областы үчүн

$$\Psi(\vec{r},t) = ae^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r},t)} \qquad (32.1)$$

далға функсијасы дахил едилмишди. $S(\vec{r},t)$ – тә'сир функсијасыдыр.

Шрединкер тәнлијиндә Ψ-ни (32.1)-дән $S(\vec{r},t)$ илә әвәз етдикдә алынмыш тәнлији һәлл етмәклә бахылан областын далға функсијасыны тапмаг олар.

Доғрудан да, a-ны сабит гәбул едиб, (32.1)-и

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + V(r)\Psi \qquad (32.2)$$

Шрединкер тәнлијиндә јазанда, алынмыш (19.14) ифадәсиндән $S(\vec{r},t)$ үчүн

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\mu}(\vec{\nabla}S)^2 + V - \frac{i\hbar}{2\mu}\nabla^2 S = 0 \qquad (32.3)$$

тәнлијинә кәлирик.

(32.3)-дә h-ы сыфыра јахынлашдырсаг ($h\to 0$), мәшһур Јакоби-Һамилтон тәнлији алыныр:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\mu}(\vec{\nabla}S)^2 + V = 0 \quad \text{вә ја} \quad \frac{1}{2\mu}(\vec{\nabla}S)^2 - (E - V) = 0, \qquad (32.4)$$

бурада $-\dfrac{\partial S}{\partial t} = E$ енержинин классик ифадәсидир.

(32.3) вә (32.4) тәнликләринин мүгајисәсиндән көрүнүр ки, (32.3) квант тәнлијиндә $\hbar$ Планк сабити илә мүтәнасиб олан һәдд

$$(\vec{\nabla}S)^2 \gg \hbar\nabla^2 S \qquad (32.5)$$

шәрти өдәнилдикдә (32.4) классик тәнликдән алынан нәтиҹәјә кичик бир әлавә верәр. (32.5) шәрти илә тә'јин олунан јахынлашма *квазиклассик јахынлашма* адланыр.

Импулсун $\vec{p} = \vec{\nabla}S$ классик ифадәсиндән $\vec{\nabla}\vec{p} = \nabla^2 S$ олур. Онда (32.5) шәрти

$$p^2 \gg \hbar\vec{\nabla}\vec{p}$$

вә ја бир өлчүлү һәрәкәт үчүн

$$\left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp}{dx}\right| = \left|\frac{d}{dx}\left(\frac{\hbar}{r}\right)\right| = \left|\frac{d\lambda(x)}{2\pi dx}\right| \ll 1 \qquad (32.6)$$

шәклинә дүшүр, $\lambda = \dfrac{2\pi\hbar}{p}$ – де-Бројл далға узунлуғудур.

(32.6) шәртиндән көрүнүр ки, квазиклассик јахынлашма о заман тәтбиг олуна биләр ки, де-Бројл далға узунлуғу ја сыфыр вә ја да x-ә көрә чох зәиф дәјишмиш олсун.

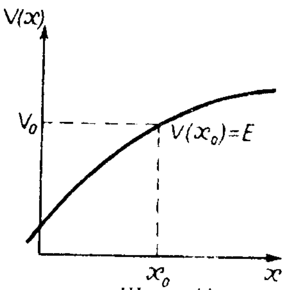
(32.4) Јакоби-Һамилтон тәнлијиндән

$$p(x) = \sqrt{2\mu(E - V(x))} \qquad (32.7)$$

олдуғундан (32.6) шәрти

$$\frac{\hbar}{p^2}\left|\frac{dp(x)}{dx}\right| = \frac{\hbar\mu}{p^3}\frac{dV(x)}{dx} = \left|\frac{\mu\hbar F}{p^3}\right| << 1 \qquad (32.8)$$

кими дә јазыла биләр, $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ –зәррәчијә тә'сир едән гүввәдир.



Шәкил 11

(32.7) вә (32.8) ифадәләриндән көрүнүр ки, импулсун чох кичик, хүсусән $p=0$ ($E=V(x)$) гијмәтиндә квазиклассик јахынлашма тәтбиг олуна билмир. Бу һалда зәррәчијин де-Бројл далғасынын узунлуғу сонсуз бөјүк олур вә онун далғавары хассәләри даһа кәскин бүрузә верир.

$p\to 0$ -да (32.8)-ин сол тәрәфи сонсузлуға јахынлашдығындан (32.8) шәрти кәскин позулур. Она көрә дә $E=V(x)$ нөгтәләри (шәкил 11) потенсиал чухурда вә ја потенсиал чәпәрдә гајытма нөгтәләри (классик мә'нада) адланыр (бах §30 вә 31) вә бу нөгтәләр әтрафында квазиклассик јахынлашмада алынмыш һәлләр хүсуси тәһлил тәләб едир.

Ашкар едилди ки, (32.3) гејри-бирчинс тәнлији һәлл етмәк она еквивалент бирчинс Шрединкер тәнлијини һәлл етмәкдән хејли чәтиндир Лакин, Вентсел, Крамер вә Бруллен S-ин $\hbar$-а көрә үстлү сырасында $\hbar$-ын биринчи дәрәчәси илә мүтәнасиб олан һәдләри сахламаг дәгиглији илә (32.3) тәнлијини һәлл едә билмишләр. Онларын алдыглары һәлл квант механикасынын бир сыра мәсәләләринин тәдгиги үчүн јарарлы олмушдур. Мүәллифләрин адыны дашыјан бу *ВКБ-методу* јалныз бир өлчүлү мәсәләләрин һәллинә тәтбиг олуна билир.

(32.3) тәнлијинин һәлли

$$S = S_o + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \ldots \qquad (32.9)$$

сырасы шәклиндә ахтарылыр. Бу сыраны (32.3)-дә јазандан сонра $\hbar$-ын үстләринә көрә алынан сыранын сыфра бәрабәр олмасы үчүн $\hbar$-ын һәр бир үстүнә ујғун әмсал сыфра бәрабәр олмалыдыр. Онда

$$\begin{aligned}
&(\vec{\nabla}S_o)^2 + 2\mu(V-E) = 0 \\
&\vec{\nabla}S_o\vec{\nabla}S_1 + \frac{1}{2}\nabla^2 S_o = 0 \qquad\qquad (32.10) \\
&\vec{\nabla}S_o\vec{\nabla}S_2 + \frac{1}{2}\nabla^2 S_1 + \frac{1}{2}(\vec{\nabla}S_1)^2 = 0 \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}$$

тәнликләр системи алыныр. Бу систем ардычыл јахынлашма јолу илә һәлл олунур. Әввәлчә биринчи тәнликдән S_0 тапылыр, ону икинчи тәнликдә јазмагла S_1 һесабланыр вә и.а. Бу шәкилдә тапылмыш S-ин ифадәсини (32.1) јазараг мәсәләнин һәлли тапылыр. Бу методун үстүн чәһәти ондан ибарәтдир ки, сыфырынчы вә биринчи јахынлашма дәгиглији илә тапылан далға функсијасы бир чох һалларда бахылан системин далға функсијасына хејли јахын олур.

Зәррәчијин һәрәкәт областыны E-нин $V(x)$-дән кичик вә бөјүк гијмәт алмасындан асылы олараг ики области бөләк. $E=V(x)$ нөгтәсини исә $x=x_o$ илә ишарә едәк. Башга сөзлә, $x<x_o$ -да $E>V(x)$, $x>x_o$ - да $E<V(x)$ вә $x=x_o$ -да $E=V(x_o)$ көтүрәк.

Әввәлчә $x<x_o$ областында (32.10) системини һәлл едәк*. Системин биринчи тәнлијиндән (32.7) -ә әсасән

$$\left(\frac{dS_o}{dx}\right)^2 = 2\mu(E-V(x)) = p^2 \quad \text{вә ја} \quad \frac{dS_o}{dx} = \pm p(x)$$

олдуғундан, бу тәнлијин һәлли

$$S_o = \pm\int_x^{x_o} p(x)dx \qquad (32.11)$$

олар. Ејнилә икинчи тәнликдә $\frac{dS_o}{dx} = p(x)$ вә $\frac{d^2S_o}{dx^2} = \frac{dp(x)}{dx}$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{1}{2p(x)}\frac{dp(x)}{dx}$$

вә

$$S_1 = -\frac{1}{2}\ln p(x) + \ln C$$

алынар. Беләликлә, бу јахынлашмада

$$S = S_o + \frac{\hbar}{i}S_1(x) = \pm\int_x^{x_o} p(x)dx + i\hbar\ln\sqrt{p(x)} + C$$

S-ин бу гијмәтини (32.1) -дә јазыб, $e^{-\ln\sqrt{p}} = \frac{1}{\sqrt{p}}$ олдуғуну нәзәрә алсаг, $x<x_o$ областында $\Psi(x)$ далға функсијасы үчүн

---

* Адәтән (32.10) системинин һәллиндә сыфырынчы вә биринчи јахынлашма илә кифајәтләнирләр.

$$\Psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{p}}e^{-\frac{i}{h}\int_x^{x_o}p(x)dx}+\frac{C_2}{\sqrt{p}}e^{\frac{i}{h}\int_x^{x_o}p(x)dx} \qquad (32.12)$$

ифадәси алыныр.

Зәррәчијин координатынын x, $x+dx$ интервалында гијмәт алма еһтималы

$$|\Psi(x)|^2dx=\frac{|C_1|^2}{p(x)}dx \qquad (32.13)$$

онун импулсу илә тәрс мүтәнасибдир, јә'ни импулсу вә ја сүр'әти кичик олан нөгтәләрдә зәррәчијин мүшаһидә олунма еһтималы бөјүкдүр. Демәли бу нөгтәләрдә зәррәчик даһа јаваш һәрәкәт едир. Лакин $x=x_o$ нөгтәсиндә $p=\sqrt{2\mu(E-V(x_o))}=0$ олдуғундан далға функсијасы сонсузлуға јахынлашыр, јә'ни квазиклассик јахынлашма бурада өз мә'насыны итирир. Бу нөгтәләрдә классик зәррәчик дајаныр вә әкс истигамәтдә һәрәкәт етмәјә башлајыр. Она көрә дә бу нөгтәләр гајытма нөгтәләри адланыр. Гајытма нөгтәләри классик һәрәкәт мүмкүн олан областы классик һәрәкәт мүмкүн олмајан областдан ајырыр.

Доғрудан да, $x>x_o$ областында зәррәчијин E енержиси $V(x)$ потенсиал енержидән кичик олдуғундан $p(x)$ классик импулсу хәјалы гијмәт алыр:

$$p=\pm\sqrt{2\mu(E-V(x))}=\pm i|p(x)|.$$

Бу һалда (32.12) далға функсијасы

$$\Psi(x)=\frac{C_1'}{\sqrt{|p(x)|}}e^{-\frac{1}{h}\int_{x_o}^{x}p(x)\,dx}+\frac{C_2'}{\sqrt{|p(x)|}}e^{\frac{1}{h}\int_{x_o}^{x}p(x)\,dx} \qquad (32.14)$$

шәклини алыр. x бөјүдүкдә бу һәлләрдән биринчиси азалан, икинчиси исә артан функсија олур.

(32.12) вә (32.14) һәлләри Шрединкер тәнлијинин классик област үчүн тәхмини һәлләридир. (32.12) һәллин x-ә көрә дәјишмә характери зәррәчијин потенсиал чухурда һәрәкәтини, (32.14) һәлли исә потенсиал чәпәрдән кечдији һәрәкәти тәсвир едән далға функсијасынын дәјишмә характерини хатырладыр. Беләликлә, потенсиал енержинин мүхтәлиф шәклә малик олмасы функсијанын дәјишмә характеринә тә'сир етмир, о, јалныз E илә $V(x)$-ин фәргиндән асылы олур.

(32.12) вә (32.14) функсијалары ејни бир (32.2) тәнлијинин $x<x_o$ вә $x>x_o$ областларына ујғун олдуғундан, јәгин ки, C_1, C_2 вә C'_1, C'_2 сабитләри арасында да мүәјјән әлагә олмалыдыр. Бу әлагә исә јалныз $\Psi(x)$ функсијаларынын вә онларын биринчи төрәмәләринин бу областларын $x=x_o$ сәрһәддиндә бир-биринә бәрабәр олмасы шәртләриндән тапыла биләр. Лакин һәмин функсијалар $p^2(x)$-ин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә, јә'ни $x=x_o$ нөгтәсиндән хејли аралы областларда тәнлијин јахшы тәхмини һәлли олур.

$x=x_o$ нөгтәсинин јахын әтрафында исә $p^2(x)\to 0$ јахынлашдығындан $\frac{1}{\sqrt{p(x)}}$ вуруғу һесабына һәр ики һәлл сонсузлуға јахынлашыр вә өз физики маһијјәтини итирир. Она көрә дә C_1, C_2 вә C'_1, C'_2 сабитләри арасындакы әлагәни мүәјјән етмәк үчүн Шрединкер тәнлијинин $x=x_o$ нөгтәсинин јахын әтрафында кифајәт гәдәр дәгиг һәллини тапыб, онун $x\le x_o$ -да (32.12), $x\ge x_o$-да исә (32.14) һәллинин үзәринә дүшдүјүнү көстәрмәк лазымдыр.

Бу, $V(x)$ потенсиал функсијанын $x=x_o$ нөгтәсинин јахын әтрафында $(x-x_o)$ фәргинин үстләринә көрә сыраја ајырмагла әлдә едилир:

$$V(x)=V(x_o)+(x-x_o)\frac{\partial V(x)}{\partial x}\Big|_{x=x_o}+\ldots$$

$V(x)$ -ин бу ифадәсини (32.2) тәнлијиндә јазыб, сыранын биринчи ики һәдди илә кифајәтләнсәк,

$$\frac{h^2}{2\mu}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}+\left[E-V(x_o)-(x-x_o)V'(x_o)\right]\Psi(x)=0 \qquad (32.15)$$

алынар. Бурада $E=V(x_o)$ олдуғуну нәзәрә алдығдан сонра $F=-V'=e\mathcal{E}$ вә $-x_oV'(x_o)=E$ көтүрсәк, (32.15) тәнлији зәррәчијин бирчинс електрик саһәсиндә һәрәкәтини тәсвир едән (бах §45).

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2}+e\mathcal{E}x\Psi(x)=E\Psi(x)$$

тәнлијинин үзәринә дүшүр (бах (45.2) тәнлији).

§45 көстәрилир ки, бу тәнлијин Ејри функсијалары илә ифадә олунмуш һәлли x_o нөгтәсинин сағында һәмин §-ын (45.10), солунда исә (45.12) функсијалары үзәринә дүшүр:

$$\frac{A}{\sqrt{\pi}}\int_0^x \cos(\xi z+\frac{z^3}{3})dz=\begin{cases}\dfrac{A}{2\xi^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} & \xi>>1,\ (x>x_o)\\ \dfrac{A}{|\xi|^{1/4}}\sin\left[\dfrac{2}{3}|\xi|^{3/2}+\dfrac{\pi}{4}\right], & \xi<<1,\ (x<x_o)\end{cases} \qquad (32.16)$$

бурада

$$\xi=(\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2})^{1/3}(x-\frac{E}{e\mathcal{E}}).$$

(32.12) вә (32.14) һәлләринин ξ-нин ујғун гијмәтләриндә (32.16) һәлләринин үзәринә дүшдүјүнү көстәрмәк үчүн $|p(x)|$ вә $p(x)$ функсијаларыны $x=x_o=\dfrac{E}{e\mathcal{E}}$ нөгтәси јахынлығында $(x-x_o)$-ын үстләринә көрә сыраја ајыраг.

Әввәлчә (32.14)-үн азалан һәллинин ξ >>1-дә вә јахуд $x>x_o$ областында (32.16)-дакы биринчи һәллин үзәринә дүшдүјүнү көстәрәк. Бу һалда (32.14)-дәки артан һәллин квант механикасында физики маһијјәти олмадығыны нәзәрә алсаг, $C'_2=0$ көтүрүлмәлидир. $x=x_o$ нөгтәсинин јахын әтрафында $V(x_o)x_o=e\mathcal{E}$ вә $x_o=\dfrac{E}{e\mathcal{E}}$ олдуғундан

$$|p(x)|=\sqrt{2\mu(V(x)-E)}\approx\sqrt{2\mu e\mathcal{E}(x-x_o)}=(2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/3}\xi^{1/2}$$

олур. Онда

$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_o}^{x}|p(x')|dx'\approx\int_{x_o}^{x}\sqrt{\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2}(x'-x_o)}\,dx'=\int_o^{\xi}\xi^{1/2}d\xi=\frac{2}{3}\xi^{3/2}.$$

Буну (32.14)-дә јазанда

$$\Psi(x)=\frac{C'_1}{(2\mu e\hbar\mathcal{E})^{1/6}\xi^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}},\qquad \xi>>1 \qquad (32.17)$$

алыныр. (32.17)-нин (32.16) илә мүгајисәсиндән

$$C'_2=0,\ \ C'_1=(2\mu e\hbar\mathcal{E})^{1/6}\frac{A}{2}$$

олмалыдыр.

Тәнлијин $x<x_o$ областына давамы олан (32.12) һәллинин ξ<<–1-дә (32.16)-дакы икинчи һәллин үзәринә дүшдүјүнү көстәрәк.

$$p(x)=\sqrt{2\mu(E-V(x))}\approx\sqrt{2\mu e\mathcal{E}(x-x_o)}=(2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/3}\xi^{1/2}$$

олдуғундан

$$\frac{1}{h}\int_x^{x_o}p(x')dx'\approx-\int_{x_o}^{x}\sqrt{\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2}(x'-x_o)}\,dx'=-\int_o^{\xi}\xi^{1/2}d\xi=-\frac{2}{3}|\xi|^{3/2} \qquad (32.18)$$

олур. Буну (32.12)-дә јазанда

$$\Psi(x)=\frac{1}{(2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/6}|\xi|^{1/4}}\left[C_1e^{i\frac{2}{3}\xi^{3/2}}+C_2e^{i\frac{2}{3}\xi^{3/2}}\right] \qquad (32.19)$$

алыныр. Бунун (32.16)-дакы икинчи һәлл илә мүгајисәсиндән ξ<<–1 вә ја $x<x_o$ -да

$$C_1=(2\mu e\hbar\mathcal{E})^{1/6}\frac{A}{2}e^{-i\frac{\pi}{4}}=C'_1e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

$$C_2=-(2\mu e\hbar\mathcal{E})^{1/6}\frac{A}{2i}e^{i\frac{\pi}{4}}=C'_1e^{i\frac{\pi}{4}} \qquad (32.20)$$

олур. (32.18) (32.20) бәрабәрликләриндән

$$\Psi(x)=\frac{1}{2\sqrt{p}}\sin\left[\frac{1}{h}\int_{x_o}^{x}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right] \qquad \xi<<-1$$

вә

$$\Psi(x)=\frac{1}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{h}\int_{x_o}^{x}p(x')dx'} \qquad \xi>>1 \qquad (32.21)$$

һәлләринин (32.16) һәлләри үзәринә дүшдүјү алыныр.

Ејни шәкилдә көстәрмәк олар ки, $x>x_o$ областында (32.14) експоненсиал артан

$$\Psi(x)=\frac{C'_2}{\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{h}\int_{x_o}^{x}|p(x')|dx'} \qquad (32.22)$$

һәллинин $x < x_0$ областына давамы

$$\Psi(x)=\frac{1}{\sqrt{p}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right],\quad \xi<<-1 \qquad (32.22')$$

олур.

Квазиклассик јахынлашманын тәтбиғинә бир мисал олараг, ихтијари шәкилли потенсиал чәпәрдән зәррәчикләрин кечмәсинә (туннел еффекти) бахаг.

§ 33. ИХТИЈАРИ ШӘКИЛЛИ ПОТЕНСИАЛ ЧӘПӘРДӘН ЗӘРРӘЧИЈИН КЕЧМӘСИ (ТУННЕЛ ЕФФЕКТИ)

Фәрз едәк ки, E енержили зәррәчик $V(x)$ потенсиал чәпәрин (бах шәкил 6) саһәсиндә x охунун мүсбәт истигамәтиндә һәрәкәт едир. E енержиси $V(x)$ -ин максимум гијмәтиндән кичикдирсә, белә һәрәкәтдә ики гајытма нөгтәси мејдана чыхдығындан һәрәкәт саһәси I, II вә III кими үч обласла ајрылыр.

$$-\infty<x<x_1 \qquad \text{вә} \qquad x_2<x<\infty$$

интервалларына ујғун I вә III областларда $E > V(x)$, $x_1 \le x \le x_2$-јә ујғун областда исә $E < V(x)$ олур. x_1 вә x_2 гајытма нөгтәләриндә исә $V(x_1)=V(x_2)=E$ шәрти өдәнилир.

x-ин $-\infty < x < x_1$ дәјишмә интервалына ујғун I областда дүшән вә чәпәрдән әкс олунан ики далға јајылыр. Бу областда $E>V(x)$ вә $\xi<<-1$ олдуғундан Шрединкер тәнлијинин I област үчүн һәлли, квазиклассик јахынлашма методу илә алынан вә $\xi<<-1$-ә ујғун (32.22) вә (32.22') һәлләринин суперпозисијасы олар:

$$\Psi_I(x)=\frac{A}{\sqrt{p}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right]+\frac{B}{\sqrt{p}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right]. \qquad (33.1)$$

Бурада Ејлер дүстурларынын көмәји илә $\Psi_I(x)$-и експоненсиал функсијаларла ифадә етсәк:

$$\Psi_I(x)=\frac{1}{\sqrt{p}}\left(\frac{B}{2}-\frac{A}{2i}\right)e^{-i\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right]}+\frac{1}{\sqrt{p}}\left(\frac{B}{2}+\frac{A}{2i}\right)e^{i\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right]} \qquad (33.2)$$

олар. Бу вә ја башга областда зәррәчијин олма еһтималы бизи марагландырмыр, чүнки чәпәрин шәффафлыг вә әкс етмә әмсаллары ујғун об-

ластларда зәррәчикләр селләринин нисбәти илә тә'јин олунур (бах (30.15) вә (30.20)). Бу сәбәбдән дүшән далғанын амплитудуну ваһид көтүрмәк олар:

$$\frac{B}{2}-\frac{A}{2i}=1;\quad \frac{B}{2}+\frac{A}{2i}=B_1 \qquad (33.3)$$

Бурада B_1–јени сабитдир. (33.3)-дән

$$A=i(B_1-1),\quad B=B_1+1 \qquad (33.4)$$

вә

$$\Psi_I(x)=\frac{1}{\sqrt{p}}e^{-i\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right]}+\frac{B_1}{\sqrt{p}}e^{i\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}\right]} \qquad (33.4')$$

II областда $E<V(x)$ вә чәпәрин ени сонлу олдуғундан, бу областда Шрединкер тәнлијинин һәлли $\xi >> 1$ шәртинә ујғун һәм експоненсиал азалан (32.21) вә һәм дә експоненсиал артан (32.22) һәлләринин суперпозисијасы олмалыдыр:

$$\Psi_{II}(x)=\frac{A}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}p(x')dx'}+\frac{B}{2}e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}p(x')dx'}.$$

$x=x_1$ нөгтәсиндә далға функсијанын кәсилмәзлији шәртинә әсасән A вә B үчүн (33.4) илә верилмиш гијмәтләр сахлана биләр. Онда

$$\Psi_{II}(x)=\frac{i(B_1-1)}{2\sqrt{|p|}}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}p(x')dx'}+\frac{B_1+1}{\sqrt{|p|}}e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}p(x')dx'}, \qquad (33.5)$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}|p(x')|dx'+\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2}|p(x')|dx'=\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}p(x)dx=\alpha$$

бәрабәрлијиндән

$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}|p(x')|dx'=\alpha-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2}|p(x')|dx'=\alpha-\frac{1}{\hbar}\left|\int_{x_2}^{x}p(x')dx'\right|$$

олдуғуну нәзәрә алсаг, II областдакы (33.5) һәлли

$$\Psi_{II}(x)=\frac{i(B_1-1)}{2\sqrt{|p|}}e^{-\alpha}e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x}p(x')dx'}+\frac{B_1+1}{\sqrt{p}}e^{\alpha}e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x}p(x')dx'}$$

шәклинә дүшәр.

III областда далға јалныз x охунун мүсбәт истигамәтиндә јајылыр, онда гајыдан дalғанын амплитуду исә сыфыр олур. Она көрә дә бу областда Шрединкер тәнлијинин һәлли

$$\Psi_{III}(x)=\frac{A_3}{\sqrt{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_2}^{x}p(x')dx'+\frac{\pi}{4}} \qquad (33.6)$$

олар. Јәгин ки, бу далғанын амплитуду ихтијари ола билмәз, чүнки (33.6) һәлли II обласга ујғун (33.5) һәлләринин III областа аналитик давамы олмалыдыр. $e^{i\frac{\pi}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)$ олдуғундан (33.5) вә (33.6) һәлләринин әмсаллары арасында

$$A_3=\frac{i}{2}(B_1-1)e^{-\alpha}, \qquad (33.7)$$

$$i\frac{A_3}{2}=(B_1+1)e^{\alpha}$$

бәрабәрликләри өдәнилмәлидир. (33.7)-дән

$$A_3=\frac{1}{i(e^{\alpha}+\frac{1}{4}e^{-\alpha})},\quad B_1=\frac{\frac{1}{4}e^{-\alpha}-e^{\alpha}}{e^{\alpha}+\frac{1}{4}e^{-\alpha}} \qquad (33.8)$$

олур.

Дүшән далғанын амплитуду ваһид көтүрүлдүјүндән потенсиал чәпәрин шәффафлыг әмсалы §30 әсасән

$$D=|A_3|^2=\frac{1}{(e^{\alpha}+\frac{1}{4}e^{-\alpha})^2} \qquad (33.9)$$

бәрабәрдир. Практикада адәтән тәсадүф олунан $\alpha>>1$ һалларда чәпәрин шәффафлыг әмсалы үчүн

$$D\approx e^{-2\alpha}=e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}p(x)dx}=e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2\mu(V(x)-E)}dx} \qquad (33.10)$$

ифадәси алыныр. Көрүндүјү кими, бу ифадә квант нәзәријјәсиндә алынан (30.34) ифадәси үзәринә дүшүр.

Ејни шәкилдә чәпәрдән әксетмә әмсалы §30 әсасән

$$R=|B_1|^2=\left(\frac{\frac{1}{4}e^{-\alpha}-e^{\alpha}}{e^{\alpha}+\frac{1}{4}e^{-\alpha}}\right)^2. \qquad (33.11)$$

Јухарыдакы јахынлашмада

$$R\approx 1-e^{-2\alpha} \qquad (33.12)$$

олар. (33.11) вә (33.12) ифадәләриндән көрүнүр ки, $\alpha>>1$-дә чәпәрин шәффафлыг әмсалы илә әксетмә әмсалынын чәми тәхминән ваһидә бәрабәрдир:

$$D+R\approx 1. \qquad (33.13)$$

α-ны сонсузлуға вә $\hbar$-ы сыфра јахынлашдырмагла($\alpha\to\infty, \hbar\to 0$) там классик областа кечсәк, чәпәрин D шәффафлыг әмсалы сыфра, әксетмә әмсалы исә ваһидә јахынлашыр, јә'ни $E < V(x)$ енержили зәррәчикләр чәпәрдән кечә билмир.

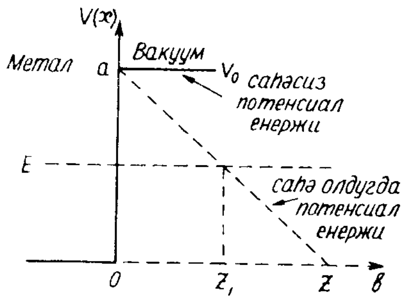
§ 34. СОЈУГ ЕМИССИЈА

(33.10)-дан истифадә едәрәк металдан сојуг емиссија чәрәјаныны һесаблајаг.

Туннел еффекти нәзәријјәси нүвә физикасында радиоактивлијин вә металларын мүхтәлиф хассәләринин изаһы вә баша дүшүлмәси истигамәтиндә мүһүм рол ојнамышдыр. Сојуг емиссија һадисәси – електрик саһәси васитәсилә металдан електронларын гопарылмасы – белә һадисәләр сырасындандыр.

§44-дән көрүндүјү кими, електронлара металын дахилиндә периоду кристал гәфәсин периодуна бәрабәр периодик саһә тә'сир едир. Лакин металларын јүксәк електрик кечиричилијинә малик олмасы вә башга һадисәләр металын дахилиндә електронларын һәрәкәтинин куја һәр һансы сабит саһәнин тә'сири алтында баш вердијинә дәлаләт едир.

Билдијимиз кими ихтијари кәмијјәтин сабит гијмәти, онун һесабат башланғычы мә'насында, сыфыр гәбул едилә биләр. Бу мә'нада металын дахилиндә електронун потенсиал енержисини сыфра бәрабәр көтүрмәк вә електронларын металын кристалик гәфәси дахилиндә сәрбәст һәрәкәт етдијини гәбул етмәк олар. Електронлар металын кәнарына јахынлашанда исә кристал гәфәсин дүјүн нөгтәләриндә јерләшән мүсбәт ионларын јаратдығы чәзбетмә гүввәсинә мә'руз галыр вә бу гүввә онларын металдан кәнара чыхмасына мане олур. Електрону металдан гопармаг үчүн она мүәјјән гәдәр енержинин верилмәси лазым кәлир вә бу енержи електронун *чыхыш иши* адланыр. Беләликлә, металын дахилиндә електронун потенсиал енержиси $V(x)=0$, кәнарында исә сабит гијмәтә ($V(x)=V_o$) бәрабәр көтүрмәк олар (шәкил 12).



Шәкил 12. Електронларын металдан сојуг емиссијасы.

Металын дахилиндәки електрон газыны гыздырмагла, електронларын кинетик енержисини артырсаг, енержиси потенсиал чәпәрин енержисиндән (чыхыш ишиндән) бөјүк олан електронлар металдан кәнара истигамәтләнмиш чәрәјан јарадар. Термоемиссија адланан бу һадисә електрон лампаларында електрон дәстәләрини алмаг үчүн истифадә олунур. Лакин алчаг температурларда (һәтта $T=0$ мүтләг сыфырда belә) металын сәтһинә јөнәлмиш сабит електрик саһәси васитәсилә металдан кәнара јөнәлмиш чәрәјан алмаг олар.

Металын сәтһинә јөнәлмиш $\vec{\mathcal{E}}$ сабит електрик саһәсинин һесабына електронун V_o потенсиал енержисинә $-\,e\mathcal{E}z$ потенсиал енержи әлавә олунур (e–електронун јүкү)

$$V(z)=0 \qquad z<0, \qquad\qquad (34.1)$$
$$V(z)=V_o-e\mathcal{E}z \qquad z>0.$$

Бу һалда потенсиал енержинин z-дән асылылығы OaZ әјриси илә сәчијјәләнир (шәкил 12). Шәкилдән көрүнүр ки, електрик саһәсинин тә'сири алтында сонлу енә малик потенсиал чәпәр јараныр. Класик механикаја көрә јалныз енержиси $E>V_o$ олан електронлар металдан кәнара чыха биләр. Лакин белә електронларын сајы чох чүз'и олдуғундан харичи електрик саһәси һисс олуна биләчәк чәрәјан јарада билмир. Квант механикасына көрә исә туннел еффекти һесабына сонлу енә малик чәпәрдән електронлар кечә биләр вә онун шәффафлыг әмсалы

$$D=e^{-\frac{2}{\hbar}\int_{z_1}^{z_2}\sqrt{2\mu(V(z)-E)}\,dz} \qquad (34.2)$$

олар.

Шәкилдән көрүнүр ки, потенсиал чәпәр ики гајытма нөгтәсинә маликдир. Онлардан бири $z_1=0$, икинчиси исә $z=z_1$ нөгтәсиндәдир вә бу нөгтәнин вәзијјәти

$$V_o-e\mathcal{E}z_1=E$$

шәртиндән тапылыр:

$$z_1=\frac{V_o-E}{e\mathcal{E}}, \qquad (34.3)$$

бурада E – електронун сүр'әтинин z оху истигамәтиндә јөнәлмиш компонентинә уйғун енержи

$$E=\frac{\mu\upsilon_z^2}{2}=\frac{p_z^2}{2\mu},$$

z_1 исә чәпәрин енидир.

(34.2)-дә $V(z)$-и онун (34.3)-дәки гијмәти илә әвәз етсәк,

$$D=e^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^{z_1}\sqrt{2\mu(V_o-E-e\mathcal{E}z)}\,dz}$$

олар.

Електронларын сојуг емиссија чәрәјаны сыхлығы

$$j=e\int\upsilon_z D\,dn \qquad (34.4)$$

дүстуру илә һесабланар, бурада dn – импулсу импулс фәзасынын $dp_x\,dp_y\,dp_z$ елементиндә гијмәт алан ваһид һәчмдәки електронларын сајыдыр. Електронларын металын дахилиндәки һәрәкәти потенсиал чухурдакы һәрәкәтә бир мисал олдуғундан, бурада зәррәчијин импулсу дискрет дәјишәр (бах (11.20))

$$p_x=\frac{2\pi\hbar}{L}n_1,\;\; p_y=\frac{2\pi\hbar}{L}n_2,\;\; p_z=\frac{2\pi\hbar}{L}n_3. \qquad (34.5)$$

n_1, n_2, n_3 – там мүсбәт әдәдләр, L – һәрәкәт баш верән фәзанын хәтти өлчүсүдүр.

(34.5)-дән

$$\Delta p_x\Delta p_y\Delta p_z=\frac{(2\pi\hbar)^3}{L^3}\Delta n_1\Delta n_2\Delta n_3$$

вә ја

$$\Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \Delta n = \frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3} \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \tag{34.6}$$

олур.

Електронлар Ферми–Дирак статистикасына табе олдуғундан металын дахилиндәки електрон газы Ферми газ адланыр. Газын әсас һалда олдуғуну фәрз етсәк, електронлар, Паули принсипинә көрә, N ашағы енержи сәвијјәсини тутмуш олар (N–електронларын үмуми сајы). Тутулмуш сәвијјәләрдән ән јүксәјинин енержисини ε илә ишарә етсәк, бүтүн електронлар импулс фәзасында $\frac{p^2}{2\mu} = \varepsilon$ вә ја $p = \sqrt{2\mu\varepsilon}$ радиуслу сферанын (Ферми сәтһинин) дахилиндә јерләшәр. Фәзанын өлчүләрини кифајәт гәдәр бөјүк, L^3=1 гәбул едиб, импулсу dp_x dp_y dp_z фәзасында гијмәт алан вә координат охларынын һәр ики истигамәтиндә һәрәкәт едән електронларын

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \leq 2\mu\varepsilon \tag{34.7}$$

сферасы дахилиндәки сајы

$$dn = 2\frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3},$$

сферанын кәнарында исә dn=0 олар.

Импулс фәзасында силиндрик координатлара кечәк:

$$p_x = \rho\cos\varphi, \;\; p_y = \rho\sin\varphi, \;\; p_z = p_z.$$

Онда (34.7) бәрабәрсизлији

$$\rho^2 + p_z^2 \leq 2\mu\varepsilon \tag{34.8}$$

вә һәчм елементи $dp_x\, dp_y\, dp_z = \rho\, d\rho\, d\varphi\, dp_z$ олдуғундан (34.4) интегралы

$$j = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3} 2\pi \int_o^{\sqrt{2\mu\varepsilon}} dp_z \int_o^{\sqrt{2\mu\varepsilon - p_z^2}} \rho\left(\frac{p_z}{\mu}\right) D d\rho \tag{34.9}$$

олар. Бурада

$$\xi = \varepsilon - E, \;\; \left(E = \frac{p_z^2}{2\mu}\right)$$

кими јени дәјишән дахил едәк. Бу һалда (34.9) интегралы садәләшир:

$$j = \frac{4\pi e\mu}{(2\pi\hbar)^3} \int_o^{\varepsilon} \xi D(\xi) d\xi. \tag{34.10}$$

Чәпәрин шәффафлыг әмсалы исә

$$D(\xi) = e^{-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar e\mathcal{E}}(V_o - \varepsilon + \xi)^{3/2}} \tag{34.11}$$

олур.

(34.11)-дән, көрүнүр ки, ξ=0-да вә ја електронун енержисинин максимум ε гијмәтиндә $D(\xi)$ максимум олур, ξ артдыгча $D(\xi)$ кәскин азалыр. Демәли, (34.11)-дәки интеграл јалныз кичик енержили електронлар үчүн һисс олуначаг гијмәтә малик олур. Бу сәбәбдән $(V - \varepsilon + \xi)^{3/2}$ вуруғуну ξ-нин үстләринә көрә сыраја ајырыб, биринчи ики һәдлә кифајәтләнмәк олар:

$$(V - \varepsilon + \xi)^{3/2} = (V_o - \varepsilon)^{3/2} + \frac{3}{2}(V_o - \varepsilon)^{1/2}\xi + \ldots$$

Бурада

$$2\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar e\mathcal{E}}(V_o - \varepsilon)^{3/2} = \alpha$$

гәбул едилсә,

$$D(\xi) = e^{-\frac{2}{3}\alpha} \cdot e^{-\frac{\alpha\xi}{V_o - \varepsilon}}$$

олар. Буну (34.10)-да јазсаг,

$$j = \frac{4\pi e\mu}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{3}{2}\alpha \int_o^{\varepsilon} \xi e^{-\frac{\alpha\xi}{V_o - \varepsilon}} d\xi}$$

алынар. ξ бөјүдүкчә интеграл алты ифадә кәскин азалдығындан интегралын јухары сәрһәддини, бөјүк хәта бурахмадан, сонсуз көтүрмәк олар. Онда

$$j = \frac{4\pi e\mu}{2\pi^2\hbar^3} \frac{(V_o - \varepsilon)^2}{\alpha^2} e^{-\frac{2}{3}\alpha},$$

јахуд j чәрәјан сыхлығы

$$j = \frac{2\mu e(V_o - \varepsilon)^2}{9\pi^2\hbar^3}\frac{\varepsilon_o^2}{\mathcal{E}^2}e^{-\frac{\varepsilon_o}{\mathcal{E}}} \tag{34.12}$$

кими дә јазыла биләр. Бурада $\varepsilon_o = \frac{4\sqrt{2\mu}(V_o - \varepsilon)^{3/2}}{3\hbar e}$.

Чәрәјан сыхлығынын харичи саһәнин $\mathcal{E}$ интенсивлијиндән бу чүр асылылығы тәчрүбәдә там тәсдиг олунур вә тәчрүбәјә ујғун олараг бурадан чыхыр ки, $\mathcal{E}$~10^6 *В/см* олдугда, сојуг емиссија мүшаһидә олуна биләр.

§ 35. ХӘТТИ ҺАРМОНИК ОССИЛЈАТОР (КООРДИНАТ ТӘСВИРИ)

Классик физикада һармоник оссилјатор дедикдә зәррәчијин јерләјишмәси илә мүтәнасиб олан*

$$F = -kx \tag{35.1}$$

гүввәнин тә'сири алтында һәрәкәт баша дүшүлүр, бурада k – еластиклик әмсалы, F исә квазиеластиклик гүввәси адланыр. Бу гүввәнин тә'сири алтында күтләси m олан зәррәчијин һәрәкәтини тәсвир едән классик тәнлик (Нјутон тәнлији)

$$m\ddot{x} = -kx \tag{35.2}$$

олар. $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ көтүрсәк, (35.2) тәнлији

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \tag{35.2'}$$

шәклинә дүшүр. Онун һәлли

$$x = a\cos\omega t. \tag{35.3}$$

Бурада a вә ω замандан асылы олмајан сабит кәмијјәтләрдир. (35.3) ифадәси зәррәчијин x=0 таразлыг нөгтәси (координат башланғычы) әтрафында баш верән вә амплитуду a, тезлији ω олан рәгси һәрәкәти тәсвир едир. Белә рәгсләрә һармоник рәгсләр дејилир. Демәли, һәрәкәти мүддәтиндә амплитуду вә тезлији сабит галмаг шәрти илә рәгси һәрәкәт едән ихтијари системә һармоник оссилјатор кими бахмаг олар.

Системин потенсиал функсијасы (енержиси) илә ујғун тә'сир гүввәси арасындакы

---

* Бурада бүтүн мүлаһизәләр хәтти оссилјатор үзәриндә гурулачагдыр. Үчөлчүлү оссилјаторун нәзәријјәси исә §43-дә верилир.

$$F = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \tag{35.4}$$

мүнасибәтдән

$$U(x) = -\int_o^x F dx = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{35.5}$$

алынар.

Демәли, классик физикада хәтти һармоник оссилјаторун

$$H = K(p) + U(x)$$

Һамилтон функсијасы

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{35.6}$$

шәклиндә олур.

Гејд едәк ки, ихтијари гүввәнин тә'сири алтында јаранан рәгси һәрәкәтин $U(x)$ потенсиал функсијасынын ашкар аналитик ифадәси һәмишә мә'лум олмур вә о, (35.5) шәклиндә көстәрилә билмир. Јалныз хүсуси бир һалда, мәсәлән, x=0 таразлыг нөгтәси әтрафында баш верән рәгси һәрәкәтин амплитуду кифајәт гәдәр кичик галдыгда $U(x)$ -ин ашкар шәклини тапмаг олур. Бу һалда $U(x)$ функсијасыны x=0 нөгтәси әтрафында x-ин үстләринә көрә сыраја ајырсаг,

$$U(x) = U(0) + \frac{x}{1!}U'(0) + \frac{x^2}{2!}U''(0) + \frac{x^3}{3!}U'''(0) + \frac{x^4}{4!}U^{IV}(0) + \ldots \tag{35.7}$$

$U(x)$ функсијасынын x=0 таразлыг нөгтәсиндәки $U(0)$ гијмәтини онун һесаблама башланғычы көтүрүб, һәмин нөгтәдә $U(x)$-ин минимум гијмәт алдығыны фәрз етсәк, $U(0)$=0 вә $U'(x)$=0 олар. $U''(0)$ сабити әвәзиндә $U''(0) = m\omega_o^2$ кими јени ω_o сабитини дахил етдикдә

$$U(x) = \frac{m\omega_o^2}{2}x^2 + \lambda x^3 + \beta x^4 + \ldots \tag{35.8}$$

олар. Бурада m–системин (зәррәчијин) күтләси ролуну ојнајыр. $\lambda = \frac{1}{3!}U'''(0)$ вә $\beta = \frac{1}{4!}U^{IV}(0)$ көтүрүлмүшдүр. (35.8) ифадәсинин сағ тәрәфиндә биринчи һәддән сонра кәлән һәдләри нәзәрә алмамаг мүмкүн олдуғу һалларда (35.8) ифадәси (35.5)-ин үзәринә дүшүр вә системин рәгсләри һармоник рәгсләр олур, системин өзү исә һармоник оссилјатор адланыр. Әкс һалда исә системин рәгсләри гејри-һармоник вә ја анһармоник олур, белә систем исә анһармоник осилјатор адланыр. Биз бурада хәтти һармоник оссилјаторун квант нәзәријјәси үзәриндә дајанаҹағыг. Анһармоник оссилјаторун квант нәзәријјәси исә §48-дә тәһлил олунаҹагдыр.

Һармоник оссилјаторун Шрединкер тәнлијини јазмаг үчүн онун Һамилтон операторуну тапмаг лазымдыр. Бунун үчүн ујғунлуг принсипиндән истифадә едәк. Онда (35.6)-дан Һамилтон оператору

$$\breve{H}=\frac{\breve{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\breve{x}^2}{2}. \tag{35.9}$$

Әлбәттә квант механикасында оссилјаторун классик тә'рифи өз мә'насыны итирир. Гејри-муәјјәнлик принсипинә көрә системин кинетик вә потенсиал енержиләрини ејни заманда өлчмәк мүмкүн дејилдир. Башга сөзлә, квант механики системин координатлары вә заман онун далға функсијасына аргументләр кими дахил олан дәјишәнләрдир. Она көрә дә квант механикасында Һамилтон оператору (35.9) шәклиндә верилән истәнилән квант механики систем һармоник оссилјатор адланыр.

Квант нәзәријјәсиндә һармоник оссилјаторун тәдгиги бөјүк әһәмијјәтә маликдир. Квант рәгсләри баш верән системләрин һамысында, квант електродинамикасында, молекуллар нәзәријјәсиндә, бәрк чисим физикасында, таразлыгдакы шүаланма нәзәријјәсиндә вә саһәнин квант нәзәријјәсиндә (35.9) ифадәси илә верилмиш Һамилтон операторуна тәсадүф олунур. Дикәр тәрәфдән, һармоник оссилјатора аид проблемләр квант нәзәријјәсинин әсас принсипләрини вә квант формализминин маһијјәтини олдугча ајдын шәкилдә нүмајиш етдирмәјә имкан верир.

Хәтти оссилјаторун квант нәзәријјәси унитар тәсвирләрдән һәр һансы биринин әсасында гурула биләр. Лакин, јухарыда гејд едилдији кими, мүхтәлиф унитар тәсвирләрин еквивалент олдуғуну көстәрмәк мәгсәди илә бу мәсәләни бир нечә тәсвирдә һәлл едәҹәјик. Әввәлҹә координат тәсвириндән башлајаг.

x-тәсвириндә импулс оператору $\breve{p}=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$, координат оператору исә өзүнә бәрабәр олур. Онда оссилјаторун (35.9) Һамилтон оператору

$$\breve{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2x^2}{2} \tag{35.9'}$$

шәклинә дүшүр. Хәтти оссилјаторун $U(x)=\dfrac{m\omega^2x^2}{2}$ потенсиал енержиси $x=\pm\infty$ нөгтәсиндә мүсбәт сонсузлуға јахынлашдығындан, оссилјаторун һәрәкәти, там енержиси сонлу олан сәрбәст зәррәҹијин сонсуз һүндүр диварлара малик потенсиал чухурдакы һәрәкәтини хатырладыр. Демәли хәтти оссилјаторун һәрәкәти финит вә енержи спектри дискрет олмалыдыр.

Оссилјаторун Һамилтонианы ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан онун, квант һаллары стасионар һаллар олар. Стасионар һалларын Шрединкер тәнлији

$$\breve{H}\Psi=E\Psi \quad \text{вә ја} \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\Psi=0 \tag{35.10}$$

олар. Бурада

$$\frac{2E}{h\omega}=\lambda,\quad \frac{m\omega}{\hbar}=\frac{1}{x_o^2},\quad \xi=\frac{x}{x_o},\quad x_o=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{35.11}$$

кими јени дәјишән дахил етсәк, (35.10) тәнлији

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\Psi(\xi)=0 \tag{35.12}$$

шәклини алар.

Квант механикасында (35.10) вә ја (35.12) тәнлијини һәлл етдикдә бахылан системин Һамилтон операторунун мәхсуси функсијалар чохлуғуну (спектрини) вә мәхсуси гијмәтләр спектрини тапмаг мәгсәди гојулур. Дикәр тәрәфдән $\breve{H}$ -ын мәхсуси функсијалары аргументинин бүтүн дәјишмә $(-\infty,\infty)$ интервалында кәсилмәз, биргијмәтли вә сонлу галмалыдыр.

Әввәлҹә (35.12) тәнлијинин $\xi=\pm\infty$-да сонлу галан һәллини тапаг, буна *асимптотик һәлл* дејилир. ξ-нин $\pm\infty$ гијмәтиндә (35.12)-дә ξ^2-на көрә λ сабитини нәзәрә алмамаг олар:

$$\Psi''(\xi)-\xi^2\Psi(\xi)=0. \tag{35.13}$$

Бу тәнлијин һәллини

$$\Psi(\xi)=e^{s\xi^2} \tag{35.14}$$

шәклиндә ахтараг. (35.14)-дән ики дәфә төрәмә көтүрүб (35.13)-дә јеринә јазандан сонра сабит әдәди ($2s$-и) ξ^2 дахил олан һәдләрә көрә нәзәрә алмасаг,

$$(4s^2-1)\xi^2=0 \quad \text{вә ја} \quad s=\pm\frac{1}{2}$$

аларыг. Онда (35.12)-ин үмуми асимптотик һәлли

$$\Psi(\xi)=C_1e^{-\frac{\xi^2}{2}}+C_2e^{\frac{\xi^2}{2}}. \tag{35.15}$$

$\xi=\pm\infty$-да икинчи һәдд сонсузлуға кедир. $\Psi_\infty(\xi)$-нин сонлу галмасыны тә'мин етмәк үчүн C_2 ихтијари сабит $C_2=0$ сечилмәлидир. C_1 сабитини исә үмуми функсијанын нормалајычы вуруғунун дахилинә салмаг олар. Онда (35.12) тәнлијинин асимптотик һәлли

$$\Psi_\infty(\xi)=e^{-\frac{\xi^2}{2}} \tag{35.16}$$

олур. (35.12) тәнлијинин үмуми һәллини

$$\Psi(\xi)=e^{-\frac{\xi^2}{2}}u(\xi) \tag{35.17}$$

шәклиндә ахтараг. Буну (35.12)-дә јеринә јаздыгда, $u(\xi)$ функсијасы үчүн

$$u''(\xi)-2\xi u'(\xi)+(\lambda-1)u(\xi)=0 \tag{35.18}$$

алыныр.

Бу тәнлијин һәлли үстлү сыра шәклиндә ахтарылыр:

$$u(\xi)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k\xi^k\,. \tag{35.19}$$

Буну (35.18)-дә јеринә јазсаг,

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left[k(k-1)\xi^{k-2}-(2k+1-\lambda)\xi^k\right]a_k=0$$

алыныр. Бу ифадәдә чәм ишарәси алтында биринчи һәддә k-ны $k+2$ илә әвәз етмәклә сыфыр вә аддитив сабит олан һәдләри арадан чыхарсаг,

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left[(k+2)(k+1)a_{k+2}-(2k+1-\lambda)a_k\right]\xi^k=0$$

олар. Үстлү сыранын сыфра бәрабәр олмасы үчүн ξ-нин мүхтәлиф үстләринин әмсаллары сыфра бәрабәр олмалыдыр. Бу шәртдән ашағыдакы *рекурент дүстур* алыныр:

$$a_{k+2}=\frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k\,. \tag{35.20}$$

Бу мүнасибәтдә k-ја k=0-дан башлајараг гијмәт версәк, сыранын a_k, a_{k+2}, a_{k+4} вә и.а., k=1-дән башласаг исә a_{k+1}, a_{k+3}, a_{k+5}, ... әмсаллары арасында әлагә тапмыш оларыг. Биринчи һалда a_0, икинчи һалда исә a_1 әмсаллары ихтијари сечилмәлидир. Башга сөзлә a_0 вә a_1 әмсаллары (35.18) диференсиал тәнлијинин интеграллама сабитләри олур. Онлар

$\Psi(\xi)$ вә ја $u(\xi)$ -нин үзәринә гојулан әлавә шәртләрин бириндән тапыла биләр. Онлардан бири $\Psi(\xi)$ функсијасынын квадратик интеграллама, јә'ни ваһидә нормаланма шәртидир.

Көстәрмәк олар ки, $\Psi(\xi)$ үчүн нормаланма шәрти о вахт өдәнилир ки, (35.19) сырасына дахил олан һәдләрин сајы сонлу галсын*.

Фәрз едәк ки, (35.19) сырасынын сонунчу һәдди $a_n\xi^n$ -дир, јә'ни сыранын a_n-дән сонра кәлән бүтүн әмсаллары сыфра бәрабәрдир:

$$a_k=\begin{cases}a_n\neq 0, & k\leq n\\ 0 & k>n\end{cases} \tag{35.21}$$

Мәсәлән: $k=n$ олдугда (35.21) шәртинә көрә

$$a_{n+2}=\frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)}a_n=0$$

олмалыдыр. $a_n\neq 0$ олдуғундан, бурада

$$2n+1-\lambda=0$$

вә ја

$$\lambda=2n+1 \tag{35.22}$$

олар. Демәли (35.19) сырасы илә тә'јин олунан функсијанын чохһәдли (полином) олмасы үчүн (35.22) шәрти өдәнилмәлидир.

(35.21) шәртинә әсасән иддиа едә биләрик ки, a_{n+1}=0 -дыр. Онда (35.20) рекурент дүстурундан вә (35.21) шәртиндән алыныр ки, a_{n-1} әмсалы да сыфра бәрабәрдир. Доғрудан да (35.20)-дә k-ны $k-1$ илә әвәз едиб, алынмыш

$$a_{k+1}=\frac{2(k-1)+1-\lambda}{k(k+1)}a_{k-1}$$

ифадәсиндә $k=n$ көтүрсәк, (35.21) шәртинә әсасән

$$a_{n+1}=\frac{2(n-1)+1-(2n+1)}{n(n+1)}a_{n-1}=0$$

олмалыдыр. Бурада a_{n-1} -ин әмсалы сыфыр олмадығындан a_{n-1}=0 алыныр. Беләликлә a_{n-3}, a_{n-5}, ... вә и.а. әмсалларынын һамысы сыфыр олур. Демәли (35.19) сырасы јалныз a_k, a_{k+2}, a_{k+4} вә и.а. әмсаллары ардычыллығы илә тә'јин олунмуш олур.

---

* Бах [7], сәһ 28

$\Psi(\xi)$ функсиjасынын нормалаjычы вуруғу тə'jин олунмадығындан $a_n=2^n$ кими сечилə билəр. Онда (35.20) вə (35.22) мүнасибəтлəриндəн

$$a_{n-2}=-\frac{n(n-1)}{1!}2^{n-2} \tag{35.23}$$

$$a_{n-4}=\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}2^{n-4}$$

вə и.а. алынар. Онда $u(\xi)$ үчүн

$$u(\xi)=(2\xi)^n-\frac{n(n-1)}{1!}(2\xi)^{n-2}+\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}2^{n-4}+\ldots+ \tag{35.24}$$

$$+\begin{cases} a_1, & n\text{-ин тəк гиjмəтлəри,} \\ a_o, & n\text{-ин чүт гиjмəтлəри үчүн} \end{cases}$$

Бу чохһəдли исə риjази физикада, jə'ни мəхсуси функсиjалар нəзəриjjəсиндə Ермит полиному адланыр вə $H_n(\xi)$ кими ишарə олунур. Демəли

$$u(\xi)=H_n(\xi)$$

алыныр. (35.22)-ни нəзəрə алмагла (35.18) тəнлиjини $H_n(\xi)$ үчүн jазсаг

$$H_n''(\xi)-2\xi H_n'(\xi)+2nH_n(\xi)=0 \tag{35.23'}$$

аларыг. Демəли, һəр һансы функсиjа үчүн (35.23′) тəнлиjи алынарса, ону артыг һəлл етмəдəн (35.22) шəртинин өдəнилдиjини тəлəб етмəклə, онун һəллини риjази физикада jахшы мə'лум олан Ермит полиному илə ифадə едə билəрик. n-ин биринчи бир нечə гиjмəтлəри үчүн $H_n(\xi)$ -нин ифадəлəрини көстəрəк. (35.24)-дəн

$$H_o(\xi)=1,\ H_1(\xi)=2\xi,\ H_2(\xi)=4\xi^2-2,\ H_3(\xi)=8\xi^3-12\xi. \tag{35.25}$$

Белəликлə (35.10) тəнлиjинин мəхсуси функсиjалары

$$\Psi_n(\xi)=C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi) \tag{35.26}$$

вə мəхсуси гиjмəтлəри үчүн (35.11) вə (35.22) мүнасибəтлəриндəн

$$E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2}),\quad n=0,1,2,\ldots,\infty \tag{35.27}$$

ифадəлəрини алмыш олуруг.

Ермит полиномунун (35.24) ифадəсини jығчам шəкилдə jазмаг олар. Бунун үчүн $\upsilon=e^{-\xi^2}$ гəбул едиб, бир дəфə төрəмə алсаг

$$\upsilon'+2\xi\upsilon=0$$

тəнлиjини аларыг. Бу тəнликдəн $(n+1)$ дəфə төрəмə алаг:

$$\upsilon^{(n+2)}+2(\upsilon\xi)^{(n+1)}=0. \tag{35.28}$$

Икинчи һəдди ачмаг үчүн Лejбнис гаjдасындан истифадə едəк (бах §14). Орада $y=\upsilon$, $z=2\xi$ көтүрсəк,

$$(\upsilon\xi)^{n+1}=\upsilon^{(n+1)}\xi+(n+1)\upsilon^n.$$

(35.28) тəнлиjи

$$\upsilon^{(n+2)}+2\xi\upsilon^{(n+1)}+2(n+1)\upsilon^{(n)}=0$$

шəклинə дүшəр. Бурада

$$\upsilon^{(n)}=e^{-\xi^2}f(\xi)$$

көтүрəк. $f(\xi)$ функсиjасы үчүн (35.23′) тəнлиjи алыныр. Демəли $f(\xi)$ jалныз $H_n(\xi)$ -дəн сабитлə фəрглəнə билəр:

$$f(\xi)=e^{\xi^2}\upsilon^{(n)}(\xi)=e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2})=N_nH_n(\xi). \tag{35.29}$$

Бурадакы N_n сабити $H_n(\xi)$ -нин (35.24) илə верилмиш ифадəсиндə вə (35.29)-да төрəмəлəри ачмагла $f(\xi)$ үчүн алынан сырада ξ^2-нын еjни үстлү һəдлəринин əмсалларыны мүгаjисə етмəклə тə'jин етмəк олар. N_n үчүн $N_n=(-1)^n$ гиjмəти алыныр. Демəли $H_n(\xi)$ -ни

$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}) \tag{35.30}$$

кими jығчам шəкилдə jазмаг олар.

Инди дə $\Psi_n(x)$ функсиjасына дахил олан C интеграллама вуруғуну тапаг. Jухарыда дедиjимиз кими, ону $\Psi_n(x)$ функсиjаларынын

$$\int\Psi_{n'}^*(x)\Psi_n(x)dx=\delta_{n'n}$$

орта-нормаланма шәртиндән тапмаг олар. $\Psi_n(\xi)$ -ин (35.26) ифадәсини бурада јазыб, x-дән ξ дәјишәнинә кечәндән сонра $H_n(\xi)$ -нин өзүнү (35.30) ифадәси илә әвәз етсәк,

$$x_o C_{n'} C_n \int e^{-\xi^2} H_{n'}(\xi) H_n(\xi) d\xi = (-1)^n x_o C_{n'} C_n \int H_{n'}(\xi) \frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}) d\xi = \delta_{n'n} .$$

Ахырынчы ифадәни n дәфә һиссә-һиссә интеграллasaг,

$$x_o C_{n'} C_n \int e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_{n'}(\xi) d\xi = \delta_{n'n} \qquad (35.31)$$

аларыг. Бурада $n > n'$ олса, $H_{n'}(\xi)$ функсијасындан n дәфә көтүрүлмүш төрәмә сыфыр верәр, јә'ни $\Psi_n(x)$ функсијалары үчүн ортогоналлыг шәрти өдәниләр. $n=n'$ һалында исә $\delta_{nn}=1$ вә $\dfrac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!$ вә Пуассон интегралы $\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$ олдуғундан C_n үчүн

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\, x_o}} \qquad (35.32)$$

алмыш оларыг. Беләликлә

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_o \sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2} H_n(\xi), \quad (\xi = \frac{x}{x_o}) \qquad (35.33)$$

олур.

Дискрет спектр һалында ермит операторунун $\Psi_n(x,t)$ мәхсуси функсијалар чохлуғунун там систем тәшкил етдији шәртини чыхардығымыза охшар олараг көстәрмәк олар ки, хәтти һармоник оссилјаторун Һамилтон операторунун (35.33) мәхсуси функсијалар чохлуғу да

$$\sum_n \Psi_n^*(x) \Psi_n(x') = \delta(x - x') \qquad (35.34)$$

там системлик шәртини өдәјир.

Доғрудан да, далға функсијасынын физики мә'насына көрә фәзанын ихтијари нөгтәсиндәки квант-механики системин мүмкүн олан һаллардан бириндә олма еһтималы

$$\int \Psi^*(x)\Psi(x)(dx) = \sum_k |C_k|^2 = \sum_k C_k^* C_k \qquad (35.35)$$

ифадәси илә верилир. Бурада

$$C_k = \int \Psi_k^*(x)\Psi(x)dx \qquad (35.36)$$

әмсаллары системин $\Psi(x)$ үмуми функсијасыны ихтијари ермит операторун $\{\Psi_k(x,t)\}$ мәхсуси функсијаларын там системи илә ифадә едән суперпозисија принсипинә дахил олан әмсаллардыр:

$$\Psi(x,t) = \sum C_k \Psi_k . \qquad (35.37)$$

Әввәлчә фәрз едәк ки, (35.34) бәрабәрлији доғрудур. Онда (35.36)-ја әсасән (35.35) бәрабәрлији

$$\sum_k |C_k|^2 = \sum_k \int \Psi_k^*(x)\Psi(x)dx \int \Psi_k^*(x')\Psi(x')(dx') =$$
$$= \int \Psi^*(x)\Psi(x')(dx)(dx') \sum_k \Psi_k^*(x)\Psi_k(x')$$

шәклинә дүшәр. Бурада (35.34)-ү нәзәрә алсаг,

$$\sum_k |C_k|^2 = \int \Psi^*(x)\Psi(x')\delta(x-x')(dx)(dx') = \int \Psi^*(x)\Psi(x)(dx)$$

олар, јә'ни (35.35) бәрабәрлији ејнилик кими өдәнилир.

Инди дә (35.35) бәрабәрлијинин доғру олдуғуну гәбул едәк:

$$\sum_k |C_k|^2 = \int \Psi^*(x)\Psi^*(x') \sum_k \Psi_k^*(x')\Psi_k(x)(dx)(dx') = \int \Psi^*(x)\Psi(x)(dx) .$$

Ахырынчы бәрабәрликләр о заман ејни заманда өдәниләр ки,

$$\Psi(x) = \int \Psi(x') \sum_k \Psi_k^*(x')\Psi_k(x)(dx')$$

кими тә'јин олунсун. Бу о вахт мүмкүндүр ки, $\Psi_k(x)$ функсијалары үчүн (35.34) шәрти өдәнилсин. Бу исбат ихтијари ермит операторун мәхсуси функсијалар базиси үзрә апарылдығындан үмуми характер дашыјыр.

(35.24) вә (35.33) ифадәләриндән бир нәтичә олараг чыхыр ки, n-ин чүт гијмәтләриндә $\Psi_n(x)$ функсијасына аргументин (ξ-нин) јалныз чүт үстлү һәдләри, n-ин тәк гијмәтләриндә исә јалныз тәк үстлү һәдләри дахил олур. Демәли, квант оссилјаторун n-ин чүт гијмәтләринә ујғун бүтүн һаллар јалныз чүт функсијаларла, тәк гијмәтләринә ујғун һаллары исә – тәк далға функсијалары илә тәсвир олунур.

Оссилјаторун (35.27) енержи спектринə кəлдикдə, спектр дискретдир. Һəм енержинин мəхсуси гијмəтлəри вə һəм дə ујғун мəхсуси функсијалар јеканə бир квант əдəди илə тə'јин олундуғундан, оссилјаторун стасионар һаллары чырлашмамыш олур. Енержинин мүəјјəн бир гијмəтинə јеканə бир далға функсијасы ујғун кəлир.

Классик оссилјатордан фəргли олараг квант оссилјаторун енержисинин минимал гијмəти ($n=0$) сыфыр јох, $E_o = \frac{\hbar\omega}{2}$ -јə бəрабəрдир. Оссилјаторун енержиси E_o олан һалы *əсас һал* адланыр. Енержинин бу гијмəти оссилјаторун температурунун мүтлəг сыфыр гијмəтинə ујғун кəлдијиндəн она оссилјаторун сыфырынчы рəгслəринин енержиси дə дејилир. Бурадан чыхыр ки, мүтлəг сыфырда системин рəгси һəрəкəти сөнмүр.

Һармоник оссилјатор үчүн сыфырынчы енержинин варлығы факты зəррəчијин корпускул-далға тəбиəтли олмасындан чыхан əн мүһүм нəтичəлəрдəн биридир. Онун тəчрүбəдə тəсдиги, јə'ни рəгси һəрəкəтин мүтлəг сыфырда белə там сөнмəмəси фактынын тəчрүбəдə мүшаһидə едилмəси квант механикасынын өзү үчүн бөјүк əһəмијјəт кəсб етмиш оларды.

Температуру мүтлəг сыфра јахын олан кристаллардан ренткен шүаларынын сəпилмəси просесиндə илк дəфə сыфырынчы рəгслəрин варлығы исбат олунду. Доғрудан да, белə алчаг температурларда кристалын атомларынын рəгси һəрəкəти там сөнмүш олсајды, рентген шүаларынын кристаллардан сəпилмəси заманы сəпилəн шүаларын тезлијинин дəјишмəси баш вермəзди. Тəчрүбəдə исə белə дəјишмəнин варлығы мүшаһидə олунмушду. Бу да сыфырынчы рəгслəрин мөвчуд олмасы вə ја оссилјаторун $E_o = \frac{\hbar\omega}{2}$ енержисинə малик олмасы демəк иди.

Квант оссилјатору үчүн ихтијари ардычыл ики енержи сəвијјəси арасындакы фəрг $\hbar\omega$ -ја бəрабəрдир. Башга сөзлə, оссилјатор гоншу енержи сəвијјəлəрин бириндəн дикəринə кечдикдə, о, ја $\hbar\omega$ гəдəр енержи алыр вə ја да верир. Бурадан $\hbar\omega$ бир рəгс квантынын енержиси олур вə үмуми енержи $n\hbar\omega + E_o$ кими тə'јин олундуғундан, һесаб етмəк олар ки, һəр истəнилəн E_n сəвијјəсиндə n рəгс кванты вардыр.

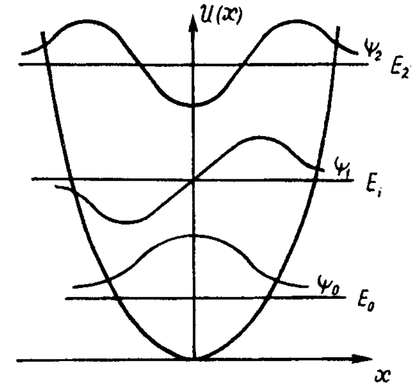
Биринчи үч стасионар һалын далға функсијаларынын ифадəси вə енержинин онлара ујғун гијмəтини көстəрəк:

$$n=0,\ E_o=\frac{\hbar\omega}{2},\ \Psi_o(x)=\frac{1}{\sqrt{x_o\sqrt{\pi}}}e^{-\xi^2/2}$$

$$n=1,\ E_1=\frac{3\hbar\omega}{2},\ \Psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{2x_o\sqrt{\pi}}}2\xi e^{-\xi^2/2} \qquad (35.38)$$

$$n=2,\ E_2=\frac{5\hbar\omega}{2},\ \Psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{8x_o\sqrt{\pi}}}(2\xi^2-1)e^{-\xi^2/2}$$

Шəкил 13-дə бу функсијаларын (35.5) потенсиал енержи мүстəвисиндə x-дəн асылылыг əјрилəри көстəрилмишдир. Көрүндүјү кими $\Psi_n(x)$ далға функсијасынын дүјүн нөгтəлəринин сајы n-ə бəрабəрдир. $n=0$ оланда $\Psi_o(x)$ функсијасынын $-\infty<x<\infty$ областында дүјүн нөгтəси јохдур, $n=1$ оланда дүјүн нөгтəси бир, $n=2$ оланда ики вə и.а.-дыр. Демəли, n бөјүк олдугча далға функсијасынын оссилјасијасы да артыр.



Шəкил 13. Хəтти оссилјаторун $n=0$, 1, 2 һалларына ујғун далға функсијаларынын графики.

Шəкилдəки x_1, x_2, x_3, ... нөгтəлəриндə оссилјаторун там вə потенсиал енержилəри бəрабəр олур: $E_n = U(x_n)$. Бу нөгтəлəрə оссилјаторун "классик гајытма нөгтəлəри" дејилир. Там енержинин гијмəти x-ин $x > x_n$ гијмəтлəриндə потенсиал енержинин ујғун гијмəтиндəн кичик олур вə классик физика бахымындан оссилјатор $x > x_n$ областына кечə билмир, о, $x < x_n$ областына гајыдыр. Квант оссилјаторун ујғун далға функсијалары исə $x > x_n$ областында сыфырдан фəргли галыр вə оссилјаторун һəмин областда олма еһтималы сыфырдан фəргли олур. Лакин бу областын дəринликлəринə кетдикчə о кəскин азалыр.

Јухарыда гејд етдик ки, һармоник оссилјаторун стасионар һаллары чырлашмамышдыр. Көстəрмəк олар ки, бу хассə бирөлчүлү квант һəрəкəтə хас олан бир хүсусијјəтдир вə потенсиал енержинин шəклиндəн вə тəбиəтиндəн асылы дејилдир.

Буну исбат етмəк үчүн əксини фəрз едəк. Тутаг ки, енержинин мүəјјəн бир E гијмəтинə $\Psi_1(x)$ вə $\Psi_2(x)$ кими гејри-асылы ики мүхтəлиф далға функсијасы ујғундур. Онда Ψ_1 вə Ψ_2

$$\Psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))\Psi_1 = 0,$$

$$\Psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U(x))\Psi_2 = 0.$$

Шрединкер тəнликлəринин һəлли олмалыдыр.

Биринчи тəнлији солдан Ψ_2-јə, икинчини исə Ψ_1-ə вуруб тəрəф-тəрəфə чыхсаг,

$$\Psi_2\Psi_1'' - \Psi_1\Psi_2'' = 0$$

$$\frac{d}{dx}(\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2') = 0$$

бурадан

$$\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2' = \text{const} = C$$

аларыг, x-ин бүтүн дәјишмә областында бу фәрг сабит галдығындан, онун гијмәтини (јә'ни C-ни) x-ин бир гијмәти үчүн тә'јин етмәклә кифајәтләнмәк олар. Фәргин x-ин $x \to \infty$-да алдығы гијмәти тә'јин едәк. E дискрет спектрин мәхсуси гијмәтләриндән бири олдуғундан $\Psi_1(x = +\infty) = \Psi_2(x = +\infty) = 0$ олар.

Беләликлә, x-ин бүтүн дәјишмә областында

$$\Psi_2\Psi_1' - \Psi_1\Psi_2' = 0$$

вә ја

$$\Psi_1(x) = \alpha\Psi_2(x)$$

алынар, бурада α–ихтијари сабитдир. Демәли, $\Psi_1(x)$ вә $\Psi_2(x)$ функсијалары мүхтәлиф јох, һәтти асылы функсијалардыр. Башга сөзлә, E һалы чырлашмамыш һалдыр.

Инди дә көстәрәк ки, һармоник оссилјаторун енержисинин $\frac{h\omega}{2}$ минимум гијмәтә малик олмасы квант механикасынын әсас принсипләриндән бири олан гејри-мүәјјәнлик принсипи илә әлагәдардыр.

Доғрудан да, һармоник оссилјаторун квант һалларынын јалныз чүт вә јахуд да тәк далға функсијалары илә тәсвир олундуғундан $\bar{x} = \int \Psi_n \hat{x} \Psi_n (dx) = 0$ вә $\bar{p} = \int \Psi_n \hat{p} \Psi_n (dx) = 0$ олур. Онда $\Delta x = x - \bar{x} = x$ вә $\Delta p = p - \bar{p} = p$ алыныр. Бу һалда гејри-мүәјјәнлик мүнасибәтини хәталарын ән кичик гијмәтләри үчүн јазсаг,

$$\overline{(\Delta p)^2}\ \overline{(\Delta x)^2} = \overline{p^2}\ \overline{x^2} = \frac{\hbar^2}{4} \qquad (35.39)$$

олар. $\overline{p^2}$ -ын бурадан тапылмыш гијмәтини

$$\bar{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2\overline{x^2}}{2}$$

ифадәсиндә јазсаг,

$$\bar{E} = \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{m\omega^2\hbar^2}{8\left(\overline{p^2}\right)^2}$$

аларыг. $\bar{E}$ -нин минимум гијмәтини тапмаг үчүн $\frac{d\bar{E}}{d\overline{p^2}} = 0$ тәнлијиндән $\overline{p^2}$ -ны тапыб, онун ифадәсиндә јазсаг, $E_{min} = \frac{\hbar\omega}{2}$ алынар. Бу исә оссилјаторун E_o сыфырынчы енержиси үзәринә дүшүр.

Квант нәзәријјәсиндә тәсвирин сечилмәсиндән асылы олмајараг, координат операторунун матриса елементләри мүһүм рол ојнајыр. Верилмиш тәсвирдә координат операторунун матриса елементләри мә'лум олдугда (10.4′) һәрәкәт тәнлијиндән вә ја билавасит̄ә (14.31) мүн... бәтиндән истифадә едәрәк, импулс операторунун матриса елементләр... вә беләликлә дә онларла тә'јин олунан истәнилән башга физики кәмијјәтә ујғун операторун һәмин тәсвирдәки ифадәсини тапа биләрик. Бундан башга, кәләчәкдә көрәчәјимиз кими, координат операторунун матриса елементләри шүаланма вә сәпилмә нәзәријјәсиндә мүһүм рол ојнајыр.

Һармоник оссилјатор үчүн координат операторунун матриса елементи

$$x_{n'n} = \int \Psi_{n'}^{*}(x) x \Psi_n(x) dx \qquad (35.40)$$

кими тә'јин олунур. Ψ_n функсијаларын (35.33) илә верилмиш ифадәләрини бурада јазыб, ермит полиномлары үчүн мә'лум олан

$$\xi H_n(\xi) = nH_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{n+1}(\xi) \qquad (35.41)$$

рекурент дүстурундан вә (35.31) мүнасибәтләриндән истифадә етсәк,

$$x_{n'n} = x_o\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{n',\,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{n',\,n+1} \right) \qquad (35.42)$$

ифадәси алынар. Бурадан көрүнүр ки, оссилјатор үчүн координат операторунун $x_{n-1,n}$ вә $x_{n+1,n}$ матриса елементләри јалныз гоншу сәвијјәләр үчүн сыфырдан фәргли галыр, јә'ни

$$x_{n-1,n} = x_o\sqrt{\frac{n}{2}} \qquad \text{вә} \qquad x_{n+1,n} = x_o\sqrt{\frac{n+1}{2}} \qquad (35.43)$$

матриса елементләриндән башга бүтүн дикәр матриса елементләри сыфра бәрабәр олур.

§ 36. РИТСИН ВАРИАСИЈА МЕТОДУ

Шрединкер тәнлијини һәлл етмәк үчүн тәтбиг олунан тәхмини методлардан ән үмумиси вариасија методудур. Таныш олачағымыз һәјәчанланма методу (бах: §46 вә §47)нәзәријјәдә һәр һансы бир кичик параметрин олмасыны тәләб едир. Квазиклассик методун исә тәтбиг областы чох мәһдуддур. Вариасија методу квант-механики тәнлији вариасија шәклиндә көстәрилә билән бүтүн һалларда тәтбиг олуна билир.

Методун маһијјәти ашағыдакындан ибарәтдир. Тәдгиг олунан системи тәсвир едән тәнлијин һәлләри һәр һансы ихтијари мәхсуси функсијалар чохлуғуна дахил оларса, бу чохлуғун истәнилән ихтијари Ψ функсијасындан асылы олан

$$J(\Psi^*,\Psi)=\int\Psi^*\breve{H}\Psi d\xi \qquad (36.1)$$

функсионалы стасионардырса,

$$\delta J=0 \qquad (36.2)$$

вариасија тәнлији

$$\int\Psi^*(\xi)\Psi(\xi)d\xi=1 \qquad (36.3)$$

шәрти дахилиндә

$$\breve{H}\Psi=E\Psi \qquad (36.4)$$

Шрединкер тәнлијинә еквивалент тәнлик олур. $\breve{H}$ – бахылан системин Һамилтон операторудур.

Доғрудан да, (36.3) мүнасибәти дахилиндә $J(\Psi^*,\Psi)$ функсионалынын екстремаллыг шәрти

$$\delta\left[\int\Psi^*\breve{H}\Psi d\xi-\lambda\int\Psi^*\Psi d\xi\right]=0 \qquad (36.5)$$

олар. λ – тә'јин олуначаг Лагранж параметридир. (35.5)-дә вариасијаны ачсаг,

$$\int\delta\Psi^*\breve{H}\Psi d\xi-\lambda\int\delta\Psi^*\Psi d\xi+\int\Psi^*H\delta\Psi d\xi-\lambda\int\Psi^*\delta\Psi d\xi=0.$$

$\delta\Psi$– Ψ функсијанын вариасијасы, $\delta\Psi^*$ исә Ψ-јә гошма Ψ^* функсијанын вариасијасыдыр. Онлар бир-бириндән асылы дејилдир, чүнки Ψ вә Ψ^* функсијалары (векторлары) мүхтәлиф фәзаларда тә'јин олунур. Бу вариасијаларын ихтијари сечилә билмәсини дә нәзәрә алсаг, (36.5)-дән

$$(\breve{H}-\lambda)\Psi=0,\ \ \Psi^*(\breve{H}-\lambda)=0$$

тәнликләри алынар. Икинчи тәнликдән ермит гошма көтүрсәк,

$$(\breve{H}^+-\lambda^*)\Psi=0 \qquad (36.6)$$

олар. $\breve{H}$ ермит оператор $(\breve{H}^+=\breve{H})$ олдуғундан, онун мәхсуси гијмәтләри һәгиги олар: $\lambda^*=\lambda=E$. Бурадан, (36.6) тәнликләри еквивалент олуб, системин Шрединкер тәнлији үзәринә дүшүр.

Демәли, $\{\Psi_k\}$ чохлуғуна дахил олан истәнилән Ψ_i функсијасы үчүн $J(\Psi_i^*,\Psi_i)$ функсионалы стасионар оларса, Ψ_i функсијасы $\breve{H}$ операторунун E_i мәхсуси гијмәтинә ујғун мәхсуси функсијасы олар. Әксинә, тутаг ки, сонлу нормаја малик, јә'ни квадратик интегралланан Ψ_i функсијасы $\breve{H}$ операторунун E_i мәхсуси гијмәтинә ујғун мәхсуси функсијасыдыр. Онда

$$\breve{H}\Psi_i=E_i\Psi_i.$$

Бу тәнлији солдан Ψ^*-јә вуруб бүтүн фәза үзрә интегралласаг, (36.3)-ә әсасән

$$\int\Psi_i^+\breve{H}\Psi_i d\xi=E_i=J(\Psi_i^+\Psi_i)$$

алынар. Бунун (36.1) ифадәси илә мүгајисәсиндән көрүнүр ки, нә үчүн $J(\Psi^+,\Psi)$ функсионалынын Ψ-јә көрә стасионар олмасы тәләби гојулур.

Инди дә көстәрәк ки, квант системинин һансы һалда олмасындан асылы олмајараг, онун енержисинин орта гијмәти системин әсас һалынын E_o енержисиндән бөјүк вә ја она бәрабәр олур, јә'ни һәмишә

$$J(\Psi^+,\Psi)=\int\Psi^+\breve{H}\Psi d\xi\ge E_o \qquad (36.7)$$

мүнасибәти өдәнилир, бурада Ψ – ихтијари нормаланмыш функсија, E_o исә $J(\Psi^+,\Psi)$ функсионалынын минимум гијмәтидир.

Фәрз едәк ки, $\{\Psi_k\}$ чохлуғу $\breve{H}$-ын нормаландырылмыш мәхсуси функсијалар чохлуғудур (дискрет спектр):

$$\breve{H}\Psi_k=E_k\Psi_k \quad \text{вә} \quad \int\Psi_{k'}^+\Psi_k d\xi=\delta_{k'k}. \qquad (36.8)$$

$\{\Psi_k\}$ чохлуғу там систем тәшкил етдијиндән, истәнилән функсијаны Ψ_k-функсијаларынын суперпозисијасы кими көстәрмәк олар:

$$\Psi(\xi)=\sum_k C_k\Psi_k. \qquad (36.9)$$

(36.3) нормаланма шәртиндән

$$\sum_{k=0} C_k^* C_k = \sum_{k=0} |C_k|^2 = 1 \qquad (36.10)$$

олар. (36.9)-у (36.7) ифадәсиндә јеринә јазыб (36.8)-и нәзәрә алсаг,

$$J(\Psi^+, \Psi) = \sum_{kk'} C_{k'}^+ C_k \int \Psi_{k'}^* \breve{H} \Psi_k d\xi = \sum_{kk'} E_k C_{k'} C_k \delta_{k'k} = \sum_k E_k |C_k|^2$$

олар. $\breve{H}$ -ын $\{E_k\}$ мәхсуси гијмәтләр чохлуғу үчүн $E_k \geq E_o$ (k=0,1,2,...) шәрти өдәнилдијиндән, (36.10)-а әсасән

$$J(\Psi^+, \Psi) \geq \sum_k E_o |C_k|^2 = E_o \qquad (36.11)$$

алынар, јә'ни (36.7) гејри-бәрабәрлији һәмишә өдәнилир. Беләликлә, квант системин әсас һалынын енержисинин тапылмасы мәсәләси $J(\Psi^+, \Psi)$ функсионалынын минимум гијмәтинин һесабланмасына кәтирилир.

Инди дә фәрз едәк ки, әсас һалын Ψ_o далға функсијасы мә'лумдур. Биринчи һәјәчанланмыш һалын E_1 енержисини вә Ψ_1 далға функсијасыны тапаг. Бунун үчүн

$$\int \Psi^*(\xi)\Psi(\xi)d\xi = 1, \ \int \Psi_o^+ \Psi d\xi = 0 \qquad (36.12)$$

шәртләри дахилиндә $J(\Psi^+, \Psi)$ функсионалынын мүтләг минимумуну һесабламаг лазымдыр. Бурада биринчи шәрт Ψ-нин нормаланма, икинчи шәрт исә Ψ-нин Ψ_o-а ортогонал олмасы тәләбидир. Ψ илә Ψ_o-ын

$$\int \Psi_o^+ \Psi d\xi = 0 = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \int \Psi_o^+ \Psi_k d\xi = C_o \int \Psi_o^+ \Psi_o d\xi + \sum_{k=1}^{\infty} C_k \int \Psi_o^+ \Psi_k d\xi$$

ортогоналлыг шәртиндә биринчи һәдд $\int \Psi_o^+ \Psi_o d\xi = 1$, икинчи һәдд исә $\int \Psi_o^+ \Psi_k d\xi = 0$ $(k \neq 0)$ олдуғундан икинчи чәм сыфыр вә C_o=0 олур. Бахылан һалда (36.10) нормаланма шәрти

$$\sum_{k=1}^{\infty} |C_k|^2 = 1$$

кими јазылар. Бу һалда

$$J(\Psi^+, \Psi) = \sum_{k=1}^{\infty} E_k |C_k|^2 \geq \sum_{k=1}^{\infty} E_1 |C_k|^2 = E_1$$

олур. Беләликлә, биринчи һәјәчанланмыш һалын енержиси дә $J(\Psi^+, \Psi)$ функсионалынын ујғун минимумуна бәрабәр олур.

Икинчи һәјәчанланмыш һалын E_2 енержисини вә Ψ_2 далға функсијасыны тапмаг истәсәк, $J(\Psi^+, \Psi)$ функсионалынын минимуму

$$\int \Psi^+ \Psi d\xi = 1, \ \int \Psi_o^+ \Psi d\xi = 0 \quad \text{вә} \quad \int \Psi_1^+ \Psi d\xi = 0$$

шәртләриндә һесабланмалыдыр вә и.а.

Беләликлә, системин һәр һансы n-чи һалынын E_n енержисини тапмаг үчүн $n+1$ сајда әлавә шәрт дахил едилмәклә $J(\Psi^+, \Psi)$ функсионалынын минимуму тапылыр. Бу метод *вариасија методу* вә ја *Ритс методу* адланыр.

Вариасија методунун мүхтәлиф мәсәләләрә тәтбиги ашағыдакы кими апарылыр. $\Psi(\xi)$ функсијасы әвәзинә бир сыра параметрләрдән асылы, квадратик интегралланан вә аналитик ифадәси мә'лум $\Psi(\xi, \alpha, \beta, ...)$ кими *сынаг функсија* сечилир. Бу һалда $J(\Psi^+, \Psi)$ функсионалы параметрләрдән асылы

$$J(\Psi^+, \Psi) = \int \Psi^+(\xi, \alpha, \beta, \ldots) \breve{H} \Psi(\xi, \alpha, \beta, \ldots) d\xi = J(\alpha, \beta, \ldots) \qquad (36.13)$$

функсионалына чеврилир вә мәсәләнин һәлли әлавә шәртләр өдәнилмәк шәртилә $J(\alpha, \beta, ...)$ функсионалынын минимумунун тапылмасына кәтирилир.

Сечилмиш сынаг функсијасына дахил едилән $\alpha, \beta, ...$ параметрләри $\Phi = J(\alpha, \beta, \ldots) - E \int \Psi^+(\xi, \alpha, \beta, \ldots) \Psi(\xi, \alpha, \beta, \ldots) d\xi$ фәргинин параметрләрә кәрә вариасијасынын һесабланмасы заманы алынан

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \beta} = 0, \ \ldots, \ \frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} = 0, \ \ldots \qquad (36.14)$$

тәнликләрдән тапылыр, мәсәлән, $\alpha = \alpha_o$, $\beta = \beta_o$ вә и.а.

Сынаг функсијасынын сечилмәси мәсәләнин симметријасына әсасланыр. Сынаг функсијасы уғурлу сечилдикдә о системин бахылан һалынын дәгиг функсијасына вә $E = J(\alpha_o, \beta_o, \ldots)$ кәмијјәти исә һәмин һалын дејәк ки, E_o (вә ја $E_1, E_2, \ldots$) әсл гијмәтинә кифајәт гәдәр јахын олур.

Беләликлә, Ритсин вариасија методу (36.6) диференсиал тәнлијин һәллини (36.14) чәбри тәнликләр системинин һәллинә кәтирир вә бунунла $\breve{H}$ операторунун мәхсуси гијмәтләр спектринин тапылмасы мәсәләси хејли садәләшдирилмиш олур. Бу методун мүһүм чәтинликләри сынаг функсијасыны дүзкүн сечмәји, (36.1) вә (36.3) интегралларыны һесабламағы бачармагдан ибарәтдир.

Ритсин вариасија методу илә $\breve{H}$ операторунун мәхсуси гијмәтләрини вә мәхсуси функсијаларыны тапмаг јолуну бир-ики мисалла нүмајиш етдирәк.

1. Хәтти һармоник оссилјаторун әсас һалынын енержисини вә далға функсијасыны тапаг.

Билдијимиз кими хәтти һармоник оссилјаторун Һамилтон оператору

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\mu\omega_o^2 x^2}{2} \qquad (36.15)$$

шәклиндәдир.

Сынаг функсијасы системин симметријасына әсасән елә сечилмәлидир ки, о квадратик интеграллансын, $x=\pm\infty$ -да сыфра бәрабәр олсун вә әсас һалын далға функсијасы кими дүјүн нөгтәләринә малик олмасын. Бу шәртләри өдәјән функсија, јәгин ки,

$$\Psi(x,\alpha) = Ae^{-\alpha\frac{x^2}{2}} \qquad (36.16)$$

олар. (36.3) нормаланма шәртиндән $A = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}$ -дир. (36.13), (36.15) вә (36.16)-дан исә

$$J(\alpha) = \int \Psi^+ \breve{H}\Psi dx = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar^2\alpha}{\mu} + \frac{\mu\omega_o^2}{\alpha}\right) \qquad (36.17)$$

алыныр. $J(\alpha)$ функсионалынын

$$\frac{dJ(\alpha)}{d\alpha} = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar^2}{\mu} - \frac{\mu\omega_o^2}{\alpha^2}\right) = 0$$

екстремаллыг шәртиндән $\alpha = \alpha_o = \frac{\mu\omega_o^2}{\hbar}$ алыныр. α-нын бу гијмәтини (36.16) вә (36.17)-дә јазсаг, хәтти оссилјаторун әсас һалынын енержиси вә далға функсијасы үчүн

$$E_o = \frac{\hbar\omega_o}{2}$$

вә

$$\Psi_o(x) = \left(\frac{\mu\omega_o}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{\mu\omega_o}{2\hbar}x^2} = \frac{1}{\sqrt{x_o\sqrt{\pi}}}e^{-\xi^2/2} \qquad (36.18)$$

гијмәтләри алыныр. Бурадан көрүнүр ки, E_o вә Ψ_o бу гијмәтләри онларын §35 тапылмыш дәгиг ифадәләри үзәринә дүшүр.

2. Хәтти оссилјаторун биринчи һәјәчанланмыш һалынын енержи вә далға функсијасыны тапмаг үчүн Ψ_1 сынаг функсијасыны сынаг функсијасы үзәринә гојулан шәртләрә әсасән (онун бир дүјүн нөгтәси олмалыдыр)

$$\Psi_1(x) = A\,x\,e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \qquad (36.19)$$

шәклиндә сечилә биләр. Бу һалда

$$\int \Psi_1^+(x)\Psi_1(x)dx = 1 \qquad (36.20)$$

нормаланма вә

$$\int \Psi_o^+\Psi_1 dx = 0 \qquad (36.21)$$

ортогоналлыг шәрти өдәнилмәлидир. Нормаллыг шәртиндән $A = \frac{2\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$ олур. (36.18) вә (36.19) илә верилмиш функсијаларын ортогонал олдуғуну көстәрмәк исә чәтин дејилдир. (36.15) вә (36.19)-дан $J(\Psi_1^+,\Psi_1)$ функсионалы үчүн

$$J(\Psi_1^+,\Psi_1) = J(\alpha) = \int \Psi_1^+\breve{H}\Psi_1 dx = \frac{3}{4}\left(\frac{\hbar^2\alpha}{\mu} + \frac{\mu\omega_o^2}{\alpha}\right)$$

алыныр. α-нын $\alpha_o = \frac{\mu\omega_o}{\hbar}$ гијмәтиндә $J(\alpha)$ минимум гијмәт алыр:

$$J(\alpha_o) = E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_o$$

вә уйғун далға функсијасы исә

$$\Psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}\left(\frac{\mu\omega_o}{\hbar}\right)^{3/2} x\cdot e^{-\frac{\mu\omega_o}{2\hbar}x^2} = \frac{1}{\sqrt{2x_o\sqrt{\pi}}}2\xi e^{-\xi^2/2}$$

олур. Бунлар да §35-дә E_1 вә Ψ_1 үчүн алынмыш дәгиг гијмәтләрин үзәринә дүшүр.

3. Үчүнчү мисал олараг һидрокенәбәнзәр атомларын әсас һалынын енержисини вә далға функсијасыны тапаг. Һидрокенәбәнзәр атомларын $\breve{H}$ оператору (бах §40):

$$\breve{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}. \qquad (36.22)$$

Һидрокенәбәнзәр атомларын әсас һалында орбитал момент сыфра бәрабәр (l=0) олдуғундан Ψ_{noo} далға функсијасы бучаглардан асылы олмајыб, јалныз r-радиус-векторун функсијасыдыр. Дикәр тәрәфдән, атом гапалы системдир вә онун далға функсијасы $r\to\infty$ -да сыфра бәрабәр олмалыдыр. Бурадан сынаг функсија

$$\Psi = Ae^{-\alpha r} \qquad (36.23)$$

кими сечилә биләр.

Нормаланма шәрти

$$\int \Psi^+\Psi(d\vec{r}) = A^2\int e^{-2\alpha r} r^2 dr d\Omega = 4\pi A^2 \int_o^\infty e^{-2\alpha r} r^2 dr = 1.$$

A вуруғу үчүн $A = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$ гијмәти алыныр.

(36.22) вә (36.23)-дән $J(\alpha)$ функсионалы

$$J(\alpha) = \frac{2h^2\alpha^3}{\mu}\int_o^\infty e^{-\alpha r}\nabla^2 e^{-\alpha r} r^2 dr - 4Z\alpha^3 e^2 \int_o^\infty e^{-2\alpha r} r dr$$

олар. Ики операторун һасилиндән ибарәт оператора ујғун гошма операторун тапылмасы гајдасындан истифадә етдикдә

$$\int_o^\infty e^{-\alpha r}\nabla^2 e^{-\alpha r} r^2 dr = \int_o^\infty (\vec{\nabla} e^{-\alpha r})^2 r^2 dr.$$

$\vec{\nabla}$ операторунун сферик координатлардакы компонентләринин $\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}$, $\nabla_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}$ вә $\nabla_\varphi = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$J(\alpha) = \frac{2\hbar^2\alpha^3}{\mu}\int_o^\infty\left(\frac{\partial}{\partial r}e^{-\alpha r}\right)^2 r^2 dr - 4\alpha^3 Ze^2\int_o^\infty e^{-2\alpha r} r dr$$

олур. Бу интеграллары һиссә-һиссә ачдыгда

$$\int_o^\infty\left(\frac{\partial}{\partial r}e^{-\alpha r}\right)^2 r^2 dr = \frac{1}{4\alpha};\qquad \int_o^\infty e^{-2\alpha r} r dr = \frac{1}{4\alpha^2}$$

алыныр. Демәли

$$J(\alpha) = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu} - \alpha e^2 Z. \qquad (36.24)$$

Бу функсионал α-нын $\alpha_o = \frac{\mu e^2 Z}{\hbar^2} = \frac{Z}{a}$ гијмәтиндә минимум олур. α-нын бу гијмәтини (36.23) вә (36.24)-дә јеринә јаздыгда һидрокенә бәнзәр атомларын әсас һалынын енержи вә далға функсијасы үчүн (бах (40.26))

$$E_{1s} = J(\alpha_o) = -\frac{Ze^2}{2a}$$

вә (бах (40.40))

$$\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} - e^{-\frac{Zr}{a}}$$

ифадәләри алыныр. $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ – биринчи Бор орбитинин радиусудур.

Јухарыдакы мисаллардан көрүнүр ки, Ритсин вариасија методу системин әсас һалынын енержисини вә далға функсијасыны тапмаг үчүн әлверишлидир. Лакин һәјәчанланмыш сәвијјәләрин енержиси вә далға функсијасы тапылан заман даһа мүрәккәб сынаг функсијасынын сечилмәсиндә, бурахылан хәтанын тәртиб вә ишарәсинин тә'јин едилмәсиндә тәсадүф олунан чәтинликләр вариасија методунун һәјәчанланмыш һаллара тәтбигинә чох еһтијатла јанашмағы тәләб едир.

§ 37. ҺАРМОНИК ОССИЛЈАТОР ЕНЕРЖИ ТӘСВИРИНДӘ

Хәтти һармоник оссилјатор үчүн координат тәсвириндә алдығымыз нәтичәләри, мүхтәлиф тәсвирләрин еквивалентлији бахымындан, истәнилән башга тәсвирдә – енержи тәсвириндә дә алмаг олар.

Хәтти һармоник оссилјаторун классик һәрәкәт тәнлији (35.2′) шәклиндәдир:

$$\ddot{x} + \omega_o^2 x = 0. \qquad (35.2')$$

Ујғунлуг принсипинә көрә квант механикасында она ујғун оператор тәнлик

$$\ddot{\breve{x}} + \omega_o^2\breve{x} = 0 \qquad (37.1)$$

олар. Бу тәнлији енержи тәсвириндә јазаг.

Һәр һансы операторун тәсвиринин верилмәси дедикдә онун там систем тәшкил едән, јә'ни (35.34) шәртини өдәјән мәхсуси функсијалар чохлуғунун тәсвирин базиси кими сечилмәси баша дүшүлүр. Хәтти оссилјатор үчүн бу функсијалар (35.33) ифадәси илә верилмишдир.

Онлар $\breve{H} = \frac{\breve{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_o^2\breve{x}^2}{2}$ енержи операторунун мәхсуси функсијалары-дыр. (37.1) тәнлијини енержи тәсвириндә јазмаг үчүн ону солдан $\Psi_m^+(\xi)$ вә сағдан $\Psi_n(\xi)$ функсијаларына вуруб, бүтүн фәза (бир өлчүлү) үзрә интегралламаг лазымдыр:

$$\int \Psi_m^+(\xi)\ddot{\breve{x}}\Psi_n(\xi)dx + \omega_o^2\int \Psi_m^+(\xi)\breve{x}\Psi_n(\xi)dx = 0$$

вә ја

$$\ddot{x}_{mn} + \omega_o^2 x_{mn} = 0. \qquad (37.2)$$

$\dot{\breve{x}}$ вә $\breve{x}$ операторлары үчүн јазылмыш

$$\dot{\breve{x}} = \frac{i}{\hbar}(\breve{H}\breve{x} - \breve{x}\breve{H}) = \frac{1}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{x}\right]$$

һәрәкәт тәнлијини енержи тәсвириндә јазсаг,

$$\dot{x}_{mn} = \frac{i}{\hbar}\left((Hx)_{mn} - (xH)_{mn}\right) = \frac{1}{\hbar}\sum_k (H_{mk}x_{kn} - x_{mk}H_{kn})$$

алырыг. $H_{mk} = E_k\delta_{mk}$, $\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\dot{x}_{mn} = i\omega_{mn}x_{mn} \qquad (37.3)$$

алынар. (37.3)-дән бир дә замана көрә төрәмә көтүрүб, (37.3)-дән истифадә етсәк

$$\ddot{x}_{mn} = -\omega_{mn}^2 x_{mn}. \qquad (37.4)$$

Буну (37.2)-дә јеринә јазсаг, онда

$$(\omega_{mn}^2 - \omega_o^2)x_{mn} = 0. \qquad (37.5)$$

Бу тәнлијин ики һәлли вардыр:

$$\begin{aligned} &\omega_{mn} = \omega_o, \quad && x_{mn} \neq 0 \\ &\omega_{mn} \neq \omega_o, \quad && x_{mn} = 0. \end{aligned} \qquad (37.6)$$

x_{mn} матриса елементләринин билаваситә һесабланмасы көстәрир ки, (35.43-ә бах), бу чохлугдан јалныз $m=n\pm1$-ә ујғун ики $x_{n-1,n}$ вә $x_{n+1,n}$ матриса елементләри сыфырдан фәргли дир. Онлара ујғун кечид тезликләри $\omega_{n,n\pm1} = \pm\omega_o$ олур.

Енержи тәсвириндә сыфырдан фәргли матриса елементләрини һесабламаг үчүн импулс илә координат операторлары арасындакы коммутасија шәртиндән истифадә едәк:

$$\dot{\breve{x}}\breve{x} - \breve{x}\dot{\breve{x}} = -\frac{i\hbar}{m}, \qquad (36.7)$$

(бурада $\breve{p} = m\dot{\breve{x}}$ көтүрүлмүшдүр). Бу тәнлик енержи тәсвириндә

$$(\dot{x}x)_{mn} - (x\dot{x})_{mn} = -\frac{i\hbar}{m}\delta_{mn} \qquad (37.8)$$

шәклинә дүшүр. (37.3)-ә әсасән

$$\sum_k (i\omega_{mk}x_{mk}x_{kn} - i\omega_{kn}x_{mk}x_{kn}) = -\frac{i\hbar}{m}\delta_{mn}. \qquad (37.9)$$

Бурада $m=n$ көтүрсәк,

$$\sum_k (\omega_{nk}x_{nk}x_{kn} - \omega_{kn}x_{nk}x_{kn}) = -\frac{\hbar}{m}. \qquad (37.10)$$

Бу чәмдә јалныз $k=n\pm1$ ујғун (јә'ни $x_{n-1,n}$ вә $x_{n+1,n}$ матриса елементләри) һәдләр сыфырдан фәргли галыр. $x_{nk}=x_{kn}$ вә $\omega_{n+1,n}=\omega_o$, $\omega_{n-1,n}=-\omega_o$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$(x_{n+1,n})^2 - (x_{n,n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega_o}. \qquad (37.11)$$

Оссилјаторун енержи сәвијјәсини тә'јин едән n квант әдәди $n=0,1,2,...$ там мүсбәт гијмәтләр алдығындан $(x_{mn})^2$ әдәдләр чохлуғу јухарыдан гејри-мәһдуд, ашағыдан исә мәһдуд әдәди силсилә әмәлә кәтирир. Доғрудан да, $n=0$-да $x_{n,\,n-1}$ һәдди $x_{o\text{-}1}$-ә чеврилир. Һармоник оссилјатор енержинин $E_o = \frac{\hbar\omega_o}{2}$ минимум гијмәтинә ујғун әсас һалдан ашағыда јерләшән E_{-1} һалына (сәвијјәсинә) малик ола билмәз. Она көрә $E_o \leftrightarrow E_{-1}$ кечидләрини тә'јин едән $x_{o\text{-}1}$ матрис елементи ејнилик кими сыфра бәрабәр олмалыдыр: $x_{o\text{-}1}=0$ бу да $(x_{mn})^2$ әдәди силсиләсини ашағыдан мәһдуд едир.

(37.11) бәрабәрлијиндә $n=1,2,...$ гијмәтләрини вериб, силсиләнин дикәр һәдләрини һесабласаг,

$$x_{n,n-1} = x_{n-1,n} = x_o\sqrt{\frac{n}{2}} \qquad (37.12)$$

алыныр. Бурада n-и $n+1$ илә əвəз етсәк, силсиләнин сыфырдан фәргли икинчи груп һәдләрини аларыг:

$$x_{n+1,n} = x_{n,n+1} = x_o\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,. \qquad (37.13)$$

Беләликлә $\{x_{mn}\}$ чохлуғу үмуми шәкилдә

$$x_{mn} = x_o\left\{\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right\} \qquad (37.14)$$

шәклиндә јазыла биләр.

Координат операторунун матриса елементләринин мә'лум гијмәтләриндә

$$p_{mn} = im\omega_{mn}x_{mn}$$

бәрабәрлијинә әсасән оссилјаторун импулс операторунун сыфырдан фәргли матриса елементләрини јазмаг олар:

$$p_{n-1,n} = im\omega_{n-1,n}x_{n-1,n}\,, \qquad (37.15)$$

$$p_{n+1,n} = im\omega_{n+1,n}x_{n+1,n}\,.$$

x_{mn} вә p_{mn}- ин мә'лум гијмәтләриндә оссилјаторун Һамилтон операторунун өз тәсвириндәки ифадәсини (јә'ни матрисасыны) вә мәхсуси гијмәтләр спектрини тапмаг олар:

$$H_{mn} = \sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{1}{2m}p_{mk}p_{kn} + \frac{m\omega_o^2}{2}x_{mk}x_{kn}\right) =$$

$$= \frac{m}{2}\sum_k\left(i^2\omega_{mk}\omega_{kn}x_{mk}x_{kn} + \omega_o^2x_{mk}x_{kn}\right) = \qquad (37.16)$$

$$= \frac{m}{2}\sum_k(-\omega_{mk}\omega_{kn} + \omega_o^2)x_{mk}x_{kn}\,.$$

Һәр бир матриса өз тәсвириндә диагонал олдуғундан, јә'ни H_{mn} үчүн

$$H_{mn} = E_n\,\delta_{mn}$$

шәрти өдәнилдијиндән (буну (37.15)-ин көмәји илә асанлыгла көстәрмәк олар):

$$H_{nn} = E_n = \frac{m}{2}\sum_k(\omega_{nk}^2 + \omega_o^2)|x_{nk}|^2$$

вә јахуд (37.14)-ә әсасән

$$E_n = h\omega_o(n+\frac{1}{2})$$

олар, јә'ни E_n үчүн координат тәсвириндә (35.27) илә верилмиш ифадә алыныр.

§ 38. ХӘТТИ ҺАРМОНИК ОССИЛЈАТОР N-ТӘСВИРИНДӘ

Тәсвир нәзәријјәсинә һәср олунмуш фәсилдә тәсвирә тә'риф верәркән гејд етмишдик ки, системин далға функсијасы координатлардан асылы оланда она x-тәсвири, импулсдан асылы оланда p-тәсвири вә и.а. дејәчәјик. §29-да һал вектору анлајышы илә таныш олдугда исә гејд етдик ки, кет вә бра - векторлары әсасән квант әдәдләрин функсијасы кими верилир. Белә үмуми тәсвирдә һал векторунун вә операторларын мүәјјән тәсвирин сечилмәсиндән асылы олмајан хассәләрини билмәклә истәнилән квант-механики мәсәләни һәлл етмәк олар. Биз бу тәсвири шәрти олараг квант әдәдләри тәсвири вә ја N -тәсвири адландырачағыг.

Әввәлчә N -тәсвирин мәзмуну илә таныш олаг. Бу мәгсәдлә $\breve{x}$ вә $\breve{p}$ операторларын хәтти функсијасы олан

$$\breve{a} = \frac{1}{\sqrt{2}\,x_o}(x + \frac{i}{m\omega}\breve{p}), \qquad \breve{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}\,x_o}(x - \frac{i}{m\omega}\breve{p}) \qquad (38.1)$$

операторлары дахил едәк. $\breve{x}$ вә $\breve{p}$ ермит операторлар олдуғундан $\breve{a}$ оператору $\breve{a}^+$ операторуна ермит гошма оператордур.

$\breve{x}$ илә $\breve{p}$ операторлары арасындакы

$$\breve{p}\breve{x} - \breve{x}\breve{p} = -i\hbar \qquad (38.2)$$

коммутасија мүнасибәтиндә (38.1)-дән $\breve{x}$ вә $\breve{p}$ -ни a вә a^+ илә әвәз етсәк, ахырынчылар үчүн

$$aa^+ - a^+a = 1 \qquad (38.3)$$

мүнасибәти алыныр.

Фәрз едәк ки, a вә a^+ операторлары N-тәсвириндә верилмишдир вә $|n>$ вектору $\breve{N}=a^+a$ операторунун n мәхсуси гијмәтинә ујғун мәхсуси векторудур:

$$\breve{N}\ |n\rangle = a^+a\ |n\rangle = n\ |n\rangle . \qquad (38.4)$$

Әввәлчә n әдәдинин јалныз мүсбәт гијмәтләр ала билдијини исбат едәк. Бунун үчүн $<n|$ векторунун (38.4) илә скалјар һасилини көтүрәк

$$\langle n\ |\breve{N}\ |n\rangle = \langle n\ |a^+a\ |n\rangle = n\langle\ n\ |n\ \rangle \qquad (38.5)$$

$$\int \Psi_n^* \Psi_n dx = \langle n\ |n\rangle = 1$$

әсасән

$$n = \langle n\ |a^+a\ |n\rangle = \langle n\ |\breve{a}^+\ |n'\rangle\langle n'\ |\breve{a}\ |n\rangle \qquad (38.5')$$

олар, a^+ вә a операторларын ермит гошмалыг хассәсиндән истифадә етсәк, ахырынчы ифадә

$$|\langle n'/a/n\rangle|^2 = n$$

шәклиндә јазыла биләр. Јә'ни $n \geq 0$ -дыр.

Инди дә $\breve{N}=\breve{a}^+a$ операторунун мәхсуси гијмәтләр вә мәхсуси векторлар спектрләрини тапаг. Бунун үчүн $a|n>$ векторуну $|n'>$ кими ишарә едиб, она $\breve{N}$ оператору илә тә'сир едәк. (38.3) вә (38.4) -дән

$$\breve{N}\ |n'\rangle = a^+aa\ |n\rangle = a(a^+a-1)\ |n\rangle = (n-1)a\ |n\rangle = (n-1)\ |n'\rangle \quad (38.6)$$

аларыг. Демәли, $a|n>$ вектору $\breve{N}$ операторунун $n-1$ мәхсуси гијмәтинә ујғун мәхсуси векторудур. Буна охшар оларағ көстәрмәк олар ки, $a^2\ |n\rangle$, $a^3\ |n\rangle, \ldots$ векторлары $\breve{N}$ операторунун ујғун олараг $n-2$, $n-3$, ... мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси векторлары олачагдыр.

Һәмин әмәлијјаты a^+ оператору үчүн апараг. $a^+|n\rangle = |n''\rangle$ векторуна $\breve{N}$ илә тә'сир едәк. (38.3) вә (38.4) -дән

$$\breve{N}\ |n''\rangle = \breve{a}^+\breve{a}\breve{a}^+\ |n\rangle = \breve{a}^+(\breve{a}^+\breve{a}+1)\ |n\rangle = (n+1)a^+\ |n\rangle = (n+1)\ |n''\rangle$$

алынар, јә'ни $a^+|n\rangle = |n''>$ вектору $\breve{N}$ -ин $n+1$ мәхсуси гијмәтинә ујғун мәхсуси векторудур. Ејни шәкилдә $a^{+2}\ |n\rangle$, $a^{+3}\ |n\rangle, \ldots$ векторлары $\breve{N}$ -

операторунун $n+2$, $n+3$, ..., ∞ мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси векторлары олар.

Бурадан белә бир нәтичәјә кәлирик ки, $\breve{N}$ операторунун мәхсуси гијмәтләр спектри $0,1,2,\ldots,\infty$ кими мүсбәт там әдәдләр ардычыллығы тәшкил едир. Онлара ујғун мәхсуси векторлар ардычыллығы исә бу векторлардан биринә (мәсәлән, $|n>$ векторуна) a вә ја a^+ оператору илә тәкрар тә'сир нәтичәсиндә алыныр.

$\breve{a}$ вә $\breve{a}^+$ операторларынын тә'сир ганунуну тапаг вә онларын физики мә'насыны ајдынлашдыраг. Јухарыда гејд едилмишди ки, $a|n>$ вә $a^+|n>$ векторлары ујғун олараг $n-1$ вә $n+1$ мәхсуси гијмәтләринә ујғун векторлардыр. Онда онлар $|n-1>$ вә $|n+1>$ векторларындан сабитлә фәргләнәр.

$$a\ |n\rangle = \gamma\ |n-1\rangle , \qquad (38.7)$$

$$a^+\ |n\rangle = \beta\ |n+1\rangle .$$

(38.7)-ни ујғун олараг солдан $|n'\rangle$ вә $|n''\rangle$ векторларына скалјар вуруб, һал векторлары үчүн

$$\langle n'\ |n-1\rangle = \delta_{n',n-1}, \qquad \langle n''\ |n+1\rangle = \delta_{n'',n+1} \qquad (38.8)$$

ортонормаланма шәртләрини нәзәрә алсаг,

$$\langle n'\ |a\ |n\rangle = \gamma\delta_{n',n-1}$$

$$\langle n''\ |a^+\ |n\rangle = \beta\delta_{n'',n+1} \qquad (38.9)$$

алынар. Башга сөзлә, $\breve{a}$ вә $\breve{a}^+$ операторларынын јалныз

$$\langle n-1\ |a\ |n\rangle = \gamma, \qquad \langle n+1\ |a^+\ |n\rangle = \beta \qquad (38.10)$$

матриса елементләри сыфырдан фәргли галыр.

γ вә β сабитләрини тапмаг үчүн (38.5) бәрабәрлијиндән истифадә едәк. (38.5′) вә (38.8) мүнасибәтләринин көмәји илә n' үзрә чәм көтүрсәк,

$$n = \langle n\ |a^+\ |n-1\rangle\langle n-1\ |a\ |n\rangle = |\langle n-1\ |a\ |n\rangle|^2 \qquad (38.11)$$

вә бурадан да

$$\langle n-1\ |a\ |n\rangle = \sqrt{n} \text{ вә ја } a\ |n\rangle = \sqrt{n}\ |n-1\rangle \qquad (38.12)$$

алынар, јә'ни $\gamma = \sqrt{n}$.

(38.11)-дә n-и $n+1$ илә әвәз етсәк

$$n+1=\langle n+1|a^{+}|n\rangle\langle n|a|n+1\rangle=|\langle n+1|a^{+}|n\rangle|^{2} \qquad (38.13)$$

јахуд

$$\langle n+1|a^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}; \quad a^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}\rangle \qquad (38.14)$$

олар, јә'ни $\beta=\sqrt{n+1}$.

Беләликлә, $\hat{N}$ операторунун мәхсуси векторлары арасында, онлары бир-бири илә әлагәләндирән (38.12) вә (38.14) рекурент дүстурлары алыныр. Бурадан $n=0$ квант әдәдинә ујғун $|0>$ вектору үчүн

$$a|0>=0 \qquad (38.15)$$

башланғыч шәрти өдәнилир. Системин $|0>$ һалы онун әсас һалы адланыр. $n=1,2,3,...$ квант әдәдләринә ујғун мәхсуси векторлары исә (38.14) рекурент дүстурунда $|0>$ векторуна a^{+} операторунун тәкрар тә'сири нәтиҹәси олараг алыныр. Системин бу ахырынҹы һаллары һәјәҹанланмыш һаллары адланыр:

$$a^{+}|0\rangle=\sqrt{1}\,|1\rangle, \quad a^{2}|0\rangle=\sqrt{2\cdot 1}\,|2\rangle,\ldots,a^{+n}|0\rangle=\sqrt{1\cdot 2\cdots n}\,|n\rangle,$$

јә'ни ихтијари квант һалына ујғун $|n>$ вектору

$$|n\rangle=\frac{a^{+n}|0\rangle}{\sqrt{n!}} \qquad (38.16)$$

бәрабәрлији илә тә'јин олунур.

(38.16)-да алынан $|0>$, $|1>$, $|n>$ һал векторлары ардычыллығы N-тәсвири адландырдығымыз тәсвирин базис векторлар системини тәшкил едир, јә'ни бу ардычыллыг там систем олур. Бу тәсвирдә јәгин ки, $|N|$ матрисасы диагонал олар (матриса өз тәсвириндә верилир). Доғрудан да, (38.5) бәрабәрлијиндән

$$|N|=\begin{vmatrix}0 & 0 & 0 & \ldots & 0\\ 0 & 1 & 0 & \ldots & 0\\ 0 & 0 & 2 & \ldots & 0\\ 0 & 0 & 0 & 3 \ldots & 0\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\end{vmatrix} \qquad (38.17)$$

$\breve{a}$ вә $\breve{a}^{+}$ операторлара ујғун матрисалар исә (38.12) вә (38.14)-дән

$$|a|=\begin{vmatrix}0 & \sqrt{1} & 0 & \ldots\ldots & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \ldots & 0\\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \ldots & 0\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\end{vmatrix} \qquad (38.18)$$

вә

$$|a^{+}|=\begin{vmatrix}0 & 0 & \ldots\ldots & 0\\ \sqrt{1} & 0 & \ldots\ldots & 0\\ 0 & \sqrt{2} & 0 \ldots\ldots & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{3}\; 0 \ldots & 0\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\end{vmatrix} \qquad (38.19)$$

олур.

Инди дә мүәјјән бир тәсвирә кечмәдән үмуми һесаб олунан бу тәсвирдә хәтти һармоник оссилјаторун һал векторларыны вә енержи спектрләрини тапаг.

Хәтти һармоник оссилјаторун

$$\breve{H}=\frac{\breve{p}^{2}}{2m}+\frac{m\omega^{2}x^{2}}{2} \qquad (38.20)$$

ифадәсиндә $\breve{x}$ вә $\breve{p}$ операторларыны a вә a^{+} операторлары илә әвәз етсәк,

$$\breve{H}=\frac{\hbar\omega}{2}(a^{+}a+aa^{+}) \qquad (38.21)$$

алынар. Бурада (38.3) коммутасија мүнасибәтләринин вә (38.4) вә ја (38.5) тәнликләринин көмәји илә

$$\langle n/H/n\rangle=E_{n}=\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) \qquad (38.22)$$

алынар. Оссилјаторун енержи спектри үчүн алынмыш бу ифадә тамамилә координат тәсвириндә Шрединкер тәнлијинин узун узады һәлли нәтиҹәсиндә алдығымыз (35.27)-нин үзәринә дүшүр.

Бурадан көрүнүр ки, N-тәсвириндә $\breve{N}$ операторунун мәхсуси гијмәти олан n квант әдәди хәтти осилјатор үчүн баш квант әдәди ролуну ојнајыр, белә ки, n -ин һәр ики һалда алдығы гијмәтләр ардычыллыглары бир-биринин үзәринә дүшүр.

Дикәр тәрәфдән биз јухарыда гејд етмишдик ки, (38.22)-јә дахил олан n әдәди осилјаторун E_n һалында олан рәгс квантларынын сајыны көстәрир. Бу бахымдан (38.12) бәрабәрлијини $\breve{a}$ операторунун тә'сири нәтичәсиндә $|n>$ квант һалында бир рәгс квантынын азалмасы һесабына онун $|n\text{-}1>$ һалына кечмәси, (38.14) бәрабәрлијини исә $\breve{a}^+$ операторунун тә'сири нәтичәсиндә $|n>$ һалынын бир рәгс кванты чох олан $|n+1>$ һалына кечиди кими баша дүшмәк оларды. Беләликлә, $\breve{a}$ -нын тә'сири бахылан һалдан бир рәгс квантынын удулмасына, a^+ -нын тә'сири исә бахылан һалда бир рәгс квантынын артмасына кәтирир. Бу мә'нада *a– удулма оператору*, a^+ исә *догулма оператору* адланыр.

Һармоник осилјаторун бу тәсвири саһәнин квант нәзәријјәсиндә, кристалларда вә молекулларда мејдана чыхан рәгсләрин тәһлилиндә вә еләчә дә шүаланманын квант нәзәријјәсиндә (бах §50) кениш тәтбиг олунур.

N-тәсвирин тәһлилиндә гејд етдик ки, (38.15) вә (38.16) тәнликләри $\breve{N}$ операторунун

$$|0>,\ |1>,\ |2>,\ \ldots\ |n> \qquad (38.23)$$

мәхсуси векторлар чохлуғуну алмаға имкан верир. Бу иши хәтти осилјатор үчүн көрәк. Әввәлчә E_0 әсас һалын (n=0) далға функсијасыны тапаг. Әсас һалын һал вектору (38.15) тәнлијини өдәјир. (38.1) ифадәси илә верилмиш $\breve{a}$ операторунда $x=x_0\xi$ кәтүрүб онун вә $|n>$ векторунун координат тәсвириндә верилмиш (38.5) ифадәләриндән истифадә етсәк, (38.15) тәнлији

$$a\,|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)\Psi_o(\xi)=0$$

шәклинә дүшәр. Буну интегралласаг,

$$\Psi_o(\xi)=Ce^{-\xi^2/2}, \qquad (38.24)$$

C–нормаланма шәртиндән тапылыр: $C=\frac{1}{\sqrt{x_o\sqrt{\pi}}}$. Бу исә тамамилә (35.38)-дә верилмиш $\Psi_o(x)$ функсијасы үзәринә дүшүр.

$\breve{N}$ операторунун дикәр һал векторларыны һесабламаг үчүн исә, јухарыда дедијимиз кими, (38.16) тәнлијиндән истифадә етмәк лазымдыр. Һармоник осилјаторун n=1-ә ујғун һәјәчанланмыш биринчи стасионар һалын вектору

$$|1\rangle=\frac{a^+\,|0\rangle}{1!} \qquad (38.25)$$

тәнлијиндән һесабланыр. Бу тәнлији координат тәсвириндә јазсаг,

$$\langle x\,|1\rangle=\frac{1}{1!}a^+\langle x\,|0\rangle$$

вә ја

$$\Psi_1(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)\Psi_o(\xi) \quad \text{олар.}$$

$\Psi_o(x)$-ин (38.24) илә верилмиш ифадәсини бурада јазыб, диференсиалы һесабласаг, $\Psi_1(x)$, (35.38)-дә верилмиш икинчи функсијанын үзәринә дүшәр:

$$\Psi_1(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2x_o\sqrt{\pi}}}2\xi e^{-\xi^2/2}.$$

Ејни гајда илә

$$\langle x\,|2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2!}}a^{+2}\,|0\rangle \text{ вә ја } \Psi_2(\xi)=\frac{1}{2\sqrt{2!}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)^2\Psi_o(\xi)$$

ифадәсиндәки диференсиалларын һесабланмасы

$$\Psi_2(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2x_o\sqrt{\pi}}}(2\xi^2-1)e^{-\xi^2/2}$$

функсијасына кәтирир – (35.38)-дә үчүнчү функсија вә и.а.

N-тәсвиринин көмәји илә һармоник осилјаторун $\breve{x}$ операторунун матриса елементләрини чох асан һесабламаг олур. Бунун үчүн $\breve{a}$ вә $\breve{a}^+$ операторларынын (38.1) илә верилмиш ифадәләрини тәрәф-тәрәфә топлајаг:

$$\breve{x} = \frac{x_o}{\sqrt{2}}(a + a^+) . \quad (38.26)$$

(38.12) вә (38.14) мүнасибәтләринә әсасән

$$\langle n-1 \,|x\,| n\rangle = \frac{x_o}{\sqrt{2}}\left(\langle n-1 \,|a\,| n\rangle + \langle n-1 \,|a^+\,| n\rangle \right),$$

бурада $\langle n-1 \,|a^+\,| n\rangle = 0$ олдуғундан

$$\langle n-1 \,|x\,| n\rangle = x_o\sqrt{\frac{n}{2}} = x_{n-1,n} . \quad (38.27)$$

Ејни гајда илә

$$\langle n+1 \,|x\,| n\rangle = x_o\sqrt{\frac{n+1}{2}} = x_{n+1,n} \quad (38.28)$$

олур. Беләликлә, N-тәсвириндән истифадә етмәклә, кифајәт гәдәр садә јолла, хәтти оссилјаторун бүтүн характеристик кәмијјәтләрини һесабламаг олур.

V ФӘСИЛ

ҮЧӨЛЧҮЛҮ ФӘЗАДА ҺӘРӘКӘТ

§ 39. СФЕРИК СИММЕТРИК (МӘРКӘЗИ) САҺӘДӘ ҺӘРӘКӘТ

35–38-чи параграфларда Шрединкер тәнлији бирөлчүлү мәсәләләрин һәллинә тәтбиг едилмишди. Шрединкер тәнлији икинчи тәртиб хүсуси төрәмәли диференсиал тәнлик олдуғундан бирөлчүлү мәсәләләр үчүн о, ади диференсиал тәнлијә кәлир. Үчөлчүлү фәзада истәнилән тәбиәтли саһәдәки һәрәкәт үчүн Шрединкер тәнлијинин үмумијјәтлә аналитик һәллини тапмаг мүмкүн дејилдир. Бу иши јалныз јеканә бир һалда—сферик симметрик саһәдә баш верән һәрәкәт үчүн көрмәк олур.

Сферик симметрик саһә елә саһәләрә дејилир ки, онун һәр бир нөгтәсинин потенсиалы, саһәнин гүввә мәркәзи адланан нөгтәдән (мәнбәјин јерләшдији нөгтә) олан мәсафәнин јалныз мүтләг гијмәтиндән асылы олуб $V(|\vec{r}|) = V(r)$, мәркәзә нәзәрән радиусу r олан сферанын сәтһиндә көтүрүлмүш бүтүн нөгтәләрдә ејни бир гијмәтә малик олсун.

Хәтти оссилјатор кими, мәркәзи саһәдә һәрәкәт, квант механикасынын ән әсас (фундаментал) мәсәләләриндән бириди. Бу мәсәлә бир

вә чохелектронлу атомларын, молекулун квант нәзәријјәсинин вә сәпилмә нәзәријјәсинин әсасыны тәшкил едир.

Мәркәзи саһәдә саһә илә зәррәчијин гаршылыглы тә'сир енержиси јалныз мәсафәнин мүтләг гијмәтиндән асылы олдуғуна көрә зәррәчијин далға функсијасынын бучаглардан асылылыг характери мәркәзи саһәнин тәбиәтиндән асылы олмур.

Сферик симметрик саһәдәки зәррәчијин потенсиал енержисини $V(r)$ илә ишарә етсәк, онун Һамилтон оператору

$$\breve{H} = \frac{\breve{\vec{p}}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \quad (39.1)$$

олар, бурада $\breve{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ – зәррәчијин импулс оператору, $\vec{r}$ – онун радиус векторудур. Бу һал үчүн Шрединкер тәнлији

$$\breve{H}\Psi = E\Psi \quad (39.2)$$

вә ја

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right)\Psi(\vec{r},t) = E\Psi(\vec{r},t) \quad (39.2')$$

олур.

Јухарыда дејилдији кими, истәнилән квант механики систем үчүн јазылмыш үчөлчүлү (39.2′) далға (Шрединкер) тәнлијинин үмуми шәкилдә аналитик һәлләрини тапмаг мүмкүн дејилдир. Бу о заман мүмкүн олур ки, мәсәләнин симметријасы, верилән тәнликдә дәјишәнләрә ајырмаг әмәлијјаты апармаға вә ону бир дәјишәндән асылы диференсиал тәнликләр системи шәклиндә јазмаға имкан версин.

Системин (39.1) Һамилтон операторунун шәклиндән көрүнүр ки, о, фәза инверсијасына ($x \to -x$, $y \to -y$, $z \to -z$ әвәзинә) көрә инвариантдыр, јә'ни $\breve{I}$ инверсија оператору $\breve{H}$ илә коммутасија едир, $\breve{I}$ ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығына көрә системин чүтлүјү һәрәкәт интегралы олур (бах §15). $\breve{I}$ -дән башга һәрәкәт мигдары моменти квадраты оператору $\breve{L}^2$ вә онун проjексијаларындан бири (мәсәлән $\breve{L}_z$) (39.1) Һамилтон оператору илә коммутасија етдијиндән онлар да һәрәкәт интегралларыдыр (бах §14). Беләликлә $\breve{H}, \breve{L}^2, \breve{L}_z$ вә $\breve{I}$ операторлары ејни бир мәхсуси $\Psi(x,y,z,t) = \Psi$ функсијасына маликдир:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \right)\Psi = E\Psi , \quad (39.2')$$

$$\breve{L}^2\Psi = L^2\Psi , \quad (39.3)$$

$$\breve{L}_z\Psi = L_z\Psi , \quad (39.4)$$

$$\breve{I}\Psi = I\Psi . \quad (39.5)$$

Бурадан чыхыр ки, (39.2′) тәнлијинин елә һәлләри тапылмалыдыр ки, онлар (39.3), (39.4) вә (39.5) тәнликләринин дә һәлли олсун.

Мәркәзи саһәдә һәрәкәт едән зәррәчијин далға тәнлији үчүн, сферик координат системиндә һәмишә дәјишәнләрә ајырмаг әмәлијјаты апармаг олур. Сферик координат системинин башланғычыны саһәнин гүввә мәркәзиндә јерләшдириб, z охуну полјар ох үзрә јөнәлтмәклә (x,y,z) декарт координат системиндән (r,θ,φ) сферик системә кечәк:

$$x=r\sin\theta\cos\varphi;\ y=r\sin\theta\sin\varphi;\ z=r\cos\theta \qquad (39.6)$$
$$0\le r\le\infty;\ 0\le\theta\le\pi\ \ 0\le\varphi\le 2\pi.$$

Бу заман

$$V=V(r).\ \Psi(\vec{r})=\Psi(x,y,z)=\Psi(r,\theta,\varphi).$$

$\nabla^2=\Delta$ Лаплас оператору исә

$$\nabla^2=\nabla_r^2+\frac{\nabla_{\theta\varphi}^2}{r^2} \qquad (39.7)$$

шәклини алыр. Бурада

$$\nabla_r^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right). \qquad (39.8)$$

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Сферик координат системиндә (39.2′) тәнлији вә (39.3)–(39.5) тәнликләри (39.6)–(39.8) бәрабәрликләринә әсасән

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_r^2+\frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2}{r^2}\right)+V(r)\right)\Psi=E\Psi \qquad (39.2')$$

$$-\hbar^2\nabla_{\theta,\varphi}^2\Psi=L^2\Psi \qquad (39.3')$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi=L_z\Psi \qquad (39.4')$$

$$\breve{I}\Psi=I\Psi \qquad (39.5')$$

шәклинә дүшүр.

(39.3′) вә (39.4′) тәнликләринин һәлли илә биз §14-дә мәшғул олмушдуг. $\breve{L}^2$ вә $\breve{L}_z$ операторларынын мәхсуси функсијалар вә мәхсуси гијмәтләр спектрләри үчүн (14.28′) вә (14.20) ифадәләри алынмышды. Бу функсијалар јалныз θ вә φ бучаг дәјишәнләриндән асылыдыр. (39.2′)

тәнлијинин һәлли олан Ψ –функсијасы исә r дәјишәниндән дә асылы олмалыдыр: $\Psi(r,\theta,\varphi)$. (39.2″) тәнлијинин сол тәрәфиндә дуран операторун шәклиндән көрүнүр ки, (39.2″)-ин һәллини

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi) \qquad (39.9)$$

шәклиндә ахтармагла, арада дәјишәнләрә ајырма әмәлијјатыны апармаг олар. Лакин буна еһтијач јохдур, чүнки (39.3′)-дән

$$\breve{L}^2Y(\theta,\varphi)=-\hbar^2\nabla_{\theta,\varphi}^2Y(\theta,\varphi)=\hbar^2l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

олдуғуну нәзәрә алсаг, радиал функсија адланан $R(r)$ үчүн

$$\nabla_r^2R(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r)=0 \qquad (39.10)$$

тәнлији алыныр.

Мәркәзи саһәдә һәрәкәт едән системин E енержисинин мүмкүн олан гијмәтләри (39.10) тәнлијиндән тә'јин олунур. Онлар $V(r)$-ин шәклиндән асылы олур. Бундан башга онлар системин L^2 һәрәкәт мигдары моментиндән (l орбитал квант әдәдиндән) дә асылы ола биләр. Лакин E-нин гијмәтләри L_z -дән, јахуд m магнит квант әдәдиндән асылы олмамалыдыр, чүнки (39.10)-а $\breve{L}_z$ оператору дахил олмур. Бу, һәрәкәт баш верән саһәнин мәркәзи саһә олмасы илә изаһ олунур, белә ки фәзада бүтүн истигамәтләр ејни еһтималлы олдуғундан, системин енержиси һәрәкәт мигдары моментинин фәзадакы истигамәтиндән асылы ола билмәз.

(39.10) тәнлијиндән көрүнүр ки, онун һәлләринин характери системин E там енержисинин $V(r)$ -ин $r\to\infty$ -дакы гијмәтиндән бөјүк вә ја кичик олмасы илә тә'јин олунур. Доғрудан да, бүтүн реал физики системләрдә мәсафәнин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә гаршылыглы тә'сир олдугча кичик, сыфра јахын олур: $V(r)\big|_{r\to\infty}=0$. Лакин (39.10) тәнлијинин һәллиндә $E<0$ вә $E>0$ кими ики һалы фәргләндирмәк лазымдыр.

$V(r)$ потенсиал енержинин гүввә мәркәзиндәки (координат башланғычындакы) гијмәтинә кәлдикдә исә биз елә саһәләрдәки һәрәкәтә бахачағыг ки, онлар үчүн потенсиал енержи гүввә мәркәзиндә ја сонлу галсын вә ја да

$$\lim_{r\to0}V(r)r^2=0 \qquad (39.11)$$

шәртини өдәсин*.

---

*Гејд едәк ки, §35-дә тәһлил етдијимиз хәтти һармоник оссилјаторун потенсиал енержиси үчүн дә (39.11) шәрти өдәнилир.

(39.10) тәнлијинин һәллини тапмаг үчүн

$$R(r)=\frac{u(r)}{r} \qquad (39.12)$$

әвәзини гәбул едәк. Онда (39.10) тәнлији

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\Big(E-V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \Big)u(r)=0\,. \qquad (39.13)$$

(39.13) тәнлији икинчи тәртиб диференсиал тәнлик олдуғундан онун үмуми һәлли

$$u(r)=C_1u_1(r)+C_2u_2(r) \qquad (39.14)$$

шәклиндә олар. Бурада C_1 вә C_2 ихтијари сабитләр, $u_1(r)$ вә $u_2(r)$ исә E-дән вә тәнлијә дахил олан дикәр параметрләрдән асылы онун хәтти асылы олмајан һәлләридир.

Јухарыда дәфәләрлә гејд едилмишди ки, Шрединкер тәнлијинин һәр истәнилән һәлли физики мә'наја малик дејилдир. Далға функсијасы үч стандарт шәртлә јанашы нормаланма шәртини дә өдәмәлидир. Бу шәртин өдәнилмәси үчүн исә $R(r)$ вә ја $u(r)$ функсијалары r-ин дәјишмә $(0,\infty)$ областында мәхсуси нөгтәләрә малик олмамалыдыр. (39.13) тәнлијиндән көрүнүр ки, r = 0 вә $r=\infty$ нөгтәләри $u(r)$-ин мәхсуси нөгтәләридир. Она көрә дә әввәлчә (39.13) тәнлијини бу нөгтәләрин јахын әтрафында тәдгиг едәк.

а) (39.13) тәнлијинин $r\to\infty$ -да сонлу галан асимптотик һәллини тапаг.

$u(r)$ үчүн $u(r\to\infty)=0$ шәртини вә $\frac{1}{r^2}$ илә мүтәнасиб олан һәдләрин дикәр һәдләрә нәзәрән сонсуз кичик кәмијјәт олдуғуну нәзәрә алсаг, (39.13) тәнлији

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}u(r)=0 \qquad (39.15)$$

шәклини алар. Бурада $E>0$ һалы үчүн $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$, $E<0$ һалы үчүн исә $\lambda^2=-\frac{2m|E|}{\hbar^2}$ әвәзләрини гәбул едәк. Онда (39.15) тәнлији ики тәнлијә парчаланыр:

$$u''(r)+k^2u(r)=0\,, \qquad (39.16)$$

$$u''(r)-\lambda^2u(r)=0\,. \qquad (39.17)$$

Онларын характеристик тәнликләри

$$m^2+k^2=0, \quad m=\pm\, ik$$
$$m^2-\lambda^2=0, \quad m=\pm\,\lambda$$

әсасында ујғун һәлләр

$$u(r)=ae^{ikr}+be^{-ikr}, \qquad E>0 \qquad (39.18)$$

$$u(r)=a_1e^{-\lambda r}+b_1e^{\lambda r}, \qquad E<0 \qquad (39.19)$$

олар. (39.12)-јә әсасән (39.10) тәнлијинин $r\to\infty$ -а ујғун асимптотик һәлләри

$$R(r)=a\frac{e^{ikr}}{r}+b\frac{e^{-ikr}}{r}, \qquad E>0 \qquad (39.18')$$

$$R(r)=a_1\frac{e^{-\lambda r}}{r}+b_1\frac{e^{\lambda r}}{r}, \qquad E<0 \qquad (39.19')$$

олар.

$E>0$ һалында (39.15) тәнлијинин (39.18′) һәлли a вә b сабитләринин истәнилән гијмәтләриндә сонлу вә кәсилмәз галыр. О, мәркәзә дүшән вә мәркәздән сәпилән сферик далғаларын суперпозисијасы шәклиндәдир. Бу һалда зәррәчијин радиусу r илә $r+dr$ арасында дәјишән сферик тәбәгәнин дахилиндә олмасы еһтималы r-ин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә ($r\to\infty$) сонлу галыр.

$$dW(r)=W(r)\,(d\vec{r})=|R^2|r^2drd\Omega=4\pi\left|ae^{ikr}+be^{-ikr}\right|^2dr\,.$$

Белә һаллар классик механикадакы гејри-периодик орбитләрә ујғун кәлир: зәррәчик сонсузлугдан гүввә мәркәзинә доғру һәрәкәт едир вә сонра јенә сонсузлуға кедир, башга сөзлә онун һәрәкәти инфинит олур.

$E<0$ һалына кәлдикдә исә бурада икинчи һәлл $r\to\infty$ -да сонсузлуға јахынлашыр, нормаланма шәртини өдәмир, јә'ни далға функсијасы квадратик интеграллanan олмур вә системин һеч бир физики һалыны тәсвир едә билмир. Дикәр тәрәфдән, далға функсијасы үзәринә гојулан стандарт шәртләрин өдәнилмәси үчүн b_1=0 сечилмәлидир. Онда

$$u(r)=a_1e^{-\lambda r}, \quad R=a_1\frac{e^{-\lambda r}}{r}\,. \qquad (39.20)$$

Дикәр тәрәфдән (39.13) тәнлијинин (39.14) үмуми һәллинә әсасән b_1 әмсалы она дахил олан C_1 вә C_2 сабитләриндән хәтти асылы олмалыдыр:

$$b_1=a_{11}C_1+a_{12}C_2=0. \qquad (39.21)$$

Бу һалда зәррәчијин радиусу r илә $r+dr$ арасында дәјишән сферик тәбәгәнин дахилиндә олмасы еһтималы

$$dW(r)=\left|R(r)\right|^2 r^2 dr d\Omega = 4\pi\left|a_1 e^{-\lambda r}\right|^2 dr$$

$r\to\infty$ јахынлашанда сыфра јахынлашыр: $W(r\to\infty)=0$, јә'ни зәррәчик јалныз гүввә мәркәзинин јахын әтрафында ола биләр. Башга сөзлә, бу һалда зәррәчик мәһдуд фәзада һәрәкәт едир, онун һәрәкәти **финит** олур. Классик механикада бу һал гапалы орбитләр үзрә баш верән һәрәкәтә ујғундур.

б) Инди дә (39.13) тәнлијинин $r\to 0$ -да сонлу галан асимптотик һәлләрини тапаг.

$V(r)$ үчүн (39.11) шәртини вә $\dfrac{2mE}{\hbar^2}$ һәддинин дә $\dfrac{l(l+1)}{r^2}$ һәддинә нисбәтән чох кичик галачағыны нәзәрә алсаг, (39.13) тәнлији

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}u(r)=0 \qquad (39.22)$$

шәклинә дүшәр. Бунун һәллини $u(r)=r^s$ шәклиндә ахтараг, онда $s(s-1)-l(l+1)=0$, бурадан $s=-1$, вә $s=l+1$ алынар.

Беләликлә

$$u(r)=Cr^{l+1}+\mathcal{D}r^{-l}. \qquad (39.23)$$

$r=0$ -да $u(r)$ -ин сонлу галмасы үчүн $\mathcal{D}=0$ көтүрмәк лазымдыр:

$$u(r)=Cr^{l+1},\quad R(r)=Cr^{l}. \qquad (39.24)$$

Јухарыда олдуғу кими, $\mathcal{D}$ әмсалы да (39.14)-дән C_1 вә C_2 сабитләриндән хәтти асылы олмалыдыр:

$$\mathcal{D}=a_{21}C_1+a_{22}C_2=0. \qquad (39.25)$$

Беләликлә, $E<0$ һалында C_1 вә C_2 сабитләри үчүн (39.21) вә (39.25) тәнликләри шәклиндә бирчинс хәтти тәнликләр системи алыныр. C_1 вә C_2-дән һеч олмаса биринин сыфырдан фәргли гијмәт алмасы үчүн онларын әмсалларындан дүзәлмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр:

$$\left\|a_{ik}\right\|=\begin{vmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{vmatrix}=0. \qquad (39.26)$$

(39.13) тәнлијинин һәлләри E вә она дахил олан башга параметрләрдән асылы олдуғундан a_{ik} кәмијјәтләри дә онлардан асылы олар. Беләликлә,

(39.26) бәрабәрлији E-јә көрә үстлү (трансендент) тәнлијә кәтирир вә онун көкләри $E<0$ һалында енержи операторунун мәхсуси гијмәтләр спектрини верир вә системин енержи спектри дискрет олур (шәкил 14).

$E>0$ һалында исә C_1 вә C_2 сабитләри үзәринә һеч бир мәһдудијјәт гојулмур. Онларын истәнилән гијмәтиндә тәнлијин һәлли сонлу галыр вә системин енержиси истәнилән гијмәт ала билир. Беләликлә, $E>0$ һалында системин енержи спектри кәсилмәз спектр олур.

§ 40. КУЛОН САҺӘСИНДӘ ҺӘРӘКӘТ

Бу §-да биз һидрокенәбәнзәр атомларын квант нәзәријјәси үзәриндә дајаначағыг.

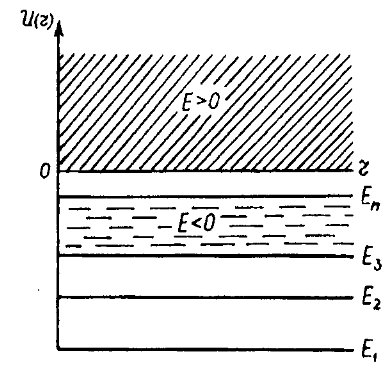
Нүвәнин әтрафында јеканә бир електрон һәрәкәт едән атомлар һидрокенәбәнзәр атомлар адланыр. Һидрокен атому ${}^1_1\mathrm{H}$, бир дәфә ионлашмыш һелиум атому ${}^4_2\mathrm{He}$, ики дәфә ионлашмыш литиум атому ${}^6_3\mathrm{Li}$ белә атомлардандыр. Бу атомларын нүвәләринин јүкүнү $+Ze$, електронун јүкүнү $-e$ илә ишарә едиб, онларын арасындакы мәсафәјә ($\sim 10^{-8}$ *см*) көрә нүвәнин ($\sim 10^{-13}$ *см*) вә електронун хәтти өлчүләринин кифајәт гәдәр кичик олдуғуну нәзәрә алсаг, ики нөгтәви јүк арасындакы гаршылыглы тә'сир енержиси, Кулон ганунуна көрә,

$$V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=-\frac{Ze^2}{\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|} \qquad (40.1)$$

олар.

Електронун күтләсини m_1, нүвәнин күтләсини исә m_2 илә ишарә едиб, һидрокенәбәнзәр атомун Һамилтон операторуну

$$\breve{H}=\frac{\breve{\vec{p}}_1^{\,2}}{2m_1}+\frac{\breve{\vec{p}}_2^{\,2}}{2m_2}+V(\vec{r}_1-\vec{r}_2) \qquad (40.2)$$



Шәкил 14. $E>0$-да енержи спектри кәсилмәз, $E<0$-да исә дискретдир.

шәклиндә јазаг; бурада $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ – ујғун олараг електронун вә нүвәнин радиус векторлары, $\vec{p}_1 = -i\hbar\vec{\nabla}_1$, $\vec{p}_2 = -i\hbar\vec{\nabla}_2$ –онларын импулс операторларыдыр. Импулс операторларынын ифадәсини (40.2)-дә јазсаг,

$$\breve{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\vec{\nabla}_2^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\,. \qquad (40.3)$$

Гаршылыглы тә'сирдә олан ики зәррәчијин һәрәкәти, класик механикада олдуғу кими, квант механикасында да бир зәррәчијин дикәринә көрә нисби һәрәкәтинә кәтириләбиләр.

Доғрудан да,

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \text{вә} \quad \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \qquad (40.4)$$

әвәзләрини гәбул етсәк, системин Һамилтонианы ајрылыгда һәр бири $\vec{r}$ вә $\vec{R}$ -дән асылы ики һиссәнин чәминә бәрабәр олур:

$$\breve{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\vec{\nabla}_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_r^2 + V(\vec{r})\,. \qquad (40.5)$$

Бурада $\vec{r}$ – нүвә илә електрон арасындакы мәсафә, $\vec{R}$ онларын әталәт мәркәзинин радиус вектору, $M=m_1+m_2$ – системин там күтләси, $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ –онун кәтирилмиш күтләсидир.

(40.5) Һамилтон оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан системин стасионар һалларынын Шрединкер тәнлији

$$\breve{H}\Psi(\vec{r},\vec{R}) = E\Psi(\vec{r},\vec{R}) \qquad (40.6)$$

олар. (40.5)-ин ифадәсиндән көрүнүр ки, (40.6) тәнлијинин һәллини

$$\Psi(\vec{r},\vec{R}) = \Psi(\vec{r})\Psi(\vec{R}) \qquad (40.7)$$

шәклиндә ахтармаг олар. Бу заман (40.6) тәнлији

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_2^2\Psi(\vec{R}) = E_R\Psi(\vec{R}) \qquad (40.8)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_r^2 + V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r}) = E_r\Psi(\vec{r}) \qquad (40.9)$$

кими ики тәнлијә парчаланыр.

(40.8) тәнлији системин әталәт мәркәзинин вә ја күтләси $M=m_1+m_2$ олан зәррәчијин сәрбәст һәрәкәтини, (40.9) тәнлији исә зәррәчикләрин нисби һәрәкәтини, јахуд күтләси m олан зәррәчијин $V(\vec{r})$ потенсиал саһәдәки һәрәкәтини тәсвир едир. Бахылан мәсәләдә системин кәтирилмиш күтләси тәхминән електронун күтләсинә бәрабәр олур:

$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_n}} \approx m_e\,. \qquad (40.11)$$

Беләликлә зәррәчикләрин нисби һәрәкәти електронун нүвәнин (нөгтәви јүкүн) сферик симметрик $V(\vec{r}) = V(r)$ саһәсиндәки һәрәкәтинә кәтирилмиш олур. Зәррәчијин сәрбәст һәрәкәтинин тәһлили §2-дә верилмишдир. Биз бу §-да електронун нүвәнин мәркәзи саһәдәки һәрәкәти үзәриндә дајаначағыг.

§39-да кәстәрдик ки, (40.9) вә ја (39.2′) тәнлији сферик координат системиндә (35.10) вә (39.31′) тәнликләринә парчаланыр.

(39.3′) тәнлијинин һәлли мә'лум олдуғундан (бах §14), електронун нүвәнин сферик симметрик саһәсиндәки һәрәкәтинин стасионар сәвијјәләрини вә онлара ујғун далға функсијалар спектрини тапмаг үчүн радиал

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \qquad (40.12)$$

функсијасы үчүн јазылмыш (39.10) тәнлијини һәлл едәк. Орада $V(r)$-и онун (40.1) илә верилмиш ифадәси илә әвәз етсәк $u(r)$ -функсијасы үчүн

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right)u(r) = 0\,. \qquad (40.13)$$

Бахдығымыз һалда зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сир гүввәләри чазибә гүввәләридир. Мәркәзи саһәдәки һәрәкәтин бундан габагдакы §-да тәһлил етдијимиз үмуми нәзәријјәсинә әсасән там енержинин $E>0$ гијмәтләри үчүн системин енержи спектри кәсилмәз (бүтөв), $E<0$ гијмәтләри үчүн исә дискрет олмалыдыр. Дикәр тәрәфдән електрон мәркәзи саһәдәки һәрәкәти заманы һәмишә атомун дахилиндә галырса, јә'ни мәһдуд фәзада һәрәкәт едирсә, онун енержи спектри дискрет (§39 бах), атомун һүдудларындан кәнара чыха билән һалларда исә кәсилмәз олар. Биз бу ики һалын һәр икисинин тәһлили илә мәшғул олачағыг.

a) $E < 0$ **Һалынын тәһлили**

(40.13) тәнлијини һәлл етмәк үчүн адсыз кәмиј̌јәтләрә кечәк:

$$\rho = \frac{r}{\hbar^2 / me^2} = \frac{r}{a}, \qquad \varepsilon = \frac{2E\hbar^2}{me^4} = \frac{E}{E_1} \qquad (40.14)$$

Бурада

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0{,}529 \cdot 10^{-8} \ см \qquad (40.15)$$

биринчи Бор орбитинин радиусу (узунлуғун атом ваһиди),

$$E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a} = 13{,}55\, eB \qquad (40.16)$$

($\frac{e^2}{a} = 27{,}21 \ eB$ – енержинин атом ваһиди). Онда (40.13) тәнлији:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0 \qquad (40.17)$$

шәклинә дүшүр.

Далға функсијасынын бундан габагкы параграфда апарылан асимптотик хассәләринин тәдгигинә әсасән (40.17) тәнлијинин $\rho \to \infty$ да ($r \to \infty$) сонлу галан һәллини

$$u(\rho) = e^{-\alpha\rho} f(\rho), \ \alpha = \sqrt{-\varepsilon} \qquad (40.18)$$

шәклиндә ахтармаг олар. Бурада тәләб олунур ки, $f(\rho)$ функсијасы $\rho \to \infty$ да $e^{-\alpha\rho}$-ја нисбәтән даһа кичик сүр'әтлә сонсузлуға јахынлашсын. Бурада $f(\rho)$ үчүн

$$\frac{d^2 f(\rho)}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f(\rho) = 0 \qquad (40.19)$$

тәнлији алыныр.

Инди дә (40.19) тәнлијинин $\rho=0$ ($r=0$) -да сонлу галан үмуми һәллини (39.24)-ә әсасән

$$f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \qquad (40.20)$$

шәклиндә ахтараг. $f(\rho)$-нун бу ифадәсини (40.19)-да јеринә јазыб, биринчи вә дөрдүнчү һәдләриндә k-ны $k+1$ илә әвәз етмәклә сырада бүтүн һәдләрин үстләрини бәрабәрләшдирсәк (сырада сыфра бәрабәр олан һәдләри арадан чыхарсаг),

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \left[(k+l+1)(k+l+2) - l(l+1) \right] a_{k+1} - \left[2\alpha(k+l+1) - 2Z \right] a_k \right\} \rho^{k+l} = 0 \qquad (40.21)$$

(40.20) сырасы о вахт (40.19) тәнлијинин һәлли олар ки, (40.21) бәрабәрлији ρ-нун $(0, \infty)$ интервалындакы бүтүн гијмәтләриндә ејнилик кими өдәнилсин, башга сөзлә, ρ-нун һәр бир үстүнүн әмсалы сыфра бәрабәр олсун:

$$\left[(k+l+1)(k+l+2) - l(l+1) \right] a_{k+1} - \left[2\alpha(k+l+1) - 2Z \right] a_k = 0$$

вә бурадан a_k әмсаллары үчүн

$$a_{k+1} = \frac{2\alpha(k+l+1) - 2Z}{(k+l+1)(k+l+2) - l(l+1)} a_k \qquad (40.22)$$

рекурент дүстуру алыныр.

Асанлыгла көстәрмәк олар ки, (40.20) сырасы, јахуд (40.12) функсијасы ρ-нун кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә сонсузлуға јахынлашыр, јә'ни $\rho=0$-да сонлу галан һәлл, $\rho \to \infty$ -да үмумиј̌јәтлә сонлу галмаја биләр. $R(\rho)$ радиал функсијанын $R(\rho \to \infty)=0$ шәртини өдәмәси үчүн (40.20) сырасынын ән јүксәк үстлү һәдди сонлу галмалыдыр. Бу шәрт о заман өдәниләр ки, (40.20) сырасы һәр һансы бир $k=n_r$ һәддиндә кәсилсин. Бу һалда $f(\rho)$ функсијасы чохһәдлијә (полинома) чеврилир вә $R(\rho)$ функсијасы $\rho \to \infty$ -да сыфра јахынлашыр.

(40.20) сырасынын $k=n_r$ һәддиндә кәсилмәси үчүн a_k әмсаллары

$$\begin{aligned} &a_k \neq 0, \qquad k \leq n_r \\ &a_k = 0, \qquad k > n_r \end{aligned} \qquad (40.23)$$

шәртини өдәмәлидир. (40.22) бәрабәрлијиндә (40.23) шәртинин өдәнилмәси үчүн

$$2\alpha(n_r + l + 1) - 2Z = 0 \qquad (40.24)$$

олмалыдыр. Бурадан, α параметри үчүн

$$\alpha = \frac{Z}{n_r + l + 1} = \frac{Z}{n}, \qquad n = n_r + l + 1 \qquad (40.25)$$

алынып, јә'ни сыранын кәсилмәси α параметринин (40.25) илә верилмиш гијмәтиндә баш верир. n_r вә l мүсбәт там әдәдләр олдуғундан, $n=n_r+l+1$ әдәди дә мүсбәт там әдәд олур. Бурада $n-$ баш квант әдәди, l –азимутал (орбитал) квант әдәди вә n_r –радиал квант әдәди адланыр. n_r вә l әдәдләринин һәр икиси сыфырдан башлајараг гијмәт алдығындан, баш квант әдәди n ваһиддән ($n=1$) ∞-луға кими там мүсбәт гијмәтләр алыр: $n=1,2,3,\ldots,\infty$.

§14-дә l-ин јухары сәрһәди тә'јин едилмәмишди. (40.25)-дән чыхыр ки, l-ин јухары сәрһәди ($n_r=0$ –а ујғун) $l_{max}=n-1$ олур, јә'ни n-ин верилмиш гијмәтиндә l –орбитал (азимутал) квант әдәди $0,1,2,\ldots,n-1$ гијмәтләрини алыр.

(40.14), (40.18) вә (40.25)-дән

$$\varepsilon=\frac{E}{E_1}=-\alpha^2=-\frac{Z^2}{n^2} \quad \text{вә ја} \quad E_n=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}=-\frac{\hbar RZ^2}{n^2}, \tag{40.26}$$

бурада $R=\dfrac{me^4}{2\hbar^3}$ – *Ридберг сабити* адланыр.

Бурадан көрүнүр ки, системин там енержиси баш квант әдәди n илә тә'јин олунур. n -ин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун $E_1,E_2,\ldots$ енержи сәвијјәләри һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларын **стасионар квант һаллары** адланыр. E_n-ин јалныз (40.26) илә верилмиш гијмәтләриндә $R(r)$ радиал функсијасы биргијмәтли вә сонлу галыр.

Нүвәнин Кулон саһәсиндә һәрәкәт едән електронун енержи сәвијјәләри үчүн (40.26) ифадәси, илк дәфә Нилс Бор тәрәфиндән, өзүнүн јарымкласик квант нәзәријјәсиндә алынмышды. Лакин Бор нәзәријјәсиндә әсассыз гејд олунурду ки, n әдәди $n=0$ гијмәти ала билмәз. Квант механикасында исә белә әсассыз гејдә һеч бир еһтијач јохдур, (40.25)-дән көрүнүр ки, n-ин ән кичик гијмәти $n=1$-дир. Кулон саһәсиндә һәрәкәт едән зәррәчәјин $n=1$ гијмәтинә ән ашағыда јерләшмиш енержи сәвијјәси (әсас һалы) ујғундур, n артдыгча енержи сәвијјәләри арасындакы мәсафә (јә'ни ΔE енержиләр фәрги) кичилир, $n\to\infty$ да $\Delta E\to 0$ јахынлашыр вә енержинин дискрет спектри кәсилмәз спектрә чеврилир (бах. шәкил 14).

Билдијимиз кими, һәр бир квант механики тәнлијин һәлли ујғун операторун мәхсуси гијмәтләр вә мәхсуси функсијалар спектрләринин тапылмасы илә нәтичәләнмәлидир. (40.26) ифадәси (40.9) тәнлијинин мәхсуси гијмәтләр спектрини верир. Инди дә онун мәхсуси функсијалар спектрини тапаг.

α -нын (40.25) илә верилмиш гијмәтини (40.22) -дә јазыб

$$(k+l+1)(k+l+2)-l(l+1)=(k+1)(k+2l+2)$$

бәрабәрлијини нәзәрә алсаг,

$$a_{k+1}=-\frac{2Z(n-(k+l+1))}{n(k+1)(k+2l+2)}a_k \tag{40.22'}$$

алынар. Бурада k-ја гијмәт вермәклә (40.20) сырасына дахил олан бүтүн әмсаллар (a_n -ә кими) ихтијари a_o әмсалы илә ифадә едилә биләр. a_o исә далға функсијасынын нормаланма шәртиндән тапылар. Доғрудан да (40.22′)-дән

$$a_1=-\frac{2Z}{n}\cdot\frac{n-l-1}{1!(2l+2)}a_o$$

$$a_2=-\frac{2Z}{n}\cdot\frac{n-l-2}{2!(2l+3)}a_1=\left(\frac{2Z}{n}\right)^2\cdot\frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)}a_o$$

вә и.а. Беләликлә $f(\rho)$ функсијасы үчүн

$$f(\rho)=\rho^{l+1}a_o\left\{1-\frac{n-l-1}{1!(2l+2)}\frac{2Z\rho}{n}+\frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^2-\right.$$
$$\left.-\ldots+(-1)^{n_r}\frac{(n-l-1)(n-l-2)\cdots 1}{n_r!(2l+2)(2l+3)\cdots(2l+n_r+1)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^{n_r}\right\}. \tag{40.27}$$

Ријази физикада һиперһәндәси функсијалар нәзәријјәсиндән мә'лумдур ки, чырлашмыш һиперһәндәси функсија

$$F(\beta,\gamma,z)=1+\frac{\beta}{\gamma}\frac{z}{1!}+\frac{\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!}+\frac{\beta(\beta+1)(\beta+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)}\frac{z^3}{3!}+\ldots \tag{40.28}$$

шәклинә маликдир; бурада β вә γ ихтијари комплекс параметрләр, z дәјишәни дә үмумијјәтлә комплекс ола биләр.

Асанлыгла көстәрмәк олар ки, бу сыра $z\to\infty$ -да e^z кими сонсузлуға јахынлашыр. Бурадан чыхыр ки, системин далға функсијасыны (40.28) сырасы илә ифадә етмәк истәсәк, о, гүввә мәркәзиндән истәнилән гәдәр узаг мәсафәләрдә сонлулуг шәртини өдәмәзди. Лакин, (40.21) сырасы z-ин бүтүн сонлу, β-нын ихтијари, γ-нын исә сыфра вә мәнфи там әдәдә бәрабәр олмајан гијмәтләриндә сонлу галыр. β да там мәнфи әдәдә вә ја сыфра бәрабәрдирсә, (40.20) сырасы $|\beta|$ үстлү полинома чеврилир.

Беләликлә $\beta=-(n-l-1)$, $\gamma=2l+2$, $z=\dfrac{2Z\rho}{n}$ гәбул етсәк. (40.28) сырасы (40.27)-дә бөјүк мө'тәризәдә верилмиш полином олур:

$$F(-(n-l-1),\ 2l+2,\ \frac{2Z\rho}{n}) = 1 - \frac{n-l-1}{1!(2l+2)}\frac{2Z\rho}{n} + \tag{40.29}$$

$$+\frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^2 + \ldots + (-1)^{n_r}\frac{(n-l-1)(n-l-2)\ldots 1}{n_r!(2l+2)\ldots(2l+n_r+1)}\left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^{n_r/2}.$$

Буну (40.27)-дә нәзәрә алсаг,

$$f(\rho) = \rho^{l+1}a_o F(-(n-l-1),\ (2l+2),\ \frac{2Z\rho}{n}).$$

(40.12), (40.18) вә (40.27) бәрабәрликләринә әсасән $R(r)$ радиал функсијасы үчүн (n вә l квант әдәдләриндән асылы олдуғундан)

$$R_{nl}(\xi) = e^{-\xi/2}\xi^l F(-(n-l-1),\ 2l+2,\ \xi) \tag{40.30}$$

ифадәси алыныр, бурада

$$\xi = \frac{2Z\rho}{n} \tag{40.31}$$

ишарәси гәбул олунмушдур.

Чырлашмыш һиперһәндәси функсијанын полинома чеврилмәси, јә'ни $-(n-l-1)$ -ин мәнфи әдәд олмасы тәләбиндән алыныр ки,

$$n-l-1 \ge 0 \quad \text{вә ја} \quad n \ge l+1 \tag{40.32}$$

олмалыдыр. l мүсбәт там әдәд олдуғундан, n-ин дә мүсбәт там әдәд олмасы бир даһа тәсдиг олунмуш олур.

(40.29) илә верилмиш $F(-k,\gamma,z)$ полиному даһа јығчам шәкилдә јазыла биләр:

$$F(-k,\gamma,z) = \frac{1}{\gamma(\gamma+1)\ldots(\gamma+k-1)}z^{1-\gamma}e^z\frac{d^k}{dz^k}\left(e^{-z}z^{\gamma+k-1}\right). \tag{40.33}$$

γ параметри $\gamma=m$ там мүсбәт әдәдә бәрабәр олуб, $0 \le m \le k$ интервалында дәјиширсә, $F(-k,m,z)$ полиному сабит дәгиглији илә үмумиләшдирилмиш Лагер полиному үзәринә дүшүр:

$$L_k^m(z) = (-1)^k\frac{(k!)^2}{m!(k-m)!}F(-(k-m),\ m+1,\ z) = \tag{40.34}$$

$$= \frac{k!}{(k-m)!}e^z\frac{d^k}{dz^k}(e^{-z}z^{k-m}) = (-1)^m\frac{k!}{(k-m)!}e^z z^{-m}\frac{d^{k-m}}{dz^{k-m}}(e^{-z}z^k)$$

m=0-а үјғун

$$L_k^o(z) = e^z\frac{d^k}{dz^k}(e^{-z}z^k)$$

полиному садәчә Лагер полиному адланыр. (40.33) вә (40.34) бәрабәрликләриндән алыныр ки, үмумиләшмиш полином Лагер полиному илә

$$L_k^m(z) = \frac{d^m}{dz^m}L_k^o(z) \tag{40.35}$$

кими әлагәдардыр.

(40.30)-а дахил олан һиперһәндәси функсија илә она ујғун үмумиләшдирилмиш Лагер полиному арасындакы әлагәни јазаг. (40.34)-дә $m=2l+1$ $k-m=n-l-1$ көтүрсәк, $k=n-l-1+m=n-l-1+2l+1=n+l$ вә

$$L_{n+l}^{2l+1}(\xi) = (-1)^{n+l}\frac{[(n+l)!]}{(2l+1)!(n-l-1)!}F(-(n-l-1),\ 2l+2,\ \xi) \tag{40.36}$$

олар.

Мәсәләнин һәллиндә вә бу ахырда тәсадүф олунан сабитләри радиал функсијанын нормалајычы вуруғунун тәркибинә дахил етсәк, $R_{nl}(\xi)$ үчүн

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl}e^{-\frac{\xi}{2}}\xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) \tag{40.37}$$

ифадәси алынар. N_{nl} вуруғу

$$\int_0^\infty R_{nl}^2(\xi)\, r^2 dr = 1 \tag{40.38}$$

нормаланма шәртиндән тапылыр:

$$N_{nl} = \frac{1}{(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}}\left(\frac{2Z}{na}\right)^{3/2}. \tag{40.39}$$

(39.9) дүстуруна әсасән һидрокенәбәнзәр атомларын үмуми далға функсијасы $R_{nl}(r)$ радиал функсија илә һәрәкәт мигдары моменти операторунун $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ мәхсуси функсијасы һасилинә бәрабәрдир:

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{40.40}$$

вә бу квант механики системләрин $\{\Psi_{nlm}\}$ мәхсуси функсијалар спектри n,l вә m квант әдәдләри чохлуғу илә тә'јин олунур.

Сферик симметрик саһәдәки һәрәкәт һалында системин Һамилтон оператору $\breve{H}$, һәрәкәт мигдары моменти квадраты оператору $\breve{L}^2$, һәрәкәт мигдары моментинин z оху үзрә проjексиjасы оператору $\breve{L}_z$ вә фәза координатларынын инверсија оператору $\breve{I}$ гаршылыглы коммутасија етдијиндән (39.2)–(39.5) тәнликләринә көрә Ψ_{nlm} (r,θ,φ) функсијасы бу дөрд операторун мәхсуси функсијасы олур. Башга сөзлә,

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} \qquad (40.41)$$

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1) \qquad (40.42)$$

$$L_z = m\hbar \qquad (40.43)$$

$$I = \lambda(-1)^l \qquad (40.44)$$

кәмијјәтләри ејни заманда мүәјјән гијмәт алыр.

Бурадан көрүнүр ки, баш квант әдәди n –стасионар һалын енержисини, орбитал (вә ја азимутал) квант әдәди l–һәрәкәт мигдары моментини вә ујғун стасионар һалын чүтлүјүнү, нәһајәт, магнит квант әдәди m–һәрәкәт мигдары моментинин ихтијари oz оху үзрә көтүрүлмүш пројексијасыны тә'јин едир. Беләликлә, (n,l,m) квант әдәдләр чохлуғу системин мүмкүн олан стасионар һалларын дискрет чохлуғуну биргијмәтли тә'јин етмәјә имкан верир.

Доғрудан да, (40.44)-дә дахил олан λ вуруғу системин дахили чүтлүјүнү тә'јин едир. О, системин тәбиәтиндән асылыдыр. Атомда електронун нүвәјә нәзәрән һәрәкәти бахымындан, һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларын стасионар һаллары, нүвәнин сферик симметрик саһәсиндә һәрәкәт едән електронун квант һалларынын ејнидир. Бу һалда λ електронун тәбиәтини характеризә едир. Електронун атомдакы бүтүн стасионар һаллары үчүн о, ејни бир гијмәтә малик олур вә стасионар һалларын чүтлүјү $I=(-1)^l$ вуруғу илә тә'јин олунур. l -ин сыфыр вә чүт гијмәтләриндә бахылан һалын чүтлүјү мүсбәт (I=1), тәк гијмәтләриндә исә мәнфи (I=–1) олур.

Енержинин (40.41) илә верилмиш ифадәсиндән көрүнүр ки, системин там енержиси јалныз n баш квант әдәдиндән, стасионар һалларын (40.40)-ла верилмиш далға функсијасы исә үч (n,l,m) квант әдәдиндән асылыдыр. n -ин верилмиш гијмәтиндә l квант әдәди 0-дан n–1-ә гәдәр n мүхтәлиф гијмәт алыр, јә'ни һамилтонианын һәр бир E_n мәхсуси гијмәтинә l- ин гијмәти илә фәргләнән $n(l=0,1,2,...,n-1)$ сајда хәтти асылы олмајан мәхсуси функсија ујғун кәлир. l -ин верилмиш гијмәтиндә исә m магнит квант әдәди $-l$ -дән $+l$ -ә кими $(2l+1)$ мүхтәлиф гијмәт алыр, јә'ни n вә l-ин верилмиш гијмәтләри илә тә'јин олунан енержи сәвијјәсинә m илә фәргләнән $(m=0, \pm1, \pm2,... \pm l)$ $2l+1$ хәтти асылы олмајан мәхсуси функсија ујғун олур. Беләликлә, енержинин верилмиш E_n гијмәтинә

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = (n-1)n + n = n^2 \qquad (40.45)$$

сајда мүхтәлиф далға функсијалары ујғундур.

Бурадан алыныр ки, һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларын һәр бир E_n енержи сәвијјәси чырлашмыштыр вә чырлашма дәрәчәси n^2-на бәрабәрдир.

Гејд едәк ки, системин әсас стасионар $(n=1,\ l=0,\ m=0)$ һалындан башга, онун енержисинин һәр бир гијмәтинә чүтлүјү һәм мүсбәт (l -чүт) вә һәм дә мәнфи (l -тәк) олан һаллар ујғундур. Доғрудан да, ејни бир енержи сәвијјәсинә ујғун ики мүхтәлиф мәхсуси функсијанын хәтти комбинасијасы олан

$$\Psi_{nll'} = a\,\Psi_{nl} + b\,\Psi_{nl'}$$

функсија да һәмин E_n енержи сәвијјәсинә ујғундур. Лакин (nl) вә (nl') һалларын чүтлүјү әкс ишарәлидирсә $\Psi_{nll'}$ функсијасы илә тәсвир олунан һал мүәјјән чүтлүјә малик олмур. Демәли, Кулон саһәсиндә һәрәкәт едән мүәјјән енержили зәррәчик јалныз чүтлүјү мүәјјән олан һалда јох, чүтлүјү гејри-мүәјјән олан һалда да ола биләр.

Стасионар һалларын m-ә көрә "мәчбури" адланан чырлашмасы бүтүн мәркәзи саһәләрдәки һәрәкәт үчүн хасдыр. Бу, гүввә мәркәзиндән кечән бүтүн истигамәтләрин ејниһүгуглу (еһтималлы) олмасы илә әлагәдардыр. Бу һалда системин енержиси, һәрәкәт мигдары моменти векторунун фәзадакы истигамәтиндән, хүсуси һалда онун oz оху үзрә көтүрүлмүш пројексијасындан асылы олмур.

Орбитал квант әдәдинә көрә "тәсадүфи" адланан чырлашма исә јалныз Кулон гаршылыглы тә'сирә хасдыр. Кулон саһәсиндә тәсадүфи чырлашма һамилтонианын сферик симметријадан әлавә даһа башга бир симметријаја малик олмасы нәтичәсидир. Кулон потенсиалы дахил олан Шрединкер тәнлији O(4) дөрдөлчүлү фырланма групуна көрә инвариантдыр. $\breve{H}$ -ын белә симметријасы Шрединкер тәнлијиндә һәм сферик вә һәм дә параболик координат системләриндә дәјишәнләрә ајырмаг әмәлијјатыны апармаға имкан верир. Башга тәбиәтли мәркәзи саһәләрдә исә, мәсәлән, бир оптик електронлу атомларда дахили електронларын валент електрона тә'сиринин нәзәрә алынмасы һесабына (бах §89) вә бә'зи башга һалларда l-ә көрә чырлашма ортадан көтүрүлүр. Бу һалда һәр бир E_n сәвијјәси n сајда мүхтәлиф E_{nl} алт сәвијјәјә парчаланыр. Систем сферик симметријаны позан һәр һансы харичи саһәдә, мәсәлән, магнит саһәсиндә олдугда исә m-ә көрә чырлашма да арадан галхыр. Бу һалда E_n енержи сәвијјәси n^2 сајда E_{nlm} алт сәвијјәләрә парчаланмыш олур (бах §77 вә 78).

Беләликлә n баш квант әдәди илә тә'јин олунан енержинин һәр бир гијмәтинә системин l орбитал вә m магнит квант әдәдләри илә фәргләнән n^2 мүхтәлиф һалы ујғун кәлир. Бу һалларын тәснифини верәк. Бунун үчүн бир дә јада салаг ки, n -ин һәр бир верилмиш гијмәтиндә l квант әдәди l =0,1,2,...n–1-ә гәдәр, l -ин һәр бир верилмиш гијмәтиндә исә m квант әдәди $m=-l,\ -l+1,...,0,1...,\ l$-ә гәдәр $2l+1$ мүхтәлиф гијмәт алыр.

Квант механикасында n баш квант әдәдинин $n=1$ гијмәтинә ујғун һаллар чохлуғу K-тәбәгә, $n=2$-јә ујғун һаллар чохлуғу L-тәбәгә, $n=3$-ә ујғун һаллар чохлуғу M-тәбәгә, $n=4$-ә ујғун һаллар чохлуғу N-тәбәгә вә и.а. адланыр. Һәр бир тәбәгә бир нечә өртүкдән ибарәтдир. Белә ки, $l=0$ гијмәтинә ујғун һаллар чохлуғу s-өртүк, $l=1$-ә ујғун һаллар чохлуғу p-өртүк, $l=2$-дә d-өртүк, $l=3$-дә f-өртүк, $l=4$-дә g-өртүк вә и.а. адыны дашыјыр. Бахылан өртүјүн һансы тәбәгәјә аид олдуғуну көстәрмәк үчүн өртүјүн ишарәси габағында n-ин ујғун тәбәгәни тә'јин едән гијмәти јазылыр: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ вә и.а. $n=1$ олдугда $l=0$, $m=0$ олдуғундан K тәбәгәси јалныз $1s$ өртүјүндән ибарәт олур вә Ψ_{100} -далға функсијасы илә тәсвир олунур. $n=2$- дә l вә m әдәдләри $l=0$, $m=0$ $(2s)$ вә $l=1$, $m=1,0\text{–}1(2p)$ гијмәтләрини алыр вә L тәбәгәси $2s$ вә $2p$ кими ики өртүкдән тәшкил олунур. L-тәбәгәсинә $2s$-өртүјү Ψ_{200} , $2p$ өртүјүнә исә Ψ_{210}, Ψ_{211}, $\Psi_{21\text{-}1}$ кими функсијалар илә тәсвир олунан квант һаллары дахил олур. Демәли, системин E_2 енержи сәвијјәсиндә атомун дөрд квант һалы бир-биринин үзәринә дүшүр, јә'ни сечилмир вә сәвијјәнин чырлашма тәртиби дөрдә бәрабәрдир. $n=3$-дә l вә m квант әдәдләри $l=0$, $m=0$ $(3s)$, $l=1$, $m=1$, $0\text{–}1$ $(3p)$ вә $l=2$, $m=2,1,0,1,-1,-2$ $(3d)$ гијмәтләрини алыр вә M-тәбәгәси $3s$, $3p$ вә $3d$ кими үч өртүкдән ибарәт олур.

Атомун E_3 енержи сәвијјәсиндә $\Psi_{300}(3s)$, Ψ_{311}, Ψ_{310}, $\Psi_{23\text{-}1}(3p)$, Ψ_{322}, Ψ_{321}, Ψ_{320}, $\Psi_{32\text{-}1}$, $\Psi_{32\text{-}2}$ $(3d)$ кими далға функсијалары илә тәсвир олунан доггуз квант һалы бир-биринин үзәринә дүшүр. Сәвијјә доггузунчу тәртибдән чырлашмыш олур. Буна охшар олараг $n=4$-ә ујғун N тәбәгәси $4s$, $4p$, $4d$, $4f$ кими дөрд өртүкдән тәшкил олунур вә системин E_4 сәвијјәси он алты мүхтәлиф квант һалынын јығыныны тәшкил едир вә и.а.

Ашағыдакы чәдвәлдә $n=1,2,3$ енержи сәвијјәләринин радиал функсијалары көстәрилмишдир:

n	l	һалын ишарәси	$R_{nl}(\xi)$	һалын чырлашма тәртиби
1	0	$1s$	$\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} 2e^{-\frac{\xi}{2}}$	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	$3s$	$\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} 2(1-\xi+\frac{\xi^2}{6})e^{-\xi/2}$	9
	1	$3p$	$\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} \frac{4}{3\sqrt{2}}\xi(1-\frac{\xi}{4})e^{-\xi/2}$	
	2	$3d$	$\left(\frac{Z}{3a}\right)^{3/2} \frac{\xi^2}{3\sqrt{10}} e^{-\xi/2}$	

r радиус векторун мүтләг гијмәтинин мүхтәлиф үстләринин ихтијари (nlm) һалында орта гијмәтләринин ифадәләрини дә бурада көстәрәк (онлар бизә сонра лазым олачаг)*:

$$\bar{r} = \int \Psi^{+}_{nlm}(r) r \Psi_{nlm}(d\vec{r}) = \int_0^\infty R_{nl}(r) r R_{nl}(r) r^2 dr = \frac{a}{2Z}\left[3n^2 - l(l+1)\right].$$

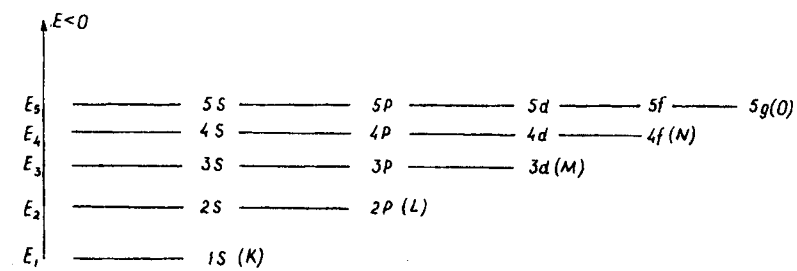
Буна охшар олараг

$$\overline{r^2} = \frac{a^2 n^2}{2Z}\left[5n^2 + 1 - 3l(l+1)\right] \qquad (40.46)$$

$$\overline{r^{-1}} = \frac{Z}{an^2}, \quad \overline{r^{-2}} = \frac{Z^2}{a^2 n^3 \left(l + \frac{1}{2}\right)}.$$

Һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларын $1s$ һалы онун әсас һалы (бу һал чырлашмамыш олур), галан $2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ вә и.а. һаллары исә чырлашмыш һаллар адланыр.

Атомун тәбәгә вә өртүкләри 15-чи шәкилдә көстәрилмишдир.



Шәкил 15. Һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларын тәбәгә вә өртүкләри.

Бу енержи спектри Борун тәклиф етдији көһнә квант нәзәријјәсиндә алынан енержи спектринин үзәринә дүшүр вә тәчрүбәдә алынан нәтичәләри кифајәт гәдәр јахшы изаһ едир.

Бор нәзәријјәси спектрдә хәтләрин пајланмасыны (јерләшмәсини) габагчадан сөјләјә билир. Лакин спектр хәтләринин тәчрүбәдә мүшаһидә олунан инчә гурулушуну изаһ едә билмир. Бу мәсәләнин шәрһи үзәриндә биз §75-дә әтрафлы дајаначағыг.

* Онларын һесабланма јолу А.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский, "Квантовая механика", 1979 китабынын 217-чи сәһифәсиндә көстәрилмишдир.

б) **Ротатор**

$r = a$ сабит радиуслу сфера бојунча сәрбәст һәрәкәт едән зәррәчијә *ротатор* дејилир. Белә һәрәкәтә, сферик симметрик саһәдә потенсиал енержи сабит галмаг шәртилә баш верән һәрәкәтин хүсуси һалы кими бахмаг олар. Доғрудан да, һәр һансы бир һәрәкәтдә потенсиал енержи сабит галырса, онун һәмин гијмәтини һәмишә енержинин өлчү башланғычы кими көтүрмәк олар:

$$V(r) = \text{const} = 0.$$

Онда белә һәрәкәт сәрбәст һәрәкәти хатырладыр.

Инди дә атомда електронун һәрәкәти заманы онун радиус векторунун гијмәтчә дәјишмәдијини вә онун $r = a$ радиуслу сфера бојунча һәрәкәт етдијини фәрз едәк. Јәгин ки, електронун бу һәрәкәти дә (40.9) тәнлији илә тәсвир олунар. Бахылан һалда потенсиал енержи $V(a)$=const=0 көтүрүлдүјүндән, (40.9) тәнлијинин һәлли олан (40.40) функсијаларында бучаглардан асылы $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ функсијалары дәјишмир. $R_{nl}(r)$ радиал функсија исә $R_{nl}(r=a)$=const олур. Бу заман (40.13) тәнлијиндә $r=a$, $\nabla^2 u(a) = 0$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$(E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2})u(a) = 0$$

вә белә фырланма һәрәкәтинин–ротаторун там енержи спектри

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I_a} \tag{40.47}$$

(бурада $I_a = ma^2$ ротаторун әталәт моментидир) мәхсуси функсијалар спектри исә

$$\Psi_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi) = C_{lm} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta) \tag{40.48}$$

олур.

Билдијимиз кими, класик механикада мүәјјән мәркәз әтрафында јалныз фырланма һәрәкәтиндә иштирак едән чисмин там енержиси

$$E_\Phi = \frac{M^2}{2I} \tag{40.49}$$

бәрабәрлији илә тә'јин олунур, бурада M–фырланма һәрәкәт мигдары моменти, I исә чисмин мәркәзә нәзәрән әталәт моментидир. (40.47) вә (40.49) ифадәләринә көрә квант фырланма һәрәкәтинин класикдән фәрги ондан ибарәтдир ки, квантда һәрәкәт мигдары моментинин квадраты $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ кими дискрет гијмәтләр алыр вә (40.49) ифадәси (40.47)-јә кечир. Класик һәрәкәтдә исә о, кәсилмәдән дәјишир.

(40.47) вә (40.48) ифадәләриндә ротаторун там енержиси E_l јалныз l орбитал квант әдәдиндән, далға функсијалары l вә магнит квант әдәди m- дән асылыдыр. Јухарыда көрдүк ки, l -ин верилмиш гијмәтиндә m квант әдәди $-l$ -дән $+l$ -ә кими $2l+1$ мүхтәлиф гијмәтләр алыр. Демәли, ротаторун һәр бир енержи сәвијјәси $2l+1$ тәртибдән чырлашмыш олур. l вә m-ә көрә чырлашманын сәбәбләри исә јухарыда шәрһ едилмишдир.

(40.40) вә (40.48) ифадәләринин мүгајисәсиндән көрүнүр ки, електронун һидрокен атомундакы һәрәкәтинин бучаг мәхсуси функсијалары ($Y_{lm}(\theta,\varphi)$ -сферик функсијалары) ротаторун мәхсуси функсијалары үзәринә дүшүр. Бурадан да онларын бучаглара көрә пајланма функсијалары ејни олур. Ашағыдакы §-да атомда електронун бучаглара көрә пајланмасы һаггында дејилән бүтүн сөзләр ротатор үчүн дә доғру олачаг.

в) Радиал вә бучаг пајланма функсијалары

(40.40) ифадәси илә верилмиш $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ далға фуксијасынын модулунун квадраты верилән n, l, m квант һалында олан електронун r,θ,φ дәјишәнләри илә тә'јин олунан һәр һансы $A(r,\theta,\varphi)$ нөгтәсинин јахын әтрафында мүшаһидә олунма еһтималыны тә'јин едир. Бу еһтимал

$$dW_{nlm} = |\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 dr \sin\theta\, d\theta d\varphi\,, \tag{40.50}$$

бурада $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$ сферик координат системиндә һәчм елементи, $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ исә чисим бучағыдыр. Ψ_{nlm} -ин ифадәсини бурада јазсаг,

$$dW_{nlm} = R_{nl}^2(r) r^2 dr |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega \tag{40.51}$$

алынар. Бу ахырынчы бәрабәрликдә θ вә φ бучагларына көрә интеграл алсаг, $Y_{lm}(\theta,\varphi)$-нин нормаланма шәртинә әсасән, θ вә φ-нин ихтијари гијмәтләриндә електронун радиусу r вә $r+dr$ -ә бәрабәр олан ики күрәви сәтһин (сферанын) арасында мүшаһидә олунма еһтималыны тапарыг:

$$dW_{nl}(r) = R_{nl}^2(r) r^2 dr = w_{nl}(r) dr. \tag{40.52}$$

Бурадан пајланманын еһтимал сыхлығы

$$\frac{dW_{nl}}{dr} = R_{nl}^2(r) r^2 = w_{nl}(r) \tag{40.53}$$

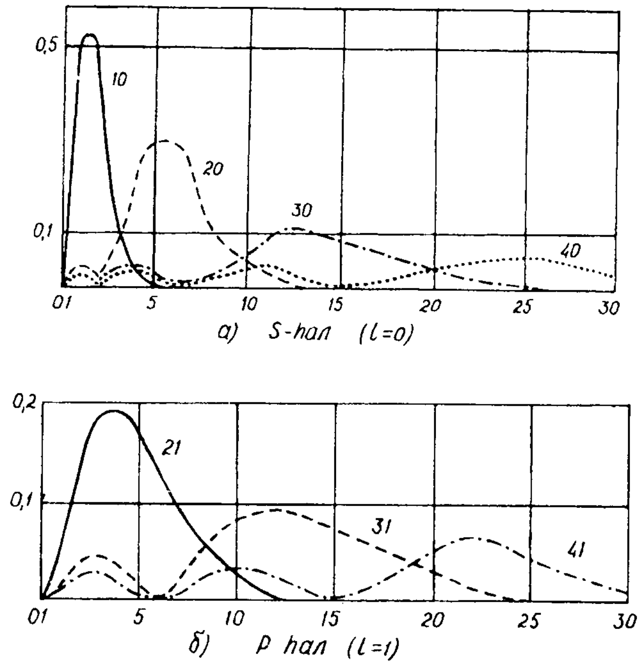
атомда електронун електрик јүкүнүн *радиал пајланма функсијасы* адланыр.

Електронун ns вә np һалларынын бә'зиләри үчүн пајланма шәкил 16 *а,б*-дә көстәрилмишдир*. Абсис оху бојунча Борун биринчи орбити-

* [1]-ин 211-чи сәһифәсиндә а) вә б) графикләри

нин радиусу ваһидләриндә електронун мәркәздән олан мәсафәси ($\rho = \frac{r}{a}$ нын гијмәтләри), ординат оху бојунча исә $w_{nl}(r)$ еһтимал сыхлығы көстәрилмишдир.

Шәкилдә көрүнүр ки, һәр бир $R_{nl}(r)$ функсијасы $n_r=n-l-1$ сајда дүјүн нөгтәләринә (әслиндә дүјүн сәтһләринә) маликдир ($r=0$ вә $r=\infty$-а ујғун гијмәтләриндән башга).



Шәкил 16. а,б Електронун r вә $r+dr$ радиуслу ики күрәви сәтһин дахилиндә мүшаһидә еһтималы.

Инди дә бучаглара көрә пајланманын тәһлилинә кечәк. (40.51) ифадәсини r-ин бүтүн дәјишмә $(0, \infty)$ интервалында интегралласаг, електронун радиус векторунун истигамәтинин $d\Omega$ чисим бучағы дахилинә дүшмә, јә'ни електрону $d\Omega$ чисим бучағы алтында мүшаһидә етмә еһтималы, $R_{nl}(r)$ -ин (40.38) нормаланма шәртинә әсасән,

$$dW_{nl}(\theta,\varphi)=|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 d\Omega \qquad (40.54)$$

бәрабәр олар. Бурадан бучаглара көрә пајланма функсијасы

$$\frac{dW_{lm}}{d\Omega} = w_{lm}(\theta,\varphi)=|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 \qquad (40.55)$$

бучаг пајланма функсијасы адланыр. $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ функсијасынын (14.28′) ифадәсиндән көрүнүр ки, бу пајланма φ бучағындан асылы дејилдир:

$$w_{lm}(\theta,\varphi)=w_{lm}(\theta)=C_{lm}^2|P_{lm}(\cos\theta)|^2, \qquad (40.55')$$

бурада

$$C_{lm}=\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}$$

нормалајычы вуругдур (бах (14.27″)).

$w_{lm}(\theta)$ пајланма функсијасынын мүхтәлиф l,m һаллары үчүн графикләри шәкил 17-дә верилмишдир. Бурада w_{lm} вә θ полјар координат системиндән истифадә едилир. Радиус-вектор бојунча $w_{lm}(\theta)$ -нын гијмәтләри көтүрүлүр. 0, φ -дән асылы олмадығына көрә графикләр yz мүстәвисиндә тәсвир олунур.

Мүхтәлиф өртүкләрин бүтүн ns тәбәгәләри үчүн $l=0$ вә $m=0$ вә

$$Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad \text{вә} \quad W_{00}(\theta)=\frac{1}{4\pi}=\text{const} \qquad (40.56)$$

олдуғундан, бүтүн ns тәбәгәләриндә јүкүн пајланмасы сферик симметријаја маликдир.

Бор нәзәријјәсинә көрә белә һәрәкәт даирәви орбитләр бојунча баш вермәли вә о, мүәјјән һәрәкәт мигдары моментинә малик олмалыдыр, һәрәкәт мигдары моменти сыфыр ($l=0$) олан һаллар исә мөвчуд олмамалыдыр. Она көрә дә Бор ns ($l=0, m=0$) һаллары np ($l=1$, $m=0, \pm1$) һалларындан бири һесаб едирди. Бу исә Бор нәзәријјәсинин чәтинликләриндән бири иди. Бурадан чыхыр ки, ns һалларынын классик аналогу (охшары) јохдур.

np тәбәгәләриндә јүкүн пајланмасы графикләрини гурмаг үчүн, јәгин ки, $l=1$, $m=0, 1, -1$ көтүрмәк лазымдыр. Онда (14.28′) әсасән

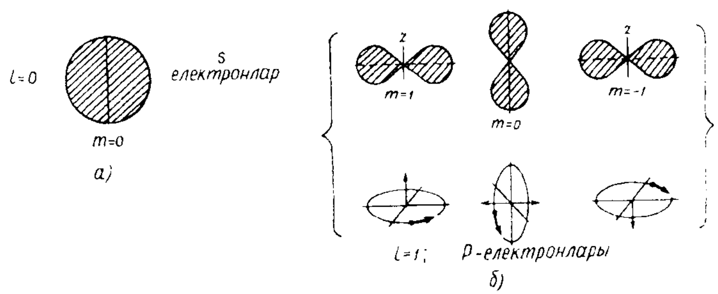
$$Y_{10}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{\pm i\varphi}\sin\theta \qquad (40.57)$$

вә

$$w_{10}=\frac{3}{4\pi}\cos^2\theta,\quad w_{11}=w_{1-1}(\theta)=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta \qquad (40.58)$$

олар.

(40.58) ифадәсиндән вә шәкил 17-дән көрүнүр ки, np тәбәгәләриндәки l=1, m=0 һалында електронун θ=0 бучағынын јахын әтрафында олма еһтималы ән чох, $\theta=\frac{\pi}{2}$ -јә ујғун еһтимал исә сыфра бәрабәрдир. Бу һалда онун Бор нәзәријјәсинә ујғун орбит w_{10}-ын максимум гијмәти z охундан кечән мүстәвидә јерләшир вә һәрәкәт мигдары моменти z оха перпендикулјар олур ($L_z=m\hbar=0,\ m=0$), l=1, $m=\pm1$ һалларына кәлдикдә исә биз бунун әксини мүшаһидә едирик. l=1, m=1 вә l=1, m=-1 һалларында електронун $\theta=\pi/2$ бучағынын јахын әтрафында олма еһтималы ән чох, θ=0 -а ујғун еһтималы исә сыфра бәрабәр олур. Бу һалларда онун Бор нәзәријјәсинә ујғун орбитләри (w_{11} вә w_{1-1} -ин максимум гијмәти) xy мүстәвисиндә јерләшир вә l=1, m=1 һалында һәрәкәт мигдары моменти z оху истигамәтиндә ($L_z=m\hbar=\hbar$), l=1, m=-1 һалында исә z -охунун әкс истигамәтиндә ($L_z=m\hbar=-\hbar$) јөнәлмиш олур. Буна охшар олараг nd (l=2), nf(l=3) вә и.а.һалларыны да тәһлил етмәк олар (өһдәнизә верилир).



Шәкил 17. Атомда електронун бучаглара көрә пајланма еһтималы.

$w_{nl}(\theta)$ еһтимал сыхлығынын ифадәләриндән вә графикләрдән көрүнүр ки, $P_l^m(\cos\theta)$ функсијасы l=0 -да дүјүн нөгтәсинә (дүјүн сәтһинә) малик дејил, онун формасы сфера шәклиндәдир (шәкил 17-дә графикин z оху әтрафында фырланмасындан алынан фигур). Буну бүтүн ns һаллары һаггында демәк олар. l=1, m=0 вә l=2, m=1 һалларында исә о, бир дүјүн сәтһинә малик олур. Үмумијјәтлә исә $P_l^m(\cos\theta)$ функсијасы $l-|m|$ сајда дүјүн сәтһләринә маликдир. $Y_l^m(\theta,\varphi)$ функсијасынын $e^{im\varphi}$ тәркиб һиссәсинә кәлдикдә о, дүјүн нөгтәләринә малик дејил, лакин онун һәгиги һиссәси $\cos m\varphi$ вә хәјалы (комплекс) һиссәси $i\sin m\varphi$ исә m дүјүн

нөгтәсинә, фәзада исә дүјүн мүстәвисинә маликдир. Беләликлә $Y_l^m(\theta,\varphi)$ функсијасы $n_r=n-l-1$ сајда сферик сәтһә, $l-|m|$ сајда дүјүн сәтһинә вә m сајда полјар охдан кечән дүјүн мүстәвисинә маликдир.

г) E>0 һалынын тәһлили

а) бәндиндә биз гаршылыглы тә`сир енержиси

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r} \tag{40.59}$$

вә E там енержиси исә дискрет спектрә малик олан E<0 һалыны тәһлил етдик. Инди дә E>0 олан һала бахаг.

Фәрз едәк ки, Кулон гаршылыглы тә'сирдә иштирак едән зәррәчикләрин електрик јүкләри ејни ишарәлидир. Белә зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә`сир енержиси үмуми шәкилдә

$$V(r)=\frac{Z'Z''e^2}{r} \tag{40.60}$$

вә E>0 олар. Бурада Z' вә Z'' әдәдләри – електронун јүк ваһидләриндә гаршылыглы тә`сирдә олан зәррәчикләрин јүкләринин сајыны көстәрир.

Јәгин ки, бу параграфда алынан нәтичәләр електронун атомун һүдудларындан кәнара чыхмыш һалда да доғру галар, чүнки бу заман електронун там енержиси E>0 олур.

(40.60) потенсиал енержиси радиус векторун јалныз мүтләг гијмәтиндән асылы олдуғуна көрә

$$\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi)$$

далға функсијасынын бучаглардан асылы $Y(\theta,\varphi)$ һиссәси һеч бир дәјишиклијә уғрамыр вә о, (14.28′) әсасән

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=C_{lm}e^{im\varphi}P_l^m(\cos\theta)$$

олур. $R(r)=\frac{\upsilon(r)}{r}$ радиал функсијасы үчүн исә (40.17) тәнлији әвәзиндә

$$\frac{d^2\upsilon(\rho)}{d\rho^2}(k^2-\frac{2Z}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2})\upsilon(\rho)=0 \tag{40.61}$$

тәнлији алыныр. Бурада $Z=Z'Z''$ вә

$$k^2=\frac{2\hbar^2E}{me^4} \tag{40.62}$$

(40.18) охшар олараг, бу тәнлијин $\rho\to\infty$ -а ујғун асимптотик һәлли

$$\upsilon(\rho)=ae^{ik\rho}+be^{-ik\rho} \qquad (40.63)$$

a вә b сабитләринин гијмәтиндән асылы олмајараг, k-нын истәнилән гијмәтиндә (40.61) тәнлијинин (40.63) һәлли сонлу галыр.

(40.61) тәнлијинин $\rho\to0$ -а ујғун асимптотик һәллини исә, $E<0$ һалында олдуғу кими

$$\upsilon(\rho\to0)\approx\rho^{l+1}$$

шәклиндә тә'јин олунур. Беләликлә, (40.61) тәнлијинин үмуми һәлли

$$v(\rho)=e^{\pm ik\rho}\rho^{l+1}\sum a_\nu\rho^\nu \qquad (40.64)$$

шәклиндә јазыла биләр. Бу һалда (40.22) охшар олараг a_ν әмсаллары үчүн

$$a_{\nu+1}=\frac{2ik\left[(\nu+l+1)-\dfrac{Z}{ik}\right]}{(\nu+1)(\nu+2l+2)}a_\nu \qquad (40.65)$$

рекурент дүстур алыныр. ν=0,1,2,... гијмәтләрини вермәклә бүтүн a_ν әмсалларыны a_o илә ифадә едиб, онлары (40.64) сырасында јеринә јазсаг,

$$\upsilon(\rho)=e^{\pm ik\rho}\rho^{l+1}a_o\left[1+\frac{l+1\pm\dfrac{Z}{ik}}{1!(2l+2)}(\pm2ik\rho)+\frac{(l+1\pm\dfrac{Z}{ik})(1+2\pm\dfrac{Z}{ik})}{2!(2l+2)(2l+3)}(\pm2ik\rho)^2+\ldots\right] \qquad (40.66)$$

алыныр. Бу ахырынчы сыра чырлашмыш һиперһәндәси функсијанын ифадәсидир:

$$F(l+1\pm\frac{Z}{ik},\ 2l+2,\ \pm2ik\rho)=1+\frac{l+1\pm\dfrac{Z}{ik}}{1!(2l+2)}(\pm2ik\rho)+\frac{(l+1\pm\dfrac{Z}{ik})(1+2\pm\dfrac{Z}{ik})}{2!(2l+2)(2l+3)}(\pm2ik\rho)^2+\ldots \qquad (40.67)$$

(40.66)-дан көрүнүр ки, $\upsilon(\rho)$ функсијасы бир тәрәфдән кәсилмәдән дәјишән k далға әдәди, дикәр тәрәфдән исә дискрет дәјишән l орбитал квант әдәди илә тә'јин оунур. Беләликлә $R(\rho)$ радиал функсија үчүн

$$R_{kl}(\rho)=\frac{\upsilon(\rho)}{\rho}=e^{\pm ik\rho}\rho^lF(l+1\pm\frac{Z}{ik},\ 2l+2,\ \pm2ik\rho) \qquad (40.68)$$

алыныр. Беләликлә, $E_k=\dfrac{\hbar^2k^2}{2\mu}$ енержинин, $L^2=\hbar^2l(l+1)$ һәрәкәт мигдары моменти квадратынын вә һәрәкәт мигдары моментинин $L_z=m\hbar$ пројексијасынын мәхсуси гијмәтләринә ујғун Шрединкер тәнлијинин хүсуси һәлли

$$\Psi_{klm}=R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (40.69)$$

вә енержинин мүәјјән E_k гијмәтинә ујғун үмуми һәлли исә

$$\Psi_k=\sum_{l,m}C_{lm}R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (40.70)$$

олур.

Гејд едәк ки, R_{kl} функсијасындан, мәсәлән, α -зәррәчикләрин ^A_ZX нүвәсинин Кулон саһәсиндә сәпилмәси мәсәләсиндә (бу һалда $Z\fallingdotseq Z$ $Z'\fallingdotseq2$ вә $V(r)=\dfrac{2Ze^2}{r}$ олар), јахуд да протонун вә јахуд α -зәррәчијин нүвә дахилиндә һәрәкәтини тәсвир етмәк үчүн истифадә едилә биләр. Бу заман $\rho=\dfrac{me^2}{\hbar^2}r$ вә $k^2=\dfrac{\hbar^2E}{me^4}$ ифадәләриндә m-и α-зәррәчијин M_α вә ја протонун m_p күтләси илә әвәз етмәк лазымдыр.

§ 41. ҺИДРОКЕНӘБӘНЗӘР АТОМЛАРЫН ШУАЛАНМА (УДУЛМА) СПЕКТРЛӘРИ ВӘ СЕЧМӘ ГАЈДАСЫ

а) Сечмә гајдасы. Һәлә Бор нәзәријјәсиндән мә'лумдур ки, атом бир стасионар енержи сәвијјәсиндән дикәринә кечдикдә бу сәвијјәләрин енержиләри фәргинә бәрабәр енержи бурахыр вә ја удур. Бу енержи шүаланма шәклиндә бурахылыб вә ја удулурса, атомар шәклиндә олан маддәләрин бурахдығы енержи – шүаланма спектрләри, уддуғу енержи исә – удулма спектрләри шәклиндә тәчрүбәдә мүшаһидә олунур. Бу спектрләр хәттидир вә һәр бир спектр хәттинин тезлији

$$\omega_{mn}=\frac{E_m-E_n}{\hbar} \qquad (41.1)$$

кими тә'јин олунур. Бурада $E_{n'}$ — n', l' – квант әдәдләри илә верилән стасионар сәвијјәнин ((40.26) бах), E_n исә n,l илә верилән сәвијјәнин енержиләридир.

Квант механикасында һәр һансы бир физики һадисәнин баш вермә имканы ујғун еһтималла характеризә олунур.

Шүаланма нәзәријјәсиндә көрәчәјимиз кими (бах §50) атомун шүабурахма вә шүаудма һадисәләринин еһтималы, биринчи јахынлашмада, онун мүхтәлиф мултипол (дипол, квадрупол, магнитдипол вә и.а.) моментләри операторларынын бахылан кечидә ујғун матриса елементләринин квадратынын аддитив чәми илә мүтәнасибдир. Ахырынчылар исә өз нөвбәсиндә x, y вә z координат операторлары матриса елементләринин мүхтәлиф үстләри илә тә'јин олунур.

Атомун бир енержи сәвијјәсиндән дикәринә кечиди заманы n баш, l орбитал, m магнит квант әдәдләринин бу кечидә ујғун $\Delta n = n' - n$, $\Delta l = l' - l$, $\Delta m = m' - m$ дәјишмәләриндә бахылан матриса елементи (кечид еһтималы) сыфра бәрабәр оларса, белә кечид *гадаған олунмуш кечид*, әкс һалда исә *мүмкүн олан кечид* адланыр. Гејд едәк ки, атомун мултипол шүаланмасында бахылан кечид мултипол моментләрдән бири үчүн гадаған, дикәри үчүн исә мүмкүн кечид ола биләр. Бу һагда биз шүаланманын квант нәзәријјәси параграфында әтрафлы данышачағыг. Инди исә x, y, z операторларына ујғун матриса елементләринин $\Delta n, \Delta l, \Delta m$ дәјишмәләринин һансы гијмәтләри үчүн сыфырдан фәргли галдығыны көстәрәк.

Декарт координатлардан сферик координатлара кечәк вә x, y, z дәјишәнләри әвәзинә ашағыдакы дәјишәнләри көтүрәк:

$$\begin{aligned} \xi &= x + iy = r\sin\theta e^{i\varphi}, \\ \eta &= x - iy = r\sin\theta e^{-i\varphi}, \\ \zeta &= z = r\cos\theta. \end{aligned} \tag{41.2}$$

Физики бахымдан бу, електронун атомдакы һәрәкәтинин $\zeta=z$ оху бојунча ирәлиләмә, xy мүстәвисиндә исә $\xi=x+iy$ илә тәсвир олунан сағ фырланма, $\eta=x-iy$ илә тәсвир олунан сол фырланма һәрәкәтләринә ајырмаг демәкдир.

Јәгин ки, (41.2) илә верилмиш операторларын

$$\xi_{n'l'm'lnm} = \langle n',l',m'|\xi|n,l,m\rangle = \int \Psi^+_{n'l'm'} r\sin\theta e^{i\varphi}\Psi_{nlm} r^2 dr d\Omega \tag{41.3a}$$

$$\eta_{n'l'm'nlm} = \langle n',l',m'|\eta|n,l,m\rangle = \int \Psi^+_{n'l'm'} r\sin\theta e^{-i\varphi}\Psi_{nlm} r^2 dr d\Omega \tag{41.3б}$$

$$\zeta_{n'l'm'nlm} = \langle n',l',m'|\zeta|n,l,m\rangle = \int \Psi^+_{n'l'm'} r\cos\theta\Psi_{nlm} r^2 dr d\Omega \tag{41.3в}$$

матриса елементләриндән һәр һансы биринин сыфырдан фәргли галмасы $\langle n'l'm'| \to |nlm\rangle$ кечидинин мүмкүн олдуғуна дәлаләт едәчәк. $\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ далға функсијасынын (40.40) илә верилмиш ифадәсини бурада јазсаг,

$$\langle n',l',m'|\xi|n,l,m\rangle = \int_0^\infty R_{n'l'}R_{nl}r^3dr\int Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)\sin\theta e^{i\varphi}Y_l^m d\Omega \tag{41.4a}$$

$$\langle n',l',m'|\eta|n,l,m\rangle = \int_0^\infty R_{n'l'}R_{nl}r^3dr\int Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)\sin\theta e^{-i\varphi}Y_l^m d\Omega \tag{41.4б}$$

$$\langle n',l',m'|\zeta|n,l,m\rangle = \int_0^\infty R_{n'l'}R_{nl}r^3dr\int Y_{l'}^{m'*}(\theta,\varphi)\cos\theta Y_l^m d\Omega \tag{41.4в}$$

Бурада $Y_l^m(\theta,\varphi)$ функсијалары арасындакы

$$\cos\theta Y_l^m = aY_{l+1}^m + bY_{l-1}^m \tag{41.5}$$

вә

$$\sin\theta e^{\pm i\varphi}Y_l^m = a_\pm Y_{l+1}^{m\pm1} + b_\pm Y_{l-1}^{m\pm1} \tag{41.6}$$

рекурент дүстурлардан истифадә едиб, һәмин функсијаларын ортонормаланма шәртини өдәдијини нәзәрә алдыгда

$$\langle n',l',m'|\xi|n,l,m\rangle = \mathcal{I}\cdot(a_+\delta_{l',l+1} + b_+\delta_{l',l-1})\delta_{m',m+1} \tag{41.7a}$$

$$\langle n',l',m'|\eta|n,l,m\rangle = \mathcal{I}\cdot(a_-\delta_{l',l+1} + b_-\delta_{l',l-1})\delta_{m',m-1} \tag{41.7б}$$

$$\langle n',l',m'|\zeta|n,l,m\rangle = \mathcal{I}\cdot(a\,\delta_{l',l+1} + b\,\delta_{l',l-1})\delta_{m',m} \tag{41.7в}$$

олур, бурада $\mathcal{I}$ илә

$$\mathcal{I} = \int_0^\infty R_{n'l'}(r)R_{nl}(r)r^3dr \tag{41.8}$$

интегралы ишарә олунмушдур, a, b, $a_\pm$ вә $b_\pm$ әмсаллары билаваситә һесабланыр*:

$$a = \sqrt{\frac{(l+1-m)(l+1+m)}{(2l+1)(2l+3)}}\ ;\ b = \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}, \tag{41.9}$$

еләчә дә

$$a_\pm = \sqrt{\frac{(l+2\pm m)(l+1\pm m)}{(2l+1)(2l+3)}}\ ;\ b_\pm = \mp\sqrt{\frac{(l\mp m)(l-1\mp m)}{(2l+1)(2l-1)}} \tag{41.10}$$

(42.7б) бәрабәрлијиндән

$$\Delta m = m' - m = 0, \qquad \Delta l = l' - l = \pm1 \tag{41.11a}$$

* Бах А.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский, "Квантовая механика", Москва, "Наука", 1979, сәһ. 199.

(42.7а,б)-дән исә

$$\Delta m = m' - m = \pm 1, \qquad \Delta l = l' - l = \pm 1 \qquad (41.11б)$$

алыныр.

X интегралына көлдикдә исә (41.11а) вә (41.11б) мүнасибәтләринә көрә бурада

$$\int_0^\infty R_{n',l\pm1} R_{nl} r^3 dr$$

кими ики интеграла тәсадүф едирик. Онларын билаваситә һесабланмасы көстәрир ки, n' вә n баш квант әдәдләринин истәнилән гијмәтләри үчүн бу интеграллар сыфырдан фәрглидир (бах [29], сәһ. 230). Демәли, мүмкүн кечидләр заманы n баш квант әдәди истәнилән кими дәјишә биләр.

Беләликлә, атомун ики стасионар сәвијјә арасында о вахт кечид мүмкүн олар ки, онун үчүн

$$\Delta n\text{-истәнилән}, \ \Delta l = \pm 1, \ \Delta m = 0, \pm 1 \qquad (41.12)$$

сечмә гајдалары өдәнилсин*.

б) Шүаланма (шүаудма) спектрләри

Атомун стасионар сәвијјәсинин енержиси E_{nl}, һидрокен атомундан башга бүтүн дикәр елементләрин атомлары үчүн јалныз n баш квант әдәдиндән јох, l орбитал квант әдәдиндән дә асылы олур (бах §89).

$\frac{E_{nl}}{\hbar}$ нисбәти атомун спектрал терми адланыр, ону $\frac{E_{nl}}{\hbar} = (nl)$ кими ишарә едирләр. Онда (41.1) илә верилмиш шүаланма тезлијини, үмуми шәкилдә

$$\omega_{n'n} = \frac{E_{n'l'}}{\hbar} - \frac{E_{nl}}{\hbar} = (n'l') - (nl) \qquad (41.13)$$

кими јазмаг олар. Һидрокенәбәнзәр атомларда исә спектрал терм

$$(n,l) = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{me^4 Z^2}{2n^2\hbar^3} = \frac{RZ^2}{n^2}, \qquad (41.14)$$

бурада

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3} \qquad (41.15)$$

*(41.12) сечмә гајдалары јалныз атомун дипол шүаланмасы, јә'ни онун дипол моментинин дәјишмәси һесабына баш верән шүаланма үчүн доғрудур. Јүксәк тәртибли моментләрин дәјишмәси һесабына атомун шүаланмасы үчүн сечмә гајдалары башгадыр (бах §51).

Ридберг сабити адланыр. Бу һалда шүаланма тезлији үчүн

$$\omega_{n'n} = RZ^2\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (41.16)$$

алыныр.

Атомар һидрокенин (Z=1) шүаланма спектриндә тәҹрүбәдә мүшаһидә олунан Лајман серијасы n'=1 сәвијјәсинә n>1 сәвијјәләриндән кечидләр заманы алыныр. n'=1 оланда l=0 гијмәти алдығындан бу сәвијјә 1s сәвијјәси олур, n вә l квант әдәдләри үчүн алынмыш (41.12) сечмә гајдаларыны нәзәрә алсаг, Лајман серијасынын спектрал хәтләри (np) сәвијјәләриндән (1s) сәвијјәсинә кечидләрин нәтиҹәсидир:

$$\omega = (1s - np) = R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad (41.17)$$

бурада n=2,3,4,... дир.

Балмер серијасы исә n'=2 сәвијјәсинә n>2 сәвијјәләриндән кечидләрин нәтиҹәсидир. Бурада n'=2, l=0,1 олдуғундан (41.12) сечмә гајдаларына көрә бурада

$$\begin{aligned} \omega_1 &= (2s - np) \\ \omega_2 &= (2p - ns) \\ \omega_3 &= (2p - nd) \end{aligned} \qquad (41.18)$$

кими үч нөв кечид мөвҹуддур. Лакин һидрокенәбәнзәр атомларда n'=2, l=0 вә l=1 сәвијјәләри бир-биринин үзәринә дүшдүјүндән (чырлашма), үч кечид нәтиҹәси олан шүаланма хәтләри бир-биринин үзәринә дүшүр вә n-ин фиксә едилмиш гијмәтиндә спектрдә

$$\omega_Б = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n=3,4,5,... \qquad (41.19)$$

кечидинә ујғун бир хәтт кими көрүнүр (шәкил 18)

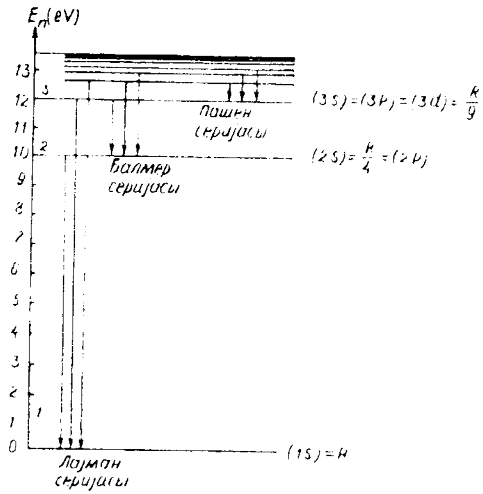
Ејни шәкилдә Пашен серијасы

$$\omega_П = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n=4,5,6,... \qquad (41.20)$$

кечидләринә ујғун хәтләр чохлуғу, Пфунд серијасы

$$\omega_{Пф} = R\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad n=5,6,7,... \qquad (41.21)$$

кечидләринә ујғун хәтләр чохлуғу кими вә и.а. мүшаһидә олунур.



Шәкил 18. Һидрокен атомунун спектр серијалары.

Атомун дискрет сәвијјәләри арасындакы кечидләрә ујғун атомун шүабурахма вә шүаудма просесләриндән башга, атомун ионизасијасы вә атомун сәрбәст електрон зәбтетмә просеси кими даһа ики просес баш верә биләр. Атомун ионизасијасы заманы атомун дискрет сәвијјәләрин бириндәки електрон атому тәрк едир, јә'ни о спектрин $E<0$ областындан $E>0$ областына кечир. Бу просес атом тәрәфиндән енержинин удулмасы һесабына баш верир вә атомун ионизасијасы адланыр. Ионизасија енержиси

$$E^{ион} = K - E_n$$

фәргилә тә'јин олунур, бурада $K = \dfrac{m\upsilon^2}{2}$ атомдан кәнара чыхан електронун кинетик енержиси, E_n исә електронун тәрк етдији дискрет сәвијјәнин енержисидир. Һидрокен атому үчүн ионизасија енержисинин минимал гијмәти K=0, n=1-ә ујғундур; јә'ни електронун K-тәбәгәсиндән E=0 сәвијјәсинә кечидин енержисинә бәрабәрдир:

$$E_{min}^{ион} = -E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13{,}5eB\,. \qquad (41.22)$$

Електронун атом тәрәфиндән зәбт едилмәси просесиндә исә сәрбәст електрон атомун дискрет сәвијјәләриндән биринә кечир вә бу заман ујғун енержи ајрылыр (бурахылыр).

Гејд едәк ки, һидрокенәбәнзәр атомларын јухарыда шәрһ едилмиш нәзәријјәсиндә (40.9) тәнлијинә дахил олан кәтирилмиш күтлә, (40.11)-ә әсасән, електронун m_e күтләси илә әвәз едилмишди. Бу бахымдан верилмиш нәзәријјә о вахт там дәгиг олар ки, нүвәнин күтләси сонсуз бөјүк олсун. Јүнкүл нүвәләр үчүн бу нәзәрријјәни, јәгин ки, јалныз биринчи јахынлашма кими гәбул етмәк олар. Доғрудан да, јүнкүл атомлар үчүн јухарыда нәзәријјәдән алынан нәтичәләрин тәҹрүби фактларла мүгајисәси онлар арасында һисс олуначаг тәртибдә ујғунсузлуғун олдуғуну көстәрди.

Һидрокенәбәнзәр атомлар үчүн (40.13) тәнлији әвәзиндә (40.9) тәнлијини һәлл етмиш, јә'ни нүвәнин һәрәкәти дә нәзәрә алынмыш олсајды, енержи спектри үчүн ејнилә (40.26) ифадәси алынарды, лакин онун ифадәсинә сонсуз күтләјә ујғун $R = R_\infty = \dfrac{me^4}{2\hbar^3}$ Ридберг сабити әвәзинә, нүвәнин сонлу күтләсинә ујғун $R_M = \dfrac{m_\kappa e^4}{2\hbar^3}$ Ридберг сабити дахил олар. (40.11)-ә әсасән

$$R_M = \frac{e^4}{2\hbar^3}\cdot\frac{mM}{m+M} = \frac{me^4}{2\hbar^3}\cdot\frac{1}{1+\dfrac{m}{M}} = \frac{me^4}{2\hbar^3}\left(1+\frac{m}{M}\right)^{-1} \approx R_\infty\left(1-\frac{m}{M}\right) \qquad (41.23)$$

олар, бурада M –нүвәнин, m исә електронун күтләсидир.

Бу һалда шүаланма тезлији

$$\omega_{n'n} = R_M Z^2\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right) = R_\infty Z^2\left(1-\frac{m}{M}\right)\left(\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad (41.24)$$

кими тә'јин олунур.

(41.24) дүстуру һидрокенин изотоплары олан дејтеринин ${}_1^2H(D)$ вә тритинин ${}_1^3H(T)$ кәшфиндә мүһүм рол ојнамышдыр. Һидрокен үчүн R_M сабити

$$R_H = R_\infty\left(1-\frac{1}{1836}\right), \qquad (41.25)$$

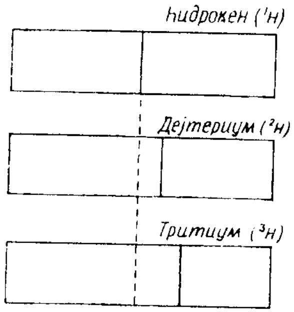
дејтериј үчүн

$$R_D = R_\infty\left(1-\frac{1}{3680}\right) \qquad (41.26)$$

вә тритиј үчүн исә

$$R_T = R_\infty\left(1-\frac{1}{5520}\right). \qquad (41.27)$$

$R_T > R_D > R_H$ олдуғундан бу атомлара ујғун спектрләрдә һәр һансы бир серијанын спектр хәтләри шүаланма тезлијинин бөјүмәси истигамәтиндә $\omega_H < \omega_D < \omega_T$ ардычыллығы илә бири дикәринә нәзәрән сүрүшмүш олачагдыр. Мәһз бу да спектроскопик тәдгигатларда мүшаһидә олунмушдур (шәкил 19).



Шәкил 19. һидрокен атому изотопларынын спектрал хәтләринин нисби вәзијјәти.

(41.24) дүстурундан чыхан икинчи мүһүм нәтичә илк дәфә Ҝүнәшдә һелиум елементинин кәшфиндән ибарәт олмушдур. Доғрудан да, Ҝүнәшин атмосферində ионлашмыш $^4_2He^+$ һелиум газы мөвчуддурса, онун спектриндә спектрал хәтләрин дүзүлүшү (41.24) дүстуру илә верилмәлидир. Бу һалда Z=2 олур.

Ҝүнәш спектрини тәдгиг етдикдә хәтләри

$$\omega_{2n_1} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) \qquad (41.28)$$

гануну илә дүзүлмүш серија мүшаһидә олунмушдур. Лакин, бурада n_1 һәмишә там јох,

$$n_1 = 5/2;\ 3;\ 7/2;\ 4;\ 9/2, \ldots \qquad (41.29)$$

кими гијмәтләр алырды. Бу серија *Пикеринг серијасы* адланмышды. Бу серија маһијјәтчә n_1=3, 4, 5,... ујғун спектр хәтләри арасында n_1=5/2, 7/2, 9/2,... ујғун спектр хәтләри јерләшмиш һидрокенин Балмер серијасыны хатырладырды, лакин серијанын n_1-ин там јарым гијмәтләринә ујғун хәтләри ону там Балмер серијасы адландырмаға имкан вермирди.

Узун мүбаһисәләрдән сонра алимләр бу серијанын, нүвәсинин күтләси M=7360 m (m–електронун күтләси) вә тезликләри

$$\omega_{He} = R_{He} 2^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (41.30)$$

ифадәси илә верилән ионлашмыш һелиумун (Z=2) серијасы олдуғу гәрарына кәлдиләр. (41.30)-да n_1=4 көтүрүб, һәр бир һәдди 2^2-на бөлсәк,

$$\omega_{He} = R_{He}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\left(\frac{n}{2}\right)^2}\right) \qquad (41.31)$$

ифадәси алыныр, бурада n=5,6,7,8,... гијмәтләрини алдығыны фәрз етмиш олсаг, серијанын хәтләри үчүн (41.28) илә верилмиш дүзүлүш гануну алынмыш олур. (41.23) ујғун олараг

$$R_{He} = R_\infty\left(1 - \frac{m}{M_{He}}\right) = R_\infty\left(1 - \frac{1}{7360}\right) \qquad (41.32)$$

олур. Лакин, бу серијанын, доғрудан да, ионлашмыш һелиума аид олдуғуну тәсдиг етмәк үчүн һидрокенә вә һелиума ујғун R_H вә R_{He} Ридберг сабитләринин тәчрүби јолла өлчүлмәси тәләб олунурду. Белә өлчүләр Пикеринг серијасынын доғрудан да ионлашмыш һелиум газына аид олдуғуну тәсдиг етмиш олду.

§ 42. АТОМУН МАГНИТ МОМЕНТИ

Електронун атомдакы һәрәкәтинә гапалы чәрәјан кими бахмаг олар. Електродинамикадан мә'лумдур ки, һәр бир гапалы чәрәјан

$$\vec{M} = \frac{I\vec{S}}{c} \qquad (42.1)$$

кими тә'јин олунан магнит моментинә еквивалентдир. Бурада I– чәрәјан шиддәти, $\vec{S} = \vec{n}S$, S – гапалы чәрәјанын гападығы сәтһ, $\vec{n}$ – һәмин сәтһин харичи нормалы истигамәтиндә јөнәлмиш ваһид вектордур.

Бундан әввәлки параграфда көрдүк ки, електрон атомда E енержинин, L^2 һәрәкәт мигдары моменти квадратынын вә һәрәкәт мигдары моментинин z оху бојунча L_z пројексијасынын мүәјјән гијмәтләри илә тә'јин олунан стасионар һалларда ола биләр вә бу һаллар

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \qquad (42.2)$$

далға функсијасы илә тәсвир олунур.

Бахылан Ψ_{nlm} стасионар һалда електрик чәрәјаны шиддәтинин сыхлығы (17.12)-јә көрә

$$\vec{j} = \frac{ie\hbar}{2\mu}(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi) \qquad (42.3)$$

бурада μ, e – електронун күтләси вә јүкү, $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$, h – Планк сабитидир. Сферик координат системиндә $\vec{\nabla}$-нын пројексијалары $\nabla_r = \dfrac{\partial}{\partial r}$; $\nabla_\theta = \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial\theta}$, $\nabla_\varphi = \dfrac{1}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ олдуғундан $\vec{j}$ чәрәјан шиддәти сыхлығынын ујғун компонентләри

$$j_r = \frac{i e\hbar}{2\mu}\left(\Psi_{nlm}\frac{\partial}{\partial r}\Psi^+_{nlm} - \Psi^+_{nlm}\frac{\partial}{\partial r}\Psi_{nlm}\right),$$

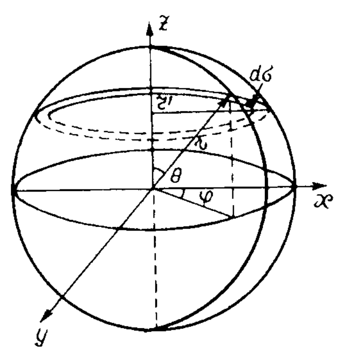
$$j_\theta = \frac{i e\hbar}{2\mu}\left(\Psi_{nlm}\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi^+_{nlm}}{\partial\theta} - \Psi^+_{nlm}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi_{nlm}\right), \qquad (42.4)$$

$$j_\varphi = \frac{i e\hbar}{2\mu}\left(\Psi_{nlm}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\Psi^+_{nlm}}{\partial\varphi} - \Psi^+_{nlm}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\Psi_{nlm}}{\partial\varphi}\right).$$

Ψ_{nlm}-ин (42.2) ифадәсиндә $R_{nl}(r)$ – радиал функсија вә $P_l^m(\cos\theta)$ – Лежандр полиному һәгиги функсијалардыр. Онлар үчүн $\frac{\partial R_{nl}}{\partial r} = \frac{\partial R^*_{nl}}{\partial r}$. $\frac{\partial P_l^m}{\partial\theta} = \frac{\partial P_l^{*m}}{\partial\theta}$ бәрабәрликләри өдәнилдијиндән $j_r = j_\theta = 0$ олур. φ-дән асылы $\Phi_m(\varphi)=e^{im\varphi}$ функсијасы исә комплекс функсијадыр. Онун үчүн $\frac{\partial\Phi^+_m}{\partial\varphi} = -\frac{\partial\Phi_m}{\partial\varphi} = -ime^{im\varphi}$ олдуғундан, (42.4)-дән

$$j_\varphi = -\frac{e\hbar}{\mu r\sin\theta}m\left|\Psi_{nlm}\right|^2 \qquad (42.5)$$

олур.



Шәкил 20

Ади физики мүлаһизәләрдән алыныр ки, j_r вә j_θ пројексијалары сыфра бәрабәр олмалыдыр. Доғрудан да, атому електрик јүкү илә јүкләнмиш бир күрә тәсәввүр едәк. Онун үчүн j_r пројексијасы сыфырдан фәргли олсајды, електрик јүкү ја күрәнин мәркәзинә топланар, ја да ондан кәнара ахарды.

Ејни шәкилдә j_θ -нын сыфырдан фәргли олмасы, јүкүн күрәнин гүтбләринә јығылмасына кәтирәрди. Атом үчүн тәбиәтдә бунларын һеч бири мүшаһидә олунмур. Демәли, атомда електрик јүкү ен даирәләр бојунча ахыр (шәкил 20).

(42.5) ифадәси бизә атомун магнит моментини һесабламаға имкан верир. Фәрз едәк ки, чәрәјан ен кәсији $d\sigma$ олан борудан ахыр. Онун чәрәјан шиддәти

$$dJ = j_\varphi d\sigma.$$

Бело сонсуз кичик шиддәтли гапалы чәрәјана ујғун магнит моменти (42.1)-ә көрә

$$dM_\varphi = \frac{dJS}{c} = \frac{j_\varphi S d\sigma}{c} \qquad (42.6)$$

олар. Бурада S–dJ чәрәјанынын гападығы сәтһин саһәси, $r'=r\sin\theta$ онун радиусу, $S=\pi r'^2=\pi r^2\sin^2\theta$ – онун әдәди гијмәтидир. Сәтһин харичи нормалы z оху истигамәтиндә јөнәлдијиндән, (42.5)-дән

$$dM_\varphi = dM_z = -\frac{\pi r^2\sin^2\theta\, e\hbar}{\mu c r\sin\theta}\left|\Psi_{nlm}\right|^2 m. \qquad (42.7)$$

олур. $2\pi r' d\sigma = 2\pi r\sin\theta d\sigma = dV$ – борунун һәчмидир. Бурадан атомун там магнит моментини тапмаг үчүн (42.7)-дән онун һәчми боју интеграл алмаг лазымдыр:

$$M_z = \frac{e\hbar}{2\mu c}m\int\left|\Psi_{nlm}\right|^2 dV. \qquad (42.8)$$

Ψ_{nlm} – функсијалары нормаланмыш функсијалар олдуғундан, (42.8)-дәки интеграл ваһидә бәрабәр олар. Беләликлә, атомун магнит моментинин oz оху бојунча пројексијасы

$$M_z = \frac{e}{2\mu c}m\hbar = mM_Б \qquad (42.9)$$

олар. Бурада $M_Б = -\frac{e\hbar}{2\mu c}$ – Бор магнетонудур.

(42.9)-дан көрүнүр ки, атомун магнит моменти Бор магнетонунун там мисилләринә (m=0,±1±...,±l) бәрабәр олуб, квант тәбиәтлидир. Дикәр тәрәфдән електронун орбитал һәрәкәтинә ујғун атомун һәрәкәт мигдары моментинин L_z пројексијасы $L_z = m\hbar$ (бах (40.43)) бәрабәрдир. (42.9)-да $L_z = m\hbar$ көтүрсәк,

$$M_z = -\frac{l}{2\mu c}L_z \qquad (42.10)$$

вә ја

$$\frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2\mu c} \qquad (42.11)$$

мүнасибәтләрини аларыг.

z охунун истигамəти ихтијари сечилдијиндəн (41.10) мүнасибəти јалныз M_z вə L_z үчүн јох, векторларын өзлəри үчүн дə доғру олар:

$$\vec{M} = -\frac{e}{2\mu c}\vec{L}. \tag{42.12}$$

Атомун (42.10) вə (42.12) мүнасибəтлəри илə рабитəдə олан магнит вə һəрəкəт мигдары моментлəри онун орбитал магнит моменти вə орбитал һəрəкəт мигдары моменти адланыр. Електронун спин моментинə малик олмасы факты нəзəрə алындыгда, спин моменти илə рабитəдə олан спин магнит моменти мејдана чыхыр. Атомун бу əлавə моментлəринин

$$\frac{M_{sz}}{L_{sz}} = -\frac{e}{\mu c}, \quad \vec{M}_s = -\frac{e}{\mu c}\vec{s} \tag{42.13}$$

нисбəти ики дəфə (42.12)-дəн бөјүкдүр (бах (61.6)). $\vec{s}$ спин моментидир.

§ 43. СФЕРИК СИММЕТРИК ПОТЕНСИАЛ ЧУХУРДА ЗƏРРƏЧИЈИН ҺƏРƏКƏТИ

(Үчөлчүлү изотроп һармоник осилјатор)

Хəтти һармоник осилјаторун потенсиал енержи графикини (бах: шəкил 13) фəзада $U(x)$ -оху əтрафында 360° фырлатдыгда алынан фигур үчөлчүлү сферик симметрик потенсиал чухур олар. Белə чухурда һəрəкəт едəн зəррəчијин потенсиал енержиси бучаглардан асылы олмајыб, јалныз радиус векторун мүтлəг гијмəтинин квадратындан асылыдыр

$$U(r) = \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}. \tag{43.1}$$

Белə потенсиал енержили систем изотроп һармоник осилјатор адланыр, бурада μ–онун күтлəси, ω–дөври тезлијидир. Белə һəрəкəтин тəдгиги атом нүвəлəринин бə'зи хассəлəринин өјрəнилмəсиндə хүсуси əһəмијјəт кəсб едир.

Бахылан системин һаллары стасионар һаллар олдуғундан, потенсиал енержинин минимумуну енержинин башланғычы кими гəбул етсəк, стасионар һаллар мүсбəт енержијə ујғун олар вə бу һаллар

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}\Psi(x,y,z) = E\Psi \tag{43.2}$$

тəнлији илə тəсвир олунар. Бурада

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2$$

олдуғундан (бах (39.8)), (43.2) тəнлијинин һəлли сферик координат системиндə

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi) \tag{43.3}$$

шəклиндə ахтарыла билəр.

(14.5) əсасəн (14.28′) илə верилмиш $Y(\theta,\varphi)$ сферик функсија үчүн

$$\nabla_{\theta\varphi}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = -l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{43.4}$$

тəнлији өдəнилир. Онда $R(r)$ радиал функсија

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - E\right)R(r) = 0 \tag{43.5}$$

тəнлијини өдəјəр.

Бурада $R = \dfrac{\upsilon(r)}{r}$ кəтүрүб

$$\xi = \frac{r}{a}, \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}, \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

əвəзлəрини гəбул етмəклə адсыз дəјишəнлəрə кечсəк, $\upsilon(r)$ функсијасы үчүн

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} + 2\varepsilon\right)\upsilon(\xi) = 0 \tag{43.6}$$

тəнлији алынар.

§ 35 вə § 39 əсасəн бу тəнлијин $-\infty \le \xi \le \infty$ интервалында сонлу галан һəлли

$$\upsilon(\xi) = e^{-\xi^2/2}\xi^{2s}f(\xi) \tag{43.7}$$

шəклиндə ахтарыла билəр (асимптотик һəллəрин ахтарылмасы əмəлијјаты). Бу заман $f(\xi)$ үчүн

$$\begin{aligned} &f''(\xi) + \left(-2\xi + \frac{4s}{\xi}\right)f'(\xi) + \\ &+\left[-1 - 4s + \frac{2s(2s-1) - l(l+1)}{\xi^2} + 2\varepsilon\right]f(\xi) = 0. \end{aligned} \tag{43.8}$$

Далға функсијасынын $\xi\to 0$-да сонлу галмасы тәләбиндән

$$2s(2s-1)-l(l+1)=0, \qquad (43.9)$$

s параметри үчүн

$$2s=l+1 \text{ вә ја } s=\frac{1}{2}(l+1) \qquad (43.10)$$

гијмәти алыныр. s -ин бу гијмәтини (43.8)-дә јазсаг,

$$f''(\xi)+2(-\xi+\frac{l+1}{\xi})f'(\xi)+\left[-1-2(l+1)+2\varepsilon\right]f(\xi)=0 \qquad (43.8')$$

алынар. Бурада $z=\xi^2$ кими јени дәјишәнә кечиб,

$$\frac{1}{2\xi}f'(\xi)=f'(z), \quad f''(\xi)=2f'(z)+4zf''(z)$$

бәрабәрликләрини нәзәрә алсаг, $f(z)$ үчүн

$$zf''(z)+(l+3/2-z)f'(z)-\frac{1}{2}(l+3/2-\varepsilon)f(z)=0 \qquad (43.11)$$

тәнлији алыныр.

Гејд едәк ки, (43.11) тәнлији

$$zf''(z)+(\gamma-z)f'-\alpha f(z)=0 \qquad (43.12)$$

тәнлијинин хүсуси һалыдыр, бурада z–дәјишәни вә еләчә дә α, γ параметрләри үмумијјәтлә комплекс дә ола биләр. Доғрудан да,

$$\alpha=\frac{1}{2}(l+3/2-\varepsilon), \quad \gamma=l+3/2 \qquad (43.13)$$

оларса, (43.11) тәнлији (43.12)-нин үзәринә дүшүр. (43.12) тәнлијинин һәлли исә ријази-физикада мә'лумдур*. О,

$$F(\alpha,\gamma,z)=1+\frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!}+\ldots \qquad (43.14)$$

сырасы шәклиндә тә'јин олунан $F(\alpha,\gamma,z)$ чырлашмыш һиперһәндәси функсијадыр. (43.14)-дән көрүнүр ки, $z=0$ нөгтәсиндә функсија сонлу галыр вә о, $F(\alpha,\beta,0)=1$ олур. Функсијанын $z\to\infty$ -да сонлу галмасы үчүн α– параметри мәнфи там әдәдә бәрабәр олмалыдыр, јә'ни $\alpha=-n$, n исә 0,1,2,3,... кими гијмәтләр алыр.

---

* Бах [1], сәһ. 225

α -нын бу гијмәтини (43.13)-јә јеринә јазсаг, системин енержи спектри үчүн

$$\varepsilon=2n+l+\frac{3}{2}=\frac{E}{\hbar\omega}$$

вә бурадан

$$E_{nl}=\hbar\omega(2n+l+3/2) \qquad (43.15)$$

алыныр. (43.12) -нин һәлли олан $f(z)$ функсијасы үчүн исә

$$f(z)=F(-\frac{1}{2}(l+3/2-\varepsilon),\ l+3/2,\ z) \qquad (43.16)$$

ифадәси алыныр. Бурадан

$$\upsilon_{nl}(z)=e^{-\frac{z}{2}}z^{s}F(-n,l+3/2,z) \qquad (43.17)$$

вә ја

$$\upsilon_{nl}(\xi)=e^{-\xi^2/2}\xi^{l+1}F(-n,l+3/2,\xi^2) \qquad (43.17')$$

вә $R=\dfrac{\upsilon(r)}{r}$ радиал функсија үчүн

$$R_{nl}(\xi)=N_{nl}e^{-\xi^2/2}\xi^{l}F(-n,l+3/2,\xi^2) \qquad (43.18)$$

алыныр, бурада N_{nl} нормалајычы вуругдур.

Үчөлчүлү изотроп һармоник оссилјаторун үмуми далға функсијасы

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (43.19)$$

олур.

(43.15)-дән көрүнүр ки, изотроп оссилјаторун стасионар енержи сәвијјәләри ики n вә l квант әдәдләриндән асылыдыр. Лакин онун енержисини хәтти оссилјаторун енержисинә охшар шәкилдә (бах §35) јазмаг үчүн

$$\Lambda=2n+l \qquad (43.20)$$

кими јени Λ квант әдәди дахил едәк. О, баш квант әдәди адланыр. l-ин верилмиш гијмәтиндә

$$\Lambda = l,\ l+2,\ l+4, \ldots \qquad (43.21)$$

гијмәтләрини алыр. (43.20)-дән (43.15) ифадәси

$$E_\Lambda = \hbar\omega(\Lambda + 3/2) \qquad (43.22)$$

олур. Үчөлчүлү изотроп һармоник оссилјаторун стасионар сәвијјәләрини ишарә етмәк үчүн (Λ, l) квант әдәдләри әвәзинә

$$\left[\frac{1}{2}(\Lambda - l) + 1\right] \text{ вә ја } (n+1, l) \qquad (43.23)$$

квант әдәдләри комбинасијасы көтүрүлүр. Мәркәзи саһәдәки һәрәкәтдә олдуғу кими l-ин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун сәвијјәләр

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$$
$$s,\ p,\ d,\ f,\ \ldots$$

кими ишарә едилир. Лакин бу һәрфләрин габағында n-ин јох, $n+1$-ин гијмәти јазылыр, јә'ни стасионар сәвијјә $(n+1)X(X=s,p,d,f,\ldots)$ кими ишарә олунур.

Λ-нын верилмиш гијмәтиндә орбитал квант әдәди l, Λ-нын чүт гијмәтләриндә, (43.20)-ә әсасән, $l=0,2,4,\ldots,\ \Lambda$-2 ; Λ-нын тәк гијмәтләриндә исә $l=1,3,5,\ldots\ \Lambda-2$ гијмәтләрини алыр. l-ин һәр бир гијмәтинә n-ин јалныз бир гијмәти, m-магнит квант әдәдинин исә $(2l+1)$ сајда мүхтәлиф гијмәтләри ујғун кәлир. (43.23)-ә әсасән $\Lambda=0(l=0,\ n=0,\ n+1=1)$ гијмәтинә ујғун $1s$ вә $\Lambda=1$ $(l=1,\ n=0,\ n+1=1)$ гијмәтинә ујғун $1p$ сәвијјәләри l-ә көрә чырлашмыш олмур. $\Lambda \geq 2$-јә ујғун сәвијјәләр исә l-ә көрә чырлашмыш олур. Доғрудан да, $\Lambda=2$ оланда $n=1,\ l=0$ вә $n=0,\ l=2$ олдуғундан $E_2 = \frac{7}{2}\hbar\omega$ сәвијјәси, (43.23)-ә әсасән $2s$ вә $1d$ кими ики гат чырлашмыш олур. Ејни шәкилдә $\Lambda=3$-дә $E_3 = \frac{11}{2}\hbar\omega$ сәвијјәси $2p$ вә $1f$ сәвијјәләриндән ибарәт олур. l-ин верилмиш гијмәтинә ујғун сәвијјә исә m-ә көрә $(2l+1)$ тәртибдә чырлашмыш олур. Мәсәлән, $2s$ вә $1d$-дән ибарәт олан E_2 сәвијјәсинин чырлашма дәрәчәси 6-ја бәрабәрдир. Онлардан бири $(2s)$ үчүн $l=0,\ m=0$, галан беш сәвијјә үчүн исә $l=2,\ m=-2,-1,0,1,2$ олур. Беләликлә, Λ-нын верилмиш гијмәтинә ујғун сәвијјәнин үмуми чырлашма дәрәчәси $N_\Lambda = \frac{1}{2}(\Lambda+1)(\Lambda+2)$ -јә бәрабәрдир.

Гејд едәк ки, сәвијјәнин m-ә көрә чырлашмасы потенсиал саһәнин сферик симметријасы илә бағлы олдуғу һалда, сәвијјәнин "тәсадүфи чырлашмасы" адланан l-ә көрә чырлашма исә мәсәләнин симметријасы илә јох, потенсиал енержинин мәсафәдән квадратик асылылығы илә әлагәдардыр.

Ашағыдакы чәдвәлдә ашағы стасионар һалларын квант әдәдләри, радиал функсијалары вә енержи сәвијјәләринин N_Λ чырлашма дәрәчәси көстәрилмишдир.

Λ	n	l	Һалын ишарәси	$R_{nl}(\xi)$	N_Λ
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	$2s$	$\frac{\sqrt{8/3}}{\pi^{1/4}a^{3/2}}(\xi^2 - \frac{3}{2})e^{-\xi^2/2}$	6
	0	2	$1d$	$\frac{\sqrt{16/15}}{\pi^{1/4}a^{3/2}}\xi^2 e^{-\xi^2/2}$	

§ 44. ПЕРИОДИК САҺӘДӘ ҺӘРӘКӘТ

Бәрк чисмин әсас хүсусијјәтләриндән бири онун кристал гурулуша – гәфәс гурулушуна малик олмасыдыр. Бәрк чисмин кристал гәфәсинин тәпә нөгтәләриндә јерләшмиш атомлары гәфәсдә мүәјјән низамла дүзүлмүш олур вә бу низам бүтүн чисим боју тәкрар олунур. Беләликлә, гәфәсин гурулушу мә'лум оларса, бәрк чисмин гурулушу да мә'лум олмуш олур. Гәфәсдә атомлараарасы мәсафә сабит галарса вә онун гурулушу чисим боју деформасија олунмадан тәкрар олунарса, белә бәрк чисим ***идеал кристал*** адланыр.

Бәрк чисмә јүнкүл зәррәчикләр системи (електронлар) илә ағыр зәррәчикләр системиндән (нүвәләрдән) ибарәт ики мүхтәлиф системин вәһдәти кими бахсаг, онун електронлар системи нүвәләрин јаратдығы саһәдә һәрәкәт едәр. Идеал кристалда белә саһә там периодик саһә олар.

Бәрк чисмин оптик, електрик, магнит вә бә'зи башга хассәләри әсасән онун електрон системинин верилмиш һалы илә тә'јин олунур. Квант механикасы бахымындан бу мәсәләни тәдгиг етмәк истәсәк, биз, әслиндә чохелектронлу систем илә тәсадүф етмиш олуруг. Лакин чохзәррәчикли систем үчүн јазылмыш Шрединкер тәнлијини һәлл етмәк чох мүрәккәб мәсәләдир. Белә мүрәккәб мәсәләнин тәһлили үчүн тәтбиг олунан тәхмини методлардан ән әһәмијјәтлиси *бирелектронлу јахынлашма мето-*

дудур. Бу методда електронларын әслиндә мүрәккәб һәрәкәти бир електронун нүвәнин вә дикәр електронларын јаратдығы биркә саһәдәки һәрәкәти илә әвәз олунур.

Белә үмуми саһәнин потенсиалыны (о. *ефектив потенсиал* адланыр) тапмаг мәсәләсинин өзү дә чох мүрәккәб мәсәләдир. Лакин кристал бәрк чисимдә еффектив потенсиалын периодунун кристалын фәза гәфәсинин периодуна бәрабәр олмасы факты мәсәләнин һәллини хејли асанлашдырыр.

Әлбәттә јухарыдакы јахынлашманын нә дәрәчәдә доғру олмасы, ондан чыхан нәтичәләрин тәчрүбәдә тәсдиг едилиб едилмәмәси илә тә'јин олунур. Гејд едәк ки, бу јахынлашма бәрк чисмин бир чох хассәләринин характерини кејфијјәтчә вә бә'зән дә кәмијјәтчә ајдынлашдырмаға имкан верир.

Еффектив потенсиалын периодиклији үч өлчүлү һәрәкәти бир-бириндән асылы олмајан үч бирөлчүлү һәрәкәтә кәтирмәјә имкан вердијиндән, бурада бирөлчүлү һәрәкәтин тәдгиги илә кифајәтләнәчәјик, беләки, алынан нәтичәләри үчөлчүлү һәрәкәт үчүн үмумиләшдирмәк һеч бир чәтинлик төрәтмир.

Фәрз едәк ки, електрон периоду бирөлчүлү кристал гәфәсин a периодуна бәрабәр

$$V(x)=V(x+a) \qquad (44.1)$$

еффектив потенсиалын саһәсиндә солдан сағa һәрәкәт едир. Бу һәрәкәтдә електрон атомларын електронлары тәрәфиндән дәф, атомларын мәркәзинә јахын мәсафәләрдә исә нүвәләр тәрәфиндән чәзб олунур. Биринчи һалда потенсиал енержи мүсбәт, икинчи һалда мәнфидир вә $x=na$ (n=0,±1, ±2,...) нөгтәләриндә о, биринчи тәртиб полјуса малик олур. Потенсиал енержинин мәсафәјә көрә белә дәјишмәси, јәгин ки, кифајәт гәдәр бөјүк енержили електронлар үчүн доғру олар. Кичик енержили електронлар исә атомларын електрон өртүјүнүн тә'сири нәтичәсиндә нүвәләрә кифајәт гәдәр кичик мәсафәјә јахынлаша билмир.

Кристалын дахилиндәки електрик саһәсинин потенсиалы замандан асылы олмадығындан системин һаллары стасионар олар вә бахылан һәрәкәт стасионар һалларын

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \text{ вә ја } \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\Psi(x)=E\Psi(x) \qquad (44.2)$$

Шрединкер тәнлији илә тәсвир олунар. μ – електронун күтләсидир.

(44.2) тәнлијини һәлл етмәк үчүн импулс тәсвиринә кечәк. (11.8) әсасән

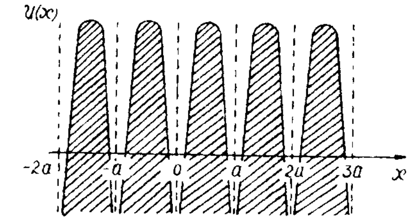
$$\Psi(x)=\int C(p)\Psi_p(x)dp=\int C(k)\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}dk, \qquad (44.3)$$

бурада $k=\dfrac{p}{h}$ – далға векторудур.

$V(x)$ еффектив потенсиалын (44.1) периодиклик шәрти ону **Фурје** сырасына ајырмаға имкан верир:

$$V(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}V_n e^{i\frac{2\pi n}{a}x}, \qquad (44.4)$$

$$V_n=V^*_{-n}(n=0,\pm1,\pm2,\dots).$$



Шәкил 21. Кристалда електронун потенсиал енержи әјриси.

(44.3) илә (44.4)-ү (44.2)-дә јазсаг,

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\int k^2C(k)\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}dk+\sum_{n=-\infty}^{n=\infty}\int C(k)\frac{e^{i(k+\frac{2\pi n}{a})x}}{\sqrt{2\pi}}dk=E\int C(k)\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}dk$$

алынар. Бу тәнлији солдан $\dfrac{e^{-ik'x}}{\sqrt{2\pi}}$-јә вуруб, бүтүн бирөлчүлү фәза үзрә ($-\infty,\infty$) интервалында интеграллајандан сонра

$$\delta(k)=\frac{1}{2\pi}\int e^{ikx}dx,$$

δ-функсијанын

$$\int f(k)\delta(k'-k)dk=f(k')$$

хассәсиндән истифадә етдикдә

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2-E\right)C(k)+\sum_n V_nC(k+\frac{2\pi}{a}n)=0 \qquad (44.5)$$

тәнлијини алырыг. (44.5) тәнлији импулс фәзасында јазылмыш (44.2) тәнлијидир. Бу тәнликдә n үзрә чәм апардыгда, она импулс фәзасында верилмиш вә аргументләри бир-бириндән $\dfrac{2\pi}{a}$ кәмијјәти илә фәргләнән $C(k)$-һал функсијалары дахил олар. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, бу функсијалар бири дикәри илә тә'јин олунур. Буну көстәрмәк үчүн (44.5)-дә k-ны $k+\dfrac{2\pi}{a}m$ илә әвәз едиб, m-ә m= 0, ±1, ±2, +... гијмәтләри версәк, $C(k)$ функсијалары үчүн

$$m=0,\quad \left(\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2 - E\right)C(k) + \sum_n V_n C\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right) = 0$$

$$m=1,\quad \left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k + \frac{2\pi}{a}\right)^2 - E\right]C\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) + \sum_n V_n C\left(k + \frac{2\pi}{a} + \frac{2\pi n}{a}\right) = 0 \qquad (44.6)$$

$$m=-1,\quad \left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2 - E\right]C\left(k - \frac{2\pi}{a}\right) + \sum_n V_n C\left(k - \frac{2\pi}{a} + \frac{2\pi n}{a}\right) = 0$$

....

....

сонсуз сајда тәнлик дахил олан хәтти бирчинс чәбри тәнликләр системи алыныр.

(44.6) системинин сыфырдан фәргли һәллинин олмасы үчүн $C(k)$ -ларын әмсалларындан тәшкил олунмуш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр. Бу детерминант E, k кәмијјәтләриндән вә V_n әмсалларындан асылыдыр:

$$\Delta(E,k,V_n) = 0\,. \qquad (44.7)$$

Ону ачсаг, E үчүн трансендент (үстлү) тәнлик алынар. Бу тәнлијин E_j көкләри далға вектору k-нын функсијасы олуб, функсијанын ашкар шәкли V_n әмсаллары, јахуд $V(x)$ еффектив потенсиалын ифадәси илә тә'јин олунар:

$$E \to E_j(\kappa) \quad j=1,2,3,\ldots \qquad (44.8)$$

Беләликлә, периодик саһәдәки һәрәкәтин спектри дискрет дәјишән j вә кәсилмәдән дәјишән k-дан асылы олур. j-нын верилмиш гијмәтиндә k-нын кәсилмәдән дәјишмәси нәтичәсиндә енержи сәвијјәләри схеминдә (44.7) тәнлијинин $E_j(k)$ көкүнә онун $E_j^{mn}(k)$ вә $E_j^{max}(k)$ гијмәтләри илә мәһдудлашан бүтөв бир золаг (зона) ујғун кәлир. Мәсәлән, j=1 вә j=2 гијмәтләринә ујғун зоналар шәкил 22-дә көстәрилмишдир. E_1^{max} илә E_2^{mn} арасында $E_j(k)$ гијмәт алмадығындан бу золаг *гадаған олунмуш золаг* (зона) адланыр. Беләликлә, периодик саһәдә һәрәкәт едән зәррәчијин (хүсуси һалда електронун) енержи спектри мүмкүн вә гадаған олунмуш зоналардан ибарәт зонал спектр тәшкил едир.

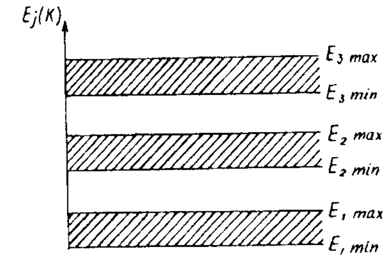
Асанлыгла көстәрмәк олар ки, һәр бир золагда енержи k-нын периоду $\frac{2\pi}{a}$-ја бәрабәр периодик функсијадыр. Доғрудан да, (44.6) системиндә

k-ны $k \pm \frac{2\pi}{a}$ илә әвәз етсәк, систем өз-өзүнә кечир вә онун $E_j(k)$ көкләри дәјишмәз галыр. Башга сөзлә, $E_j(k)$ үчүн

$$E_j\left(k \pm \frac{2\pi}{a}\right) = E_j(k) \qquad (44.9)$$

периодиклик шәрти өдәнилир.

$E_j(k)$ функсијасынын вә еләчә дә она ујғун $\Psi_{jk}(x)$ далға функсијасынын ашкар шәклини тапмаг (44.6) системинә дахил олан тәнликләрин сонсуз сајда олмасы нәтичәсиндә чох чәтиндир. Лакин онун еффектив $V(x)$ потенсиалынын ифадәсиндән асылы олмајан бә'зи хассәләрини ајдынлашдырмаг вә $\Psi_{jk}(x)$ –далға функсијасынын үмуми ифадәсини тапмаг олар.



Шәкил 22. Кристалда һәрәкәт едән електронун золаглы енержи спектри.

$E_j(k)$ көкләринин һәр истәнилән бирини (44.6) системиндә јеринә јазыб, системи һәлл етсәк, бахылан көкә ујғун һәлли тапмыш оларыг. Бу һәллә $C_j(k)$ функсијасындан башга, ондан $\frac{2\pi}{a}$ вуруғунун там мисилләри илә фәргләнән $C_j\left(k \pm \frac{2\pi}{a}\right)$; $C_j\left(k \pm 2\frac{2\pi}{a}\right), \ldots$ функсијалары дахил олар. Мүәјјән көкә ујғун системин һәллини бир функсија шәклиндә јазмаг истәсәк, ону δ-функсија васитәсилә етмәк олар:

$$C_{jk}(k') = C_j(k')\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta\left(k + \frac{2\pi n}{a} - k'\right). \qquad (44.10)$$

Бу, енержинин $E_j(k)$ мәхсуси гијмәтинә (j, k фиксә олунмушдур) ујғун $\hat{H}$ операторунун ((44.3) бәрабәрлијинә бах) импулс тәсвириндә верилмиш мәхсуси функсијасыдыр. Бу функсијанын координат тәсвириндәки ифадәси, (44.3)-ә әсасән,

$$\Psi_{jk}(x) = \int C_{jk}(k')\Psi_{k'}(x)dk' = \int C_{jk}(k')\frac{e^{ik'x}}{\sqrt{2\pi}}dk' \qquad (44.11)$$

олар. (44.10)-у (44.11)-дә јазсаг,

$$\Psi_{jk}(x)=\int C_j(k')\sum_n \delta(k+\frac{2\pi n}{a}-k')\frac{e^{ik'x}}{\sqrt{2\pi}}dk'=$$

$$=\sum_n C_j(k+\frac{2\pi}{a}n)\frac{e^{i(k+\frac{2\pi}{a}n)x}}{\sqrt{2\pi}} \qquad (44.12)$$

алынар. Бу ифадәдә n-дән асылы олмајан e^{ikx} вуруғуну чәмдән кәнара чыхарсаг,

$$\Psi_{jk}(x)=e^{ikx}\sum_n C_j(k+\frac{2\pi}{a}n)\frac{e^{i\frac{2\pi n}{a}x}}{\sqrt{2\pi}}=u_{jk}(x)e^{ikx} \qquad (44.13)$$

олар. $u_{jk}(x)=u_{jk}(x+a)$ шәртини өдәјән вә периоду a-ја бәрабәр олан периодик функсијадыр.

Демәли, (44.13) илә верилмиш $\Psi_{jk}(x)$ функсијасы $E_j(k)$ енержи зонасында k далға әдәдинин мүәјјән гијмәтинә ујғун мәхсуси функсијадыр. О, потенсиал енержинин периодуна модуллашдырылмыш мүстәви далға олуб, *Блок функсијасы* адланыр. Онун үчүн

$$\Psi_{j,k+\frac{2\pi}{a}}(x)=\Psi_{jk}(x) \qquad (44.14)$$

периодиклик шәрти өдәнилир.

(44.14) шәртиндән чыхыр ки, k далға векторунун дәјишмә интервалыны $(-\pi/a,\ \pi/a)$ интервалы илә мәһдудлашдырмаг олар. Доғрудан да, k-нын дәјишмә областыны узунлуғу $\frac{2\pi}{a}$ олан парчалара бөлүб, системин (44.3) үмуми функсијасыны

$$\Psi(x)=\sum_{jk}C_{jk}\Psi_{jk}(x)=\sum_j\sum_n\sum_{k=\frac{\pi}{a}(m-1)}^{\frac{\pi}{a}(m+1)}C_j(k)\Psi_{jk}(x)$$

кими сыра шәклиндә көстәрдикдән сонра k-ны $k+\frac{2\pi}{a}n$ илә әвәз етсәк, $\Psi(x)$ функсијасы

$$\Psi(x)=\sum_j\sum_{k=-\pi/a}^{k=\pi/a}b_{jk}\Psi_{jk}(x)$$

шәклиндә дүшәр, бурада

$$b_{jk}=\sum_{n=-\infty}^{n=\infty}C_j(k+\frac{2\pi n}{a}).$$

Беләликлә, енержинин мәхсуси $E_j(k)$ гијмәти вә ујғун $\Psi_{jk}(x)$ мәхсуси функсијасы $-\pi/a \le k \le \pi/a$ интервалында гијмәт алыр. k-нын белә интервалларда алдығы гијмәтләр чохлуғуна Бриллујен зоналары дејилир (енержи зоналары илә гарышдырмамалы).

Инди дә $E_j(k)$ функсијасынын бә'зи хассәләри илә таныш олаг. $E_j(k)$ -нын (44.9) периодиклик шәртиндән, ону Фурје сырасына ајырмаг олар:

$$E_j(k)=\sum_m E_{jm}\cos(mak). \qquad (44.15)$$

Садәлик хатиринә (44.15) сырасында биринчи ики һәдлә кифајәтләнәк:

$$E_j(k)=E_{j0}+E_{j1}\cos ak. \qquad (44.16)$$

а) Фәрз едәк ки, k далға әдәди Бриллујен зонасынын орталарына јахын ($k\to 0$ нөгтәси әтрафында) гијмәт алыр. Онда $\cos ak$ сырасынын биринчи ики һәдди илә кифајәтләнсәк,

$$E_j(k)=E_{j0}+E_{j1}(1-\frac{a^2k^2}{2})=$$
$$=E_{j0}+E_{j1}-\frac{E_{j1}a^2}{2}k^2=\text{const}+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu_1}. \qquad (44.17)$$

Бурада

$$\mu_1=-\frac{\hbar^2}{E_{j1}a^2} \qquad (44.18)$$

кәмијјәти күтлә өлчүсүнә маликдир вә о, **еффектив күтлә** адланыр.

б) Инди дә k далға әдәдинин Бриллүјен зонасынын кәнарында, мәсәлән, $k=\pi/a$ нөгтәси әтрафында гијмәт алдығыны фәрз едәк: $k=\frac{\pi}{a}-\xi$.

Онда

$$E_j(k)=E_{j0}+E_{j1}\cos(\pi-a\xi)=E_{j0}-E_{j1}+\frac{E_{j1}a^2}{2}\xi^2$$

јахуд

$$E_j(k)=\text{const}+\frac{\hbar^2\xi^2}{2\mu_2}. \qquad (44.19)$$

Бурада зонанын кәнарындакы μ_2 еффектив күтлә

$$\mu_2 = \frac{\hbar^2}{E_\Lambda a^2} = -\mu_1 \qquad (44.20)$$

гијмәтчә зонанын ортасындакы μ_1 еффектив күтләсинә бәрабәр олуб, ишарәчә ондан фәргләнир.

(44.17) вә (44.19)-дан чыхыр ки, k-нын кичик гијмәтләриндә зәррәчијин енержисинин k-дан асылылығы сәрбәст һәрәкәтдә олдуғу кимидир. Лакин, бурада зәррәчијин күтләси әвәзиндә онун зонадакы еффектив күтләси дурур. Дикәр тәрәфдән јүклү зәррәчијин електрик вә магнит саһәләриндәки һәрәкәтинин характери $\frac{e}{m}$ нисбәти илә тә'јин олунур. Демәли периодик електрик саһәсиндә енержиси зонанын орталарында гијмәт алан електронун һәрәкәти, енержиси зонанын кәнарында гијмәт алан електронун һәрәкәтинин әксинә јөнәлмиш олур, јә'ни о, јүкү мүсбәт олан зәррәчик (дешик) кими һәрәкәт едир. Бунунла да квант механикасында метал вә јарымкечиричиләрдә електрон вә дешик кечиричилијинин мөвчуд олдуғу факты изаһ едилир.

§ 45. ЈҮКЛҮ ЗӘРРӘЧИЈИН БИРЧИНС ЕЛЕКТРИК САҺӘСИНДӘ ҺӘРӘКӘТИ

Јүклү зәррәчик интенсивлији $\vec{\mathcal{E}}$ олан бирчинс електрик саһәсиндә һәрәкәт едирсә, онун потенсиал енержиси $V = -\vec{d}\,\vec{\mathcal{E}}$ -јә бәрабәр олар. Бурада $\vec{d} = -e\vec{r}$ зәррәчијин електрик моментидир. $\vec{\mathcal{E}}$-нын x бојунча јөнәлдијини фәрз етсәк

$$V(x) = e\vec{\mathcal{E}}x = Fx. \qquad (45.1)$$

Зәррәчијин бурадакы стасионар һаллары үчүн Шрединкер тәнлији

$$-\frac{h^2}{2\mu}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + e\vec{\mathcal{E}}x\Psi = E\Psi \qquad (45.2)$$

олар. Бу саһәдә e јүкүнә малик зәррәчијә тә'сир едән гүввә $\vec{F} = e\vec{\mathcal{E}}$. Она ујғун $V=Fx$ потенсиал енержи $x\to\infty$-да $V(x)\to\infty$, $x\to-\infty$ јахынлашанда исә $V(x)\to-\infty$ јахынлашыр. Башга сөзлә, зәррәчик $(-\infty,\infty)$ областында сәрбәст һәрәкәт едир, јә'ни електрик саһәси зәррәчијин һәрәкәт областыны мәһдудлашдырмыр, онун енержи вә мәхсуси функсијалар чохлуғу кәсилмәз спектр тәшкил едир.

(45.2) тәнлијини һәлл етмәк үчүн x-координат тәсвириндән $\vec{p}$ импулс тәсвиринә кечәк. $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ импулс операторунун

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

мәхсуси функсијаларын $\{\Psi_p(x)\}$ чохлуғу там систем тәшкил етдијиндән, системин үмуми $\Psi(x)$ функсијасыны $\Psi_p(x)$ функсијаларынын суперпозисијасы кими көстәрмәк олар:

$$\Psi(x) = \int C(p)\Psi_p(x)dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int C(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp \qquad (45.3)$$

вә бурадан импулс тәсвириндәки мәхсуси функсија

$$C(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int \Psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\,.$$

Бу ифадәдән p-јә көрә төрәмә алыб

$$i\hbar\frac{\partial C(p)}{\partial p} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int x\Psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx\,,$$

алынан бу ифадәдә јенидән x-тәсвиринә кечсәк,

$$x\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int i\hbar\frac{\partial C(p)}{\partial p}e^{\frac{i}{\hbar}px}dp \qquad (45.4)$$

алынар. Сонра

$$-\hbar^2\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int p^2C(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp \qquad (45.5)$$

төрәмәсини һесаблајыб, (45.4) вә (45.5) ифадәләрини (45.2)-дә јазанда

$$\int\left(\frac{p^2}{2\mu}C(p) + i\hbar e\mathcal{E}\frac{dC(p)}{dp}\right)\frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}dp = E\int C(p)\frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}dp$$

алыныр. Ахырынчы бәрабәрлији сол тәрәфдән $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}$ функсијасына вуруб, x-ин бүтүн дәјишмә областы үзрә интегралланандан сонра алынан ифадәдә ортаја чыхан

$$\delta(p'-p)=\frac{1}{2\pi}\int e^{i(p'-p)x}dx$$

делта функсијанын көмәји илә p-јә көрә интеграл алсаг,

$$\frac{p^2}{2\mu}C(p)+i e\hbar\mathcal{E}\frac{dC(p)}{dp}=EC(p) \qquad (45.6)$$

тәнлији алынар. Бу биринчи тәртиб тәнлијин һәлли

$$C(p)=Ae^{i\frac{p^3}{6\mu\hbar e\mathcal{E}}-i\frac{E}{\hbar e\mathcal{E}}p} \qquad (45.7)$$

олур. Буну (45.3)-дә јазыб

$$p=(2\mu\hbar e\mathcal{E})^{1/3}z \quad \text{вә} \quad \xi=\left(\frac{2\mu e\mathcal{E}}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x-\frac{E}{e\mathcal{E}}\right) \qquad (45.8)$$

әвәзләрини гәбул едәк. Онда

$$\Psi_E(\xi)=\frac{A}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(\xi z+\frac{z^3}{3})}dz=\frac{A}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\cos\left(\xi z+\frac{z^3}{3}\right)dz. \qquad (45.9)$$

Ахырынҹы ифадәдә cos x-ин ҹүт, sin x-ин исә тәк функсија олдуғу нәзәрә алынмышдыр. (45.6) тәнлијинин һәлли олан (45.9) функсијасы x-ин бүтүн $(-\infty,\infty)$ дәјишмә областында сонлудур. Дикәр тәрәфдән, зәррәҹијин E енержисинин истәнилән гијмәтиндә $\Psi(x)$-ин үзәринә гојулан үч стандарт шәрт өдәнилдијиндән, бепә зәррәҹијин енержи спектри кәсилмәз олур.

$$\Psi_E(\xi)=A\Phi(\xi), \quad \Phi(\xi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\cos\left(\xi z+\frac{z^3}{3}\right)dz \qquad (45.10)$$

функсијасы ријази физикада *Ејри функсијасы* адланыр.

Билдијимиз кими, бүтөв спектрин далға функсијалары $\delta(E-E')$ функсијаја нормаланыр:

$$\int\Psi^*_{E'}(\xi)\Psi_E(\xi)dx=\delta(E-E')$$

вә ја

$$A^2\int_0^{\infty}\cos\left(\xi' z+\frac{z^3}{3}\right)\cos\left(\xi z+\frac{z^3}{3}\right)dx=\delta(E-E').$$

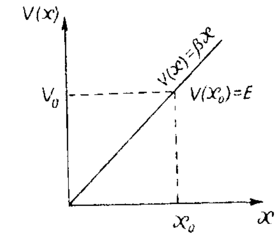
Ахырынҹы интегралын садә јолла һесабланмасы Ландау вә Лифшитсин, "Квантоваја механика", курсунда верилмишдир*, A нормалајыҹы вуруг үчүн

* Бах [4], сәһ. 100

$$A=\frac{(2\mu)^{1/3}}{\pi^{1/2}(e\mathcal{E})^{1/6}\hbar^{2/3}} \qquad (45.11)$$

гијмәти алыныр.

Зәррәҹијин харичи бирҹинс електрик саһәсиндә һәрәкәтинин стасионар һалларыны тәсвир едән (45.9) һәлли $x=x_0=\frac{E}{e\mathcal{E}}$ нөгтәсиндән сол вә сағда јерләшмиш областларда (шәкил 23) өзүнү мүхтәлиф ҹүр апарыр. $x>x_0$ областында зәррәҹијин E енержиси тә'сир едән $F=e\mathcal{E}$ гүввәнин потенсиал енержисиндән кичик олдуғундан, класик физика ганунларына көрә зәррәчик һәмин области кечә билмир вә кери гајыдыр. Квант механикасына көрә исә зәррәҹијин бу областда олма еһтималы сыфырдан фәрглидир. (45.9)-дан көрүндүјү кими $\Psi_E(\xi)$ нәинки $\xi>0$-да, һәтта $\xi>>1$-дә сыфырдан фәргли гијмәт алыр вә $\xi\to\infty$ јахынлашанда о, експоненсиал олараг сыфра јахынлашыр. Доғрудан да, ξ-нин $\xi>>1$ кими кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә $\Psi_E(\xi)$ -нин асимптотик ифадәси



Шәкил 23

$$\Psi_E(\xi)=\frac{A}{2\xi^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \qquad (45.12)$$

вә $\xi\to\infty$ -да $\Psi_E(\xi)\to 0$ олур.

$x<x_0$-да зәррәҹијин E енержиси потенсиал енержидән бөјүк олур, ξ-нин $\xi<<-1$ кими кифајәт гәдәр бөјүк мәнфи гијмәтләриндә $\Psi_E(\xi)$ -нин асимптотик ифадәси*

$$\Psi_E(\xi)=\frac{A}{|\xi|^{1/4}}\sin\left[\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}+\frac{\pi}{4}\right] \qquad (45.13)$$

вә о, $(-\infty, x_0)$ областында сонлу галыр.

(45.2) тәнлији икинҹи тәртиб диференсиал тәнлик олдуғундан онун ики хәтти асылы олмајан һәлли олмалыдыр. $\xi>>1$ вә $\xi<<-1$-дә онун икинҹи һәллинин асимптотик ифадәләри

* Бах [4], сәһ. 736

$$\Psi_E(\xi) \approx \begin{cases} \dfrac{B}{\xi^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \\ \dfrac{B}{|\xi|^{1/4}} \cos\left[\dfrac{2}{3}|\xi|^{3/2} + \dfrac{\pi}{4}\right] \end{cases} \tag{45.14}$$

олур. Биринчи һәлл $\xi \to \infty$-да експоненсиал олараг сонсузлуға јахынлашыр, икинчи һәлл исә ξ-нин бүтүн дәјишмә областында сонлу галыр.

VI ФӘСИЛ

ҺӘЈӘЧАНЛАНМА НӘЗӘРИЈЈӘСИ ВӘ ОНУН БӘ'ЗИ ТӘТБИГЛӘРИ

§ 46. СТАСИОНАР ҺӘЈӘЧАНЛАНМА НӘЗӘРИЈЈӘСИ

Квант механикасында јалныз бә'зи садә мәсәләләр (бах: IV вә V фәсил) үчүн Шрединкер тәнлији дәгиг һәлл олуна билир. Әксәр мәсәләләрә ујғун тәнлији һәлл етмәк үчүн исә тәгриби методлардан истифадә олунур. Белә методлардан ән чох истифадә олунаны вә ән еффективлиси һәјәчанланма нәзәријјәси адланыр.

Квант механики системин $\hat{H}$ Һамилтон операторунун ифадәсинә гијмәтчә тәртибләри мүхтәлиф олан кәмијјәтләр дахил олур. Адәтән харичи тә'сирин вә ја системин мүхтәлиф һиссәләри арасындакы гаршылыглы тә'сирин интенсивлијини тә'јин едән нисбәтән кичик тәртибли кәмијјәтләр атыландан сонра алынан $\hat{H}_o$ Һамилтон операторуна ујғун Шрединкер тәнлији дәгиг һәлл олунурса, јә'ни үмуми мәсәләнин $\hat{H}$ Һамилтон оператору садә мәсәләнин $\hat{H}_o$ Һамилтон оператору илә садә системә көстәрилән тә'сирә ујғун $\hat{V}$ операторунун

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V} \tag{46.1}$$

чәми шәклиндә көстәрилә биләрсә, белә мәсәләләрин һәлли үчүн һәјәчанланма нәзәријјәси тәтбиг олуна биләр. (46.1)-дә $\hat{H}_o$ һәјәчанланмамыш системин Һамилтон оператору, $\hat{V}$ исә һәјәчанланма вә ја гаршылыглы тә'сир оператору адланыр. Јухарыдакы шәртдән чыхыр ки, бир тәрәфдән $\hat{V}$-нин $\hat{H}_o$-а вердији әлавә $\hat{H}_o$-а ујғун һәддән хејли кичик олмалы, дикәр тәрәфдән исә

$$\hat{H}_o\Psi^o = E^o\Psi^o. \tag{46.2}$$

$\hat{H}_o$ операторунун мәхсуси функсијалар вә мәхсуси гијмәтләр спектрләри мә'лум олмалыдыр. Онда һәјәчанланма нәзәријјәси васитәсилә $\hat{H}$ операторунун мәхсуси функсијаларыны вә мәхсуси гијмәтләрини тәгриби һесабламаг олур. $\hat{H}$ оператору ашкар шәкилдә замандан асылы дејилсә, һәјәчанланма назәријјәси *Шрединкер стасионар һәјәчанланма нәзәријјәси*, замандан асылы олдугда исә *Дирак гејри-стасионар һәјәчанланма нәзәријјәси* адланыр.

а) Стасионар һаллар чырлашмамыш олдугда

Стасионар һаллар үчүн Шрединкер тәнлији

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{46.3}$$

вә ја (46.1)-ә әсасән

$$(\hat{H}_o + \hat{V})\Psi = E\Psi \tag{46.3'}$$

шәклиндә јазылыр (бах §18).

Үмумилији позмадан $\hat{H}_o$ операторунун дискрет спектрә малик олдуғу һал үчүн һәјәчанланма нәзәријјәсинә бахаг. $\hat{H}_o$-ын кәсилмәз спектрә малик олдуғу һалы нәзәрә алмаг үчүн дискрет спектр үзрә көтүрүлмүш чәмләрә кәсилмәз спектр үзрә көтүрүлмүш интеграллары әлавә етмәк лазымдыр.

$\hat{H}_o$ операторунун мәхсуси гијмәтләринә ујғун һаллар чырланмамыш олдугда һәјәчанланмамыш системин E^o енержисинин һәр бир E_n^o мәхсуси гијмәтинә јеканә бир Ψ_n^o далға функсијасы ујғун кәлир. Квант механики системин ихтијари функсијасыны истәнилән операторун там мәхсуси функсијалар системи үзрә көтүрүлмүш суперпозисијасы шәклиндә көстәрмәк мүмкүн олдуғундан (46.3) тәнлијинин һәллини $\hat{H}_o$-ын $\{\Psi_n^o\}$ мәхсуси функсијасынын сырасы шәклиндә ахтараг:

$$\Psi = \sum_m C_m \Psi_m^o. \tag{46.4}$$

Бурада C_m-ләр координат вә замандан асылы олмајан сабит әмсаллардыр. (46.4)-ү (46.3)-дә јеринә јазанда

$$\sum_m (\hat{H}_o + \hat{V}) C_m \Psi_m^o = E \sum_m C_m \Psi_m^o.$$

Бу бәрабәрлији солдан Ψ_k^{o*} -ја вуруб, бүтүн фәза үзрә интегралламаг. Онда (46.2)-дән

$$\breve{H}_o\Psi_m^o = E_m^o\Psi_m^o \text{ вә } \int \Psi_k^{o*}\Psi_m^o(d\vec{r}) = \delta_{km}$$

олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\sum_m (E_m^o - E)C_m\delta_{mk} + \sum_m V_{km}C_m = 0 \qquad (46.5)$$

алынар, бурада $V_{km} = \langle k|\breve{V}|m\rangle = \int \Psi_k^{o*}\breve{V}\Psi_m^o(d\vec{r})$ һәјәчанланма операторунун матриса елементидир.

(46.5) бирчинс чәбри тәнликләр системи енержи тәсвириндә јазылмыш дәгиг (46.3) тәнлијидир. Онун сыфырдан фәргли һәлләринин олмасы үчүн C_m-ләрин әмсалларындан дүзәлдилмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр. Бу бәрабәрликдән E үчүн трансендент тәнлик алыныр. Онун көкләри H операторунун $\{E_n\}$ мәхсуси гијмәтләр чохлуғу олур. Бу чохлуг мә'лум олдугда (46.5) системиндән C_m әмсалларыны тапмаг олар. Лакин (46.5) сонсуз тәнликләр системи олдуғундан E үчүн алынмыш тәнлијин көкләрини тапмаг үмумијјәтлә ријази олараг гејри-мүмкүндүр. Буна көрә дә (46.5) системини һәлл етмәк үчүн тәгриби методлардан истифадә едилир.

(46.5) системини һәјәчанланма нәзәријјәси васитәсилә һәлл етмәк үчүн бахылан мәсәләдә кичик параметр (кичик кәмијјәт) олмалыдыр. Белә параметр, адәтән гаршылыглы тә'сири характеризә едән $\breve{V}$ операторуна дахил олур. Мә'лумдур ки, електромагнит гаршылыглы тә'сирләрдә белә параметр инчә гурулуш сабити адланан $\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c} \approx \dfrac{1}{137}$, зәиф гаршылыглы тә'сирләрдә белә сабит 10^{-6}, күчлү гаршылыглы тә'сирләрдә исә алчаг енержи областында $g{\sim}10{\div}20$ тәртибиндәдир. Лакин сон илләрин тәдгигатлары көстәрир ки, јүксәк енержи областында күчлү гаршылыглы тә'сири сәчијјәләндирән параметр енержидән асылыдыр. Енержи артдыгча о, кичилир вә енержинин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә сыфра јахынлашыр (асимптотик сәрбәстлик).

Кәләчәкдә истифадә олунačаг мүһүм бир теоремин тә'рифинә кәлмәк үчүн (46.3′) вә (46.5) тәнликләрини паралел һәлл едәк. Гаршылыглы тә'сир оператору $\breve{V}$-нин кичик параметрлә мүтәнасиб олдуғуну гәбул едиб, (46.3′) вә (46.5) тәнликләриндә Ψ-ни, C_m-и вә E-ни һәмин параметрин үстлү сырасы шәклиндә ахтараг:

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi^o + \Psi^{(1)} + \Psi^{(2)} + \ldots \\ C_m &= C_m^o + C_m^{(1)} + C_m^{(2)} + \ldots \\ E &= E^o + E^{(1)} + E^{(2)} + \ldots \end{aligned} \qquad (46.6)$$

Ψ, C_m вә E-нин јухарыдакы ифадәләрини (46.3′) вә (46.5)-дә јазыб, (46.5) тәнлијинин биринчи һәддиндәки m үзрә чәми δ_{mk} үзрә көтүрдүкдә, тәнликләр ујғун олараг

$$(E^o + E^{(1)} + E^{(2)} + \ldots - \breve{H}_o - \breve{V})(\Psi^o + \Psi^{(1)} + \Psi^{(2)} + \ldots) = 0 \quad (46.7)$$

$$(E_n^o - E^o - E^{(1)} - E^{(2)} - \ldots)(C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \ldots) + $$
$$+ \sum_m V_{km}(C_m^o + C_m^{(1)} + C_m^{(2)} + \ldots) = 0$$

шәклини алыр. Бурада $\Psi^o, E^o, C_m^{(o)}$ кичик параметрә көрә сыфырынчы $\Psi^{(1)}, E^{(1)}, C_m^{(1)}$ –биринчи, $\Psi^{(2)}, E^{(2)}, C_m^{(2)}$ – икинчи вә и.а. тәртиб кәмијјәтләрдир.

(46.7) бәрабәрликләринә дахил олан сыралар үстлү сыралардыр. Бәрабәрликләр о вахт өдәниләр ки, ејни тәртибли һәдләрин чәми сыфра бәрабәр олсун. Онда

$$\begin{aligned} &(E^o - \breve{H}_o)\Psi^o = 0 \\ &(E^o - \breve{H}_o)\Psi^{(1)} + (E^{(1)} - V)\Psi^o = 0 \\ &(E^o - \breve{H}_o)\Psi^{(2)} + (E^{(1)} - V)\Psi^{(1)} + E^{(2)}\Psi^o = 0 \\ &\text{- -} \\ &\text{- -} \end{aligned} \qquad (46.8)$$

вә

$$\begin{aligned} &(E_k^o - E^o)C_k^o = 0 \\ &(E_k^o - E^o)C_k^{(1)} - E^{(1)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^o = 0 \\ &(E_k^o - E^o)C_k^{(2)} - E^{(1)}C_k^{(1)} - E^{(2)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^{(1)} = 0 \\ &\text{- -} \\ &\text{- -} \end{aligned} \qquad (46.9)$$

кими чәбри тәнликләр системи алыныр.

Квант механики системин һәр һансы ихтијари n-чи һалын $E = E_n^o$ енержисинә вә Ψ_n^o далға функсијасына $\breve{V}$ — һәјәчанланманын вердији мүхтәлиф тәртибли әлавәләри һесаблајаг.

Сыфырынчы јахынлашмада (46.8) вә (46.9)-дан

$$\begin{aligned} &(E_n^o - \breve{H}_o)\Psi_n^o = 0 \\ &(E_k^o - E_n^o)C_k^o = 0 \end{aligned} \qquad (46.10)$$

олар. Үмумијјәтлә k чари индекси n-ә бәрабәр вә ја да ондан фәргли ола биләр. $k=n$-дирсә, $E_k^o - E_n^o = 0$, $C_k^o = C_n^o \neq 0$; $k \neq n$-дирсә, $E_k^o - E_n^o \neq 0$, $C_k^o = 0$ олар. Демәли, һәјәчанланма олмадыгда системин Ψ_n^o һалында олдуғуну гәбул етсәк. (46.10)-да биринчи тәнлијин һәлли Ψ_n^o-ын аналитик ифадәсинин танылмасына, икинчи тәнликдә исә $E_k^o = E_n^o$, $C_k^o = C_n^o = 1$ котирир. Бу ики шәртдән $C_k^o = \delta_{kn}$ олур.

Системин далға функсијасына вә енержисинә биринчи тәртиб дүзәлишләри тапаг. Бу әлавәләр (46.8) вә (46.9) системләринин икинчи тәнликләриндән һесабланыр:

$$
\begin{aligned}
&(E_n^o - \hat{H}_o)\Psi_n^{(1)} = -(E_n^{(1)} - V)\Psi_n^o \\
&(E_k^o - E_n^o)C_k^{(1)} - E_n^{(1)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^o = 0
\end{aligned}
\tag{46.11}
$$

Икинчи тәнликдә $n=k$ көтүрәк

$$-E_n^{(1)} + \sum_m V_{nm}\delta_{nm} = 0$$

вә ја

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \Psi_n^{o*} V \Psi_n^o (d\vec{r}) \tag{46.12}$$

алыныр, јә'ни һәјәчанланмамыш стасионар һалын E_n^o енержисинә биринчи тәртиб дүзәлиш $E_n^{(1)}$, һәјәчанланма операторунун Ψ_n^o һәјәчанланмамыш һалын далға функсијалары илә тә'јин олунан орта гијмәтинә бәрабәрдир:

$$E_n = E_n^o + E_n^{(1)} = E_n^o + V_{nn}. \tag{46.13}$$

(46.11)-дәки биринчи тәнлијин көмәји илә дә ејни нәтичә алыныр. Билдијимиз кими, системин истәнилән функсијасыны ихтијари операторун ортонормаланмыш там функсијалар системинин сырасы шәклиндә көстәрмәк олар:

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_m C_m \Psi_m^o.$$

Буну (46.11)-ин биринчи тәнлијиндә $\Psi_n^{(1)}$-ин јеринә јазсаг,

$$\sum_m C_m (E_n^o - \hat{H}_o)\Psi_m^o = -(E_n^{(1)} - V)\Psi_n^o. \tag{46.14}$$

(46.14)-дә

$$\hat{H}_o \Psi_m^o = E_m^o \Psi_m^o \tag{46.15}$$

тәнлијини вә Ψ_n^o функсијалары үчүн нормаланма шәртини нәзәрә алан-дан сонра ону солдан Ψ_n^{o*}-ә вуруб, бүтүн фәза үзрә интегралладыгда

$$\sum_m C_m (E_n^o - E_m^o)\delta_{nm} = \int \Psi_n^{o*}(V - E_n^{(1)})\Psi_n^o (d\vec{r}) \tag{46.16}$$

алыныр. Бу тәнлијин сол тәрәфиндә дуран m үзрә чәм δ_{nm} символу васитәсилә көтүрүлдүкдә о, ејнилик кими сыфра бәрабәр олур вә $E_n^{(1)}$ әлавәси үчүн (46.12) ифадәси үзәринә дүшән гијмәт алыныр.

Дикәр тәрәфдән (46.11)-дә биринчи тәнлик $\Psi_n^{(1)}$ функсијасына көрә гејри-бирчинс тәнликдир. Ону солдан (44.15) бирчинс тәнлијин һәлли олан Ψ_n^o функсијасына вуруб интегралладыгда

$$\int \Psi_n^o (E_n^o - \hat{H}_o)\Psi_n^{(1)}(d\vec{r}) = \int \Psi_n^{o*}(V - E_n^{(1)})\Psi_n^o (d\vec{r}) \tag{46.17}$$

алынар. (46.16) вә (46.17) тәнликләринин сол тәрәфләри бир-биринә бәрабәр вә ејнилик кими сыфра бәрабәр олдуғундан, Ψ_n^o-ин (46.11)-дә биринчи гејри-бирчинс тәнлијин сағ тәрәфи илә скалјар һасили дә сыфра бәрабәр олур:

$$(\Psi_n^o, (V - E_n^{(1)})\Psi_n^o) = \int \Psi_n^{o*}(V - E_n^{(1)})\Psi_n^o (d\vec{r}) = 0. \tag{46.18}$$

Бу, белә бир теорем шәклиндә ифадә олунур.

Теорем: Гејри-бирчинс тәнлијин сағ тәрәфи ујғун бирчинс тәнлијин һәлли илә ортогоналдыр.

$n \neq k$ олдугда (46.11)-ин икинчи тәнлији

$$(E_k^o - E_n^o)C_k^{(1)} + \sum_m V_{km}\delta_{mn} = 0$$

вә ја

$$C_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^o - E_k^o} \tag{46.19}$$

олур.

Икинчи тәртиб дүзәлишләри һесабламаг үчүн (46.9) системинин үчүнчү тәнлијиндән истифадә едәк:

$$(E_k^o - E_n^o)C_k^{(2)} - E_n^{(1)}C_k^{(1)} - E_n^{(2)}C_k^o + \sum_m V_{km}C_m^{(1)} = 0. \tag{46.20}$$

Бурада $k=n$ көтүрдүкдә (46.19)-а әсасән

$$-E_n^{(1)}C_n^{(1)} - E_n^{(2)} + \sum_m \frac{V_{nm}V_{mn}}{E_n^o - E_m^o} = 0. \qquad (46.21)$$

$C_n^{(1)}$ әмсалы (46.19) илә тә'јин олуна билмир, чүнки бу һалда онун мәхрәчи сыфра бәрабәр олур: $E_n^o - E_n^o = 0$. Ону тә'јин етмәк үчүн $\int \Psi^* \Psi d\vec{r} = 1$ вә ја

$$\sum_k C_k^* C_k = 1$$

нормаланма шәртиндән истифадә едәк. Бурада C_k -лары (46.6)-дан онун сырасы илә әвәз едиб, $C_k^o = \delta_{kn}$ олдуғуну нәзәрә алараг, биринчи вә икинчи тәртиб һәдләрлә кифајәтләндикдә

$$C_n^{*(1)} + C_n^{(1)} + C_n^{*(2)} + C_n^{(2)} + \sum_k C_k^{*(1)} C_k^{(1)} = 0$$

алыныр. Ујғун тәртибли һәдләрин чәмини сыфыр көтүрсәк,

$$C_n^{*(1)} + C_n^{(1)} = 0 \quad C_n^{*(2)} + C_n^{(2)} + \sum_k C_k^{*(1)} C_k^{(1)} = 0$$

вә бурадан

$$C_n^{(1)} = 0 \quad C_n^{(2)} = -\frac{1}{2}\sum_k C_k^{*(1)} C_k^{(1)} = -\frac{1}{2}\sum_k \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^o - E_k^o)^2}$$

олар. Бунлары (46.21)-дә нәзәрә алдыгда

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk}V_{kn}}{E_n^o - E_k^o}. \qquad (46.22)$$

Инди дә (46.20) тәнлијиндә $n \neq k$ көтүрәк, онда

$$C_k^{(2)} = -\frac{V_{nn}V_{kn}}{(E_n^o - E_k^o)^2} + \sum_{m \neq k,n} \frac{V_{km}V_{mn}}{(E_n^o - E_k^o)(E_n^o - E_m^o)} \qquad (46.23)$$

олар.

(46.22) бәрабәрлијиндән көрүнүр ки, системин әсас (ән кичик енержили) һалына икинчи тәртиб дүзәлиш һәмишә мәнфидир.

Беләликлә, икинчи тәртибә гәдәр кичик һәдләри нәзәрә алмаг дәгиглији илә системин енержиси

$$E_n = E_n^o + V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|V_{kn}|^2}{E_n^o - E_k^o} \qquad (46.24)$$

вә системин һәјәчанланмыш һалынын далға функсијасы

$$\Psi = \sum_k C_k \Psi_k^o = \sum_k (C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)})\Psi_k^o$$

олар. Бурада k индексинин n-ә бәрабәр ола биләчәјини нәзәрә алдыгда

$$\Psi = C_n^o \Psi_n^o + C_n^{(1)}\Psi_n^o + C_n^{(2)}\Psi_n^o + \ldots + \sum_{k \neq n}(C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \ldots)\Psi_k^o$$

кими јазылыр. Бурада $C_k^o = \delta_{nk}$, $C_n^{(1)} = 0$ вә $C_n^{(2)}$-нин (46.22) илә вердијини нәзәрә алсаг,

$$\Psi = \Psi_n^o - \frac{\Psi_n^o}{2}\sum_k \frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^o - E_k^o)^2} + \sum_k \frac{V_{kn}}{E_n^o - E_k^o}\Psi_k^o - \sum_k \frac{V_{nn}V_{kn}}{(E_n^o - E_k^o)^2}\Psi_k^o + \sum_{k,m} \frac{V_{km}V_{mn}}{(E_n^o - E_k^o)(E_n^o - E_m^o)}\Psi_k^o. \qquad (46.25)$$

Һәјәчанланма нәзәријјәси методунун тәтбиги о вахт еффектли олар ки, ардычыл јахынлашма јолу илә алынмыш (46.24) вә (46.25) сыралары јығылсын, јә'ни сыранын һәр сонракы һәдди әввәлки һәддиндән кичик галсын. Бунун үчүн, јәгин ки,

$$\left|\frac{V_{nk}}{E_n^o - E_k^o}\right| \ll 1 \quad \text{вә ја} \quad |V_{kn}| \ll |E_n^o - E_k^o| \qquad (46.26)$$

шәрти өдәнмәлидир. Демәли, һәјәчанланма нәзәријјәси, јалныз, һәјәчанланма операторунун матриса елементи ујғун һәјәчанланмамыш сәвијјәләр арасындакы мәсафәдән кифајәт гәдәр кичик галдыгда тәтбиг олуна биләр.

б) Стасионар һаллар чырлашмыш олдугда.

Инди дә $\hat{H}_o$ операторунун E_k^o мәхсуси гијмәтләринә ујғун һалларын чырлашмыш олдуғуну гәбул едәк. Фәрз едәк ки, һәјәчанланмамыш системин һәр һансы E_k^o сәвијјәси f тәртибдә чырлашмышдыр, јә'ни ејни бир E_k^o мәхсуси гијмәтинә $\Psi_{k1}^o, \Psi_{k2}^o, \ldots, \Psi_{kf}^o$ кими гаршылыглы ортогонал f мүхтәлиф далға функсијасы ујғундур. Бу заман сыфырынчы јахынлашманын далға функсијасы E_k^o-а аид $\Psi_{k\beta}^o$ далға функсијаларынын суперпозисијасы шәклиндә ахтарылыр:

$$\Psi_k^o = \sum_{\alpha=1}^{f} C_{k\alpha}\Psi_{k\alpha}^o . \qquad (46.27)$$

Һәјәчанланмыш һалын Ψ_k далға функсијасыны вә E_k енержисини

$$\Psi_k = \Psi_k^o + \Psi_k^{(1)} + \Psi_k^{(2)} + \ldots$$
$$E_k = E_k^o + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \ldots$$

сыралары шәклиндә ахтараг. Бу сыраларда һәр бир һәдд әввәлкиндән бир тәртиб кичик кәмијјәтдир. Бунлары (46.3) тәнлијиндә јеринә јазыб,

$$(\breve{H}_o + V)(\Psi_k^o + \Psi_k^{(1)} + \Psi_k^{(2)} + \ldots) =$$
$$= (E_k^o + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} + \ldots)(\Psi_k^o + \Psi_k^{(1)} + \Psi_k^{(2)} + \ldots)$$

ики вә даһа јүксәк тәртибли һәдләри нәзәрә алмасаг,

$$(\breve{H}_o - E_k^o)\Psi_k^{(1)} = (E_k^{(1)} - V)\Psi_k^o$$

аларыг. Бу тәнлији $\Psi_{k\alpha}^{*o}$-а вуруб бүтүн фәза үзрә интегралладыгда:

$$\int \Psi_{k\alpha}^{o*} H_o \Psi_k^{(1)}(d\vec{r}) - E_k^o \int \Psi_{k\alpha}^{o*}\Psi_k^{(1)}(d\vec{r}) = E_k^{(1)}\int \Psi_{k\alpha}^{o*}\Psi_k^o(d\vec{r}) - \int \Psi_{k\alpha}^{o*} V \Psi_k^o(d\vec{r}) . \qquad (46.28)$$

$\breve{H}_o$ оператору ермит олдуғундан

$$\int \Psi_{k\alpha}^{o*}\breve{H}_o\Psi_k^{(1)}(dr) = \int \Psi_k^{*(1)}\breve{H}_o\Psi_{k\alpha}^o(dr) = E_k^o\int \Psi_k^{(1)}\Psi_{k\alpha}^o(dr)$$

вә (46.28) тәнлијинин сол тәрәфи сыфра бәрабәр олур. Онда (46.28) тәнлији

$$E_k^{(1)}\int \Psi_{k\alpha}^{o*}\Psi_k^o(d\vec{r}) = \int \Psi_{k\alpha}^{o*} V \Psi_k^o(d\vec{r}) \qquad (46.29)$$

шәклини алыр. Бу тәнлијә јалныз сыфырынчы јахынлашманын далға функсијалары дахилдир, енержијә көрә исә јалныз биринчи тәртиб кичик һәдләр дахил олур. Беләликлә, бахылан һалда һәјәчанланмыш системин (46.3) далға тәнлији далға функсијалара көрә сыфырынчы, енержијә көрә исә биринчи јахынлашма дәгиглији илә һәлл олунур.

Ψ_k^o - функсијасынын (46.27) илә верилмиш ифадәсини (46.29)-да јеринә јазыб. $\Psi_{k\alpha}^o$ функсијаларынын гаршылыглы ортогонал олдуғуну нәзәрә алсаг

$$E_k^{(1)}C_{k\alpha} - \sum_\beta V_{k\alpha,k\beta}C_{k\beta} = 0 \qquad (46.30)$$

бирчинс тәнликләр системи алыныр. Бурада јалныз һәр һансы ихтијари E_k^o сәвијјәсинә олан дүзәлишләри ахтардығымыздан, ахырынчы тәнликдә k индексини јазмамаг олар:

$$(V_{\alpha\alpha} - E_k^{(1)})C_\alpha + \sum_{\beta\neq\alpha} V_{\alpha\beta}C_\beta = 0 \qquad (46.31)$$

бурада

$$V_{\alpha\beta} = \int \Psi_{k\alpha}^{o*} V \Psi_{k\beta}^o(d\vec{r}) .$$

α, β индексләри $1,2,\ldots,f$ гијмәтләрини алыр. (46.31) системи C_α әмсалларына көрә f сајда биринчи хәтти тәнликләр системидир. Онун гејри-тривиал һәллинин мөвчуд олмасы үчүн C_α -ларын әмсалларындан дүзәлдилмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр:

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E_1^{(1)} & V_{12} \ldots V_{1f} \\ V_{21} & V_{22} - E_2^{(1)} \ldots V_{2f} \\ - - - - & - - - - - \\ - - - - & - - - - - \\ V_{f1} & V_{f2} \ldots\ldots V_{ff} - E_{ff}^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \qquad (46.32)$$

Бу тәнлик *әсри* вә ја *секулјар* тәнлик адланыр. О, $E_k^{(1)}$-ә көрә f тәртибли үстлү тәнликдир. Онун $E_k^1 = E_{k1}^{(1)}, E_{k2}^{(1)}, \ldots, E_{kf}^{(1)}$ кими f һәгиги көкү (V гаршылыглы тә'сир оператору ермит олдуғундан) вардыр. Көкләрин һамысы мүхтәлиф олдугда һәјәчанланмамыш системин E_k^o сәвијјәси һәјәчанланма дахил олдугдан сонра f мүхтәлиф сәвијјәјә парчаланыр. Бу заман чырлашма там арадан көтүрүлүр. Көкләрдән бә'зиләри бир-биринин үзәринә дүшдүкдә чырлашма гисмән ортадан көтүрүлүр.

Һәр бир $E_{k\alpha} = E_{k\alpha}^o + E_{k\alpha}^{(1)}$ сәвијјәсинин далға функсијасыны тапмаг үчүн (46.31) системиндә $E_k^{(1)}$-ин әвәзинә $E_{k\alpha}^{(1)}$ гијмәти јазылыр вә систем C_α -лара көрә һәлл едилир. Бу заман онлар үчүн $C_{\alpha 1}$, $C_{\alpha 2}$, ..., $C_{\alpha f}$ һәлләри тапылыр. Беләликлә, $E_{k\alpha}$ сәвијјәсинин сыфырынчы јахынлашмада далға функсијасы

$$\Psi_{k\alpha}^o = \sum_\beta C_{k\alpha\beta}\Psi_{k\beta}^o \qquad (46.33)$$

олур, јә'ни парчаланмада алынмыш һәр бир $E_{k\alpha}^o$ сәвијјәси сыфырынчы јахынлашма дәгиглији илә тапылмыш өзүнүн $\Psi_{k\alpha}^o$ далға функсијасы илә тәсвир олунур.

§ 47. ГЕЈРИ-СТАСИОНАР ҺӘЈӘЧАНЛАНМА НӘЗӘРИЈЈӘСИ (КВАНТ КЕЧИДЛӘРИ НӘЗӘРИЈЈӘСИ)

Квант механики системин енержи спектрини һесабламаг мәсәләси квант механикасынын әсас мәсәләләриндән биридир. Системин енержи спектри мә'лум олдугда, онун шүаланма спектриндә мүшаһидә олунан ганунаујғунлуглары изаһ етмәјә, статистик методлар васитәсилә физики хассәләрини өјрәнмәјә (термодинамик параметрләри һесабламагла) вә нәзәри нәтичәләри тәчрүбәдә алынан нәтичәләрлә мүгајисә етмәк јолу илә квант механикасынын әсас принсипләринин доғрулуғуну тәсдиг етмәјә имкан верир. Бундан башга квант механикасы системә тә'сир едән харичи һәјәчанланмаларын системдә јаратдығы дәјишикликләри дә һесабламаға имкан верир. Белә дәјишикликләр, һәјәчанланма нәтичәсиндә системин бир стасионар сәвијјәсиндән дикәринә кечмәси, әлавә мүхтәлиф мултипол моментләрин јаранмасы вә и.а. ола биләр.

Стасионар һәјәчанланма нәзәријјәсиндән (§ 46) фәргли олараг, фәрз едәк ки, һәјәчанланма оператору замандан асылыдыр $\breve{V} = \breve{V}(t)$. Бу һалда системин Һамилтон оператору $\breve{H} = \breve{H}_o + V(t)$ замандан асылы олдуғундан (10.4′) һәрәкәт тәнлијинә көрә системин енержиси сахланмыр вә онун стасионар һаллары мөвчуд олмур. Беләликлә,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\breve{H}_o + V(t))\Psi(x,t). \qquad (47.1)$$

Шрединкер тәнлијинин һәлли, јалныз далға функсијасынын тәгриби ифадәсинин тапылмасы илә мәһдудланыр. Башга сөзлә, һәјәчанланмамыш системин стасионар һалларынын далға функсијаларына, јә'ни $\breve{H}_o\Psi^o = E^o\Psi^o$ тәнлијинин һәлли олан $\Psi_n^o(x,t)$-ләрә көрә һәјәчанланмыш системин Ψ далға функсијасы һесабланыр. Бурада (47.1) тәнлијинин һәлли H_0 операторунун мәхсуси функсијаларынын суперпозисијасы шәклиндә ахтарылыр:

$$\Psi = \sum_k C_k(t)\Psi_k^o(x,t). \qquad (47.2)$$

Стасионар һәјәчанланма нәзәријјәсиндән фәргли олараг, бурада фәрз олунур ки, системин E_k һалында олма еһтималыны тә'јин едән C_k әмсаллары замандан асылыдыр. (47.1) тәнлијинин бу һәлл методу Дирак тәрәфиндән тәклиф олунмушдур (1926-чы ил). Бу метод диференсиал тәнликләрин һәлли үчүн истифадә олунан сабитләрин вариасијасы методуну хатырладыр.

(47.2) ифадәсини (47.1)-дә јазыб, стасионар һалларын далға функсијаларынын

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_k^o}{\partial t} = \breve{H}_o\Psi_k^o$$

тәнлијини өдәдијини јадымыза салсаг,

$$i\hbar\sum_{k'}\frac{\partial C_{k'}(t)}{\partial t}\Psi_{k'}^o = \sum_{k'} C_{k'}(t)\breve{V}(x,t)\Psi_{k'}^o$$

аларыг. Ахырынчы бәрабәрлијин һәр ики тәрәфини солдан $\Psi_k^{o*}(x,t)$-јә вуруб, бүтүн фәза үзрә интеграллајаг. Онда

$$\int\Psi_{k'}^{o*}\Psi_k^o(d\vec{r}) = \delta_{kk'}$$

ортонормаланма шәртини нәзәрә алдыгда, $C_k(t)$ әмсаллары үчүн

$$i\hbar\frac{\partial C_k(t)}{\partial t} = \sum_{k'} V_{kk'}(t)C_{k'}(t) \qquad (47.3)$$

тәнлији алыныр. Бурада

$$V_{kk'}(t) = \int\Psi_k^{o*}\breve{V}(t)\Psi_{k'}^o(d\vec{r}) \qquad (47.4)$$

$\breve{V}(t)$ операторунун матриса елементидир. $C_k(t)$ әмсаллары үчүн алынмыш (47.3) сонсуз тәнликләр системи енержи тәсвириндә ($\breve{H}_o$ – оператору тәсвириндә) јазылмыш (47.1) Шрединкер тәнлији олуб, $C_k(t)$ әмсаллары исә һәмин тәсвирдә верилмиш далға функсијаларыдыр. Онун дәгиг һәлли мүмкүн дејилдир. V-нин бир тәртиб кичик ($\breve{H}_o$-а көрә) кәмијјәт олдуғуну фәрз етсәк, (47.3) тәнликләр системини ардычыл јахынлашма методу (һәјәчанланма нәзәријјәси) васитәсилә һәлл етмәк олар:

$$C_k(t) = C_k^o + C_k^{(1)} + C_k^{(2)} + \dots \qquad (47.5)$$

(47.5)-и (47.3) тәнлијиндә јазыб, бәрабәрлијин сағ вә сол тәрәфиндә ејни тәртибли һәдләрин бәрабәр олмасы шәртиндән $C_k(t)$ әмсалларыны тә'јин етмәк үчүн

$$i\hbar\frac{\partial C_k^o}{\partial t} = 0,$$
$$i\hbar\frac{\partial C_k^{(1)}}{\partial t} = \sum_k V_{kk'}(t)C_{k'}^o, \qquad (47.6)$$
$$i\hbar\frac{\partial C_k^{(2)}}{\partial t} = \sum_{k'} V_{kk'}C_{k'}^{(1)}(t)$$
$$\text{- - - - - - - - - - - - - -}$$
$$\text{- - - - - - - - - - - -}$$

сонсуз тәнликләр системини аларыг.

Бу системин биринчи тәнлији көстәрир ки, сыфырынчы јахынлашмада C_k^o әмсалы замандан асылы олмамалыдыр, јә'ни

$$C_k^o = \text{const}.$$

Онун гијмәти башланғыч шәрт илә верилир вә системин һәјәчанланма дахил едилмәкдән әввәлки һалыны характеризә едир. Фәрз едәк ки, t=0 анында систем E_n^o һалындадыр, онда $C_k^o = \delta_{nk}$ кими тә'јин едилир.

C_k^o-ин гијмәтини (47.6) системинин икинчи тәнлијиндә јазаг. $\delta_{kk'}$ символу илә чәмин көтүрүлмәси гајдасына әсасән, биринчи јахынлашмада далға функсијасына биринчи тәртиб әлавәни тә'јин едән $C_k^{(1)}$ әмсалы үчүн

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_o^t V_{kn}(t')dt' \tag{47.7}$$

ифадәси алыныр. $C_k^{(1)}$-ин бу ифадәсини (47.6) системинин үчүнчү тәнлијиндә јазсаг, икинчи јахынлашмада әлавәни тә'јин едән $C_k^{(2)}(t)$ әмсалыны тапырыг вә и.а. Биз бурада јалныз биринчи јахынлашма илә кифајәтләнәчәјик. Беләликлә, бахылан тәсвирдә биринчи јахынлашмада $C_k(t)$ далға функсијасы үчүн

$$C_k(t) = C_k^o + C_k^{(1)}(t)$$

ифадәси алыныр. Далға функсијасынын физики мә'насына көрә системин t анында E_k һалында олма еһтималы

$$|C_k(t)|^2 = |C_k^o + C_k^{(1)}|^2$$

олар. Лакин $t=t_o=0$ анында системин E_n^o һалында олдуғуну фәрз етдијимиздән $C_k^o = \delta_{kn} = 0$. t=0-дан фәргли һәр һансы t анында системин ихтијари E_k һалында ($\kappa \neq n$) олма еһтималы исә

$$|C_k(t)|^2 = |C_k^{(1)}(t)|^2$$

вә ја

$$C_k^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_o^t V_{kn}(t')dt'\right|^2 \tag{47.8}$$

олар. Демәли, харичи $V(t)$ һәјәчанланма нәтичәсиндә систем n һалындан k һалына кечир, јә'ни $V(t)$ һәјәчанланма оператору квант кечиди јарадыр.

Стасионар һалларын далға функсијаларынын замандан асылылығы бизә мә'лум олдуғундан $V_{kn}(t)$ матриса елементи

$$V_{kn}(t) = \int \Psi_k^{o*}(x)\breve{V}(t)\Psi_n^o(x)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k-E_n)t}(d\vec{r}) \tag{47.9}$$

шәклиндә јазыла биләр. Бурада $\omega_{kn} = \dfrac{E_k - E_n}{\hbar}$ кечид тезлији вә

$$V_{kn}^o(t) = \int \Psi_k^{o*}(x)\breve{V}(t)\Psi_n^o(x)(d\vec{r}) \tag{47.10}$$

ишарәсини гәбул етсәк, (47.8) илә тә'јин едилән еһтимал заманын функсијасы олур. Буна көрә дә о, системин кечид еһтималыны биргијмәтли тә'јин етмир. Квант механикасында ваһид замандакы кечид еһтималы һесабланыр. Белә еһтималы W_{kn} илә ишарә етсәк (бурада $k \neq n$ олдуғундан)

$$W_{kn} = \frac{\partial}{\partial t}|C_k(t)|^2 \tag{47.11}$$

олур. Бу дүстур бир гаршылыглы тә'сир актынын нәтичәси олан (мәсәлән, атомун шүа бурахма вә шүаудма, јүклү зәррәчијин Кулон саһәсиндә сәпилмәси кими) бир чох физики просесләрин тәһлилинә имкан верир.

а) Инди дә фәрз едәк ки, $V(x,t)$ һәјәчанланма оператору заманын периодик функсијасыдыр:

$$V(x,t) = V(x)e^{i\omega t}.$$

Онда (47.7) ифадәси

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}V_{kn}^o\int_o^t e^{i(\omega-\omega_{kn})t'}dt'$$

шәклинә дүшәр, бурада

$$V_{kn}^o = \int \Psi_k^{o*}(x)\breve{V}(x)\Psi_n^o(x)(d\vec{r}) \tag{47.12}$$

$\breve{V}(x)$ операторунун матриса елементидир.

$$\delta(\omega - \omega_{kn}) = \frac{1}{2\pi}\int_o^t e^{i(\omega-\omega_{kn})t'}dt'$$

делта функсијасыны дахил етсәк,

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{2\pi i}{\hbar}V_{kn}^o\delta(\omega - \omega_{kn}), \tag{47.13}$$

бурадан, системин k һалында олма еһтималы үчүн

$$|C_k^{(1)}(t)|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}|V_{kn}^o|^2\delta^2(\omega - \omega_{kn}) \tag{47.14}$$

ифадәси алыныр. Мүшаһидә интервалынын $(0,T)$ олдуғу гәбул едиләрсә, δ-функсијанын тә'јининдән о, јалныз $\omega=\omega_{kn}$- дә сыфырдан фәргли галдығындан (47.14) ифадәсиндә δ- функсијанын бирини

$$\delta(\omega-\omega_{kn})=\frac{1}{2\pi}\int_0^T e^{i(\omega-\omega_{kn})t}dt=\frac{1}{2\pi}\int_0^T dt=\frac{T}{2\pi}$$

илә әвәз едә биләрик:

$$\left|C_k^{(1)}(t)\right|^2=\frac{2\pi}{\hbar^2}\left|V_{kn}^o\right|^2 T\delta(\omega-\omega_{kn}) \qquad (47.14')$$

алынар. Бу һалда (47.11) - дән ваһид замандакы кечид еһтималы үчүн

$$W_{kn}=\frac{\left|C_k^{(1)}(t)\right|^2}{T}=\frac{2\pi}{\hbar^2}\left|V_{kn}^o\right|^2\delta(\omega-\omega_{kn}) \qquad (47.15)$$

ифадәси алыныр.

б) Бир хүсуси һала да бахаг. Фәрз едәк ки, $V(t)$ һәјәчанланма оператору системә көстәрилән тә'сир башлајандан (t=0) тә'сир гуртаран ана (t=T) гәдәр сабит галыр. Онда (47.10) - да $V_{kn}(t)$ матриса елементи замандан асылы олмур вә кечид еһтималынын (47.15) ифадәси

$$W_{kn}=\frac{2\pi}{\hbar^2}\left|V_{kn}^o\right|^2\delta(\omega_k-\omega_n) \qquad (47.16)$$

шәклинә дүшәр. Бурада $\omega_{k,n}=\dfrac{E_{k,n}}{\hbar}$ олдуғуну нәзәрә алыб, δ — функсијанын $\delta(\alpha x)=\dfrac{1}{\alpha}\delta(x)$ хассәсиндән истифадә едәндә (47.16) дүстуру

$$W_{kn}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{kn}^o\right|^2\delta(E_k-E_n) \qquad (47.17)$$

шәклини алыр.

(47.17)- дән көрүнүр ки, кечид еһтималы јалныз E_k=E_n олдугда сыфырдан фәрглидир. Демәли белә кечид о заман мүмкүндүр ки, систем башланғыч E_n квант һалындан башга һәмин енержијә малик дикәр квант һалына да малик олсун. Башга сөзлә белә квант кечидләри јалныз енержи сәвијјәләри чырлашмыш олан системләрдә мүмкүндүр.

Мүмкүн сон һаллардан һәр һансы биринә кечид еһтималы W_{kn}-ин бүтүн сон E_k һаллары үзрә чәмә бәрабәр олар:

$$\sum_k W_{kn}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_k\left|V_{kn}^o\right|^2\delta(E_k-E_n)\,. \qquad (47.18)$$

Әкәр верилмиш E_n һалындан кәсилмәз спектрин һәр һансы ихтијари һалына кечидин еһтималыны тапмаг истәсәк, әввәлчә системин E_k, E_k+dE_k енержи интервалындакы квант һалларынын сајыны тапмаг лазымдыр. Бу сајы $\rho(E_k)dE_k$ илә ишарә етсәк, ахтарылан еһтимал

$$W=\sum_k W_{kn}=\frac{2\pi}{\hbar}\int\left|V_{kn}^o\right|^2\rho(E_k)\delta(E_k-E_n)dE_k$$

вә ја

$$W=\frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{kn}^o\right|^2\rho(E_n) \qquad (47.19)$$

олур.

Инди дә һәјәчанланма нәзәријјәсинин бә'зи тәтбигләринә кечәк.

§ 48. АНҺАРМОНИК ОССИЛЈАТОР

Истәнилән гүввәнин тә'сири алтында рәгс едән системин потенсиал функсијасы үмумијјәтлә координатларын мүрәккәб функсијасы олур. §35- дә гејд етдијимиз кими, јалныз кифајәт гәдәр кичик амплитудлу рәгсләр үчүн о, јердәјишмәнин үстлү сырасы шәклиндә көстәрилә биләр ((35.8)-ә бах):

$$U(x)=\frac{m\omega_o^2}{2}x^2+\lambda x^3+\beta x^4+\ldots \qquad (48.1)$$

Потенсиал функсијасы бу шәклә малик олан систем анһармоник оссилјатор адланыр. (48.1) сырасынын биринчи үч һәдди илә кифајәтләнсәк, анһармоник оссилјаторун координат тәсвириндә Һамилтон оператору

$$\breve{H}=\frac{\breve{p}^2}{2m}+\frac{m\omega_o^2}{2}x^2+\lambda x^3+\beta x^4 \qquad (48.2)$$

олар. $\breve{H}$ ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан системин һаллары стасионар һаллар олур. Лакин (48.2)-јә ујғун

$$\left(\frac{\breve{p}^2}{2m}+\frac{m\omega_o^2}{2}x^2+\lambda x^3+\beta x^4\right)\Psi(x)=E\Psi(x) \qquad (48.3)$$

Шредингер тәнлији дәгиг һәлл олунмур.

x-ин кифајәт гәдәр кичик гијмәтләриндә (48.3) ифадәсиндә үчүнчү вә дөрдүнчү һәдләр биринчи ики һәддән хејли кичик галыр. Онда

$$\breve{V}(x)=\lambda x^3+\beta x^4 \qquad (48.4)$$

операторуна һәјәчанланма оператору,

$$\breve{H}_o = \frac{\breve{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_o^2 x^2}{2} \tag{48.5}$$

исә һәјәчанланмамыш системин Һамилтон оператору кими бахыб, (47.3) тәнлијини һәлл етмәк үчүн һәјәчанланма нәзәријјәсиндән истифадә етмәк олар.

§ 35-дән билдијимиз кими, (48.5) илә верилмиш $\breve{H}_o$ оператору һармоник хәтти оссилјаторун Һамилтон операторудур. Онун мәхсуси гијмәтләри вә мәхсуси функсијалары § 35-дә тапылмышдыр:

$$E_n^o = \hbar\omega_o(n + \frac{1}{2}),$$
$$\Psi_n^o = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_o \sqrt{\pi}}} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi). \tag{48.6}$$

Хәтти оссилјаторун квант һаллары чырлашмамыш олдуғундан (48.3) тәнлији Шрединкерин белә һаллар үчүн инкишаф етдирдији стасионар һәјәчанланма нәзәријјәсинин көмәји илә һәлл олуна биләр. Лакин биз, анһармоник оссилјаторун јалныз енержи спектрини һесабламагла кифајәтләнәчәјик.

Икинчи јахынлашма да нәзәрә алынмагла системин енержиси

$$E_n = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}. \tag{48.7}$$

Енержијә биринчи тәртиб әлавә, мә'лум олдуғу кими (бах § 47) $\breve{V}$-нин бахылан һалдакы отра гијмәтинә бәрабәрдир:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \lambda(x^3)_{nn} + \beta(x^4)_{nn}. \tag{48.8}$$

Асанлыгла көстәрмәк олар ки,

$$(x^3)_{nn} = \int \Psi_n^o x^3 \Psi_n^o dx = 0.$$

Доғрудан да, бурада интеграл алтындакы функсија тәк функсија олдуғундан, белә функсијаларда $(-a,a)$ интервалында көтүрүлмүш интеграл һәмишә сыфра бәрабәрдир. Онда

$$E_n^{(1)} = \beta(x^4)_{nn} = \beta\int \Psi_n^o x^4 \Psi_n^o(x)dx \tag{48.9}$$

олар. (48.6) илә верилмиш Ψ_n^o функсијаларынын көмәјилә $(x^4)_{nn}$-и билаваситә һесабламаг олар. Лакин x_{nk} матриса елементинин (35.42) ифадәси мә'лум олдуғундан, матрисаларын вурма гајдасынын көмәјилә о, даһа асан һесаблана биләр.

Әввәлчә $(x^4)_{nn}$-и

$$(x^4)_{nn} = \sum_k (x^2)_{nk}(x^2)_{kn} \tag{48.10}$$

шәклиндә јазаг. Сонра да

$$(x^2)_{nk} = \sum_k x_{nm} x_{mk}$$

бәрабәрлијиндән истифадә едәрәк $(x^2)_{nk}$-ны һесаблајаг. (35.42) әсасән

$$(x^2)_{nk} = x_o^2 \sum_m \left(\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right)\left(\sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{k,m-1} + \sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{k,m+1}\right).$$

Мө'тәризәләри вуруб, m үзрә чәми δ-символу васитәсилә көтүрсәк,

$$(x^2)_{nk} = \frac{x_o^2}{2}\left\{\sqrt{n(n-1)}\delta_{k,n-2} + (2n+1)\delta_{kn} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{k,n+2}\right\} \tag{48.11}$$

алынар. Бурадан көрүнүр ки, $(x^2)_{nk}$ матрисасынын k-нын јалныз $k=n$ вә $k=n\pm2$ матриса елементләри сыфырдан фәргли дир:

$$(x^2)_{nk} = (x^2)_{n,n-2} + (x^2)_{nn} + (x^2)_{n,n+2}. \tag{48.12}$$

Бурада

$$(x^2)_{n,n-2} = \langle n|x^2|n-2\rangle = \frac{x_o^2}{2}\sqrt{n(n-1)}$$
$$(x^2)_{n,n+2} = \langle n|x^2|n+2\rangle = \frac{x_o^2}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)} \tag{48.13}$$
$$(x^2)_{nn} = \langle n|x^2|n\rangle = \frac{x_o^2}{2}(2n+1)$$

$(x^2)_{nk}$-нын (48.11) илә верилмиш ифадәсини (48.10)-да јеринә јазыб, $(x^2)_{nk} = (x^2)_{kn}$ бәрабәрлијини нәзәрә алсаг,

$$(x^4)_{nn} = ((x^2)_{n,n-2})^2 + ((x^2)_{nn})^2 + ((x^2)_{n,n+2})^2 \tag{48.14}$$

вә (48.13)-ә әсасән

$$(x^4)_{nn} = \frac{3}{2}x_o^4\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)$$

алыныр. Беләликлә, енержијә биринчи тәртиб әлавә

$$E_n^{(1)} = \frac{3\beta}{2}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}(n^2 + n + \frac{1}{2}) \tag{48.15}$$

олар.

Һәјәчанланма нәзәријјәсинин биринчи јахынлашмасында алынан нәтичәни ашағыдакы кими изаһ етмәк олар. Бу јахынлашмада хәтти һармоник оссилјаторун енержисинә олан $\lambda(x^3)_{nn}$ кичик әлавә јалныз

$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ параболуну чүз'и тәһриф едир вә ашағы (әсас һала јахын) енержи сәвијјәләри үчүн онун енини дәјишмир. Системин рәгс областынын өлчүләри тәхминән һармоник оссилјаторун рәгс областынын өлчүләри илә ејни олур вә системин енержиси дәјишмир. $V(x)$ потенсиалын ифадәсиндәки βx^4 һәдди исә, симметрик оларағ параболун һәр ики будағыны ја јухары галдырыр ($\beta > 0$), ја да ашағы салыр ($\beta < 0$). Нәтиҹәдә, һәтта ашағы енержи сәвијјәләриндә белә, параболун ени вә рәгс областынын өлчүләри, ујғун оларағ, кичилир вә ја бөјүјүр. Бу исә системин бүтүн енержи сәвијјәләринин $E_n^{(1)}$-ин ишарәсиндән асылы оларағ, јухары вә ја ашағы сүрүшмәсинә сәбәб олур.

(48.15) -дән көрүнүр ки, $E_n^{(1)}$ әлавәси $\hbar^2$ илә ($E_n^o \sim \hbar$) мүтәнасибдир. (48.6) сырасынын тәркибинә бу тәртибли башга һәдләр дә дахил олурса, дәгин ки, онлары да нәзәрә алмаг лазымдыр. Һесабламалар көстәрир ки, јалныз λx^3 һәдди икинчи јахынлашмада $\hbar^2$ тәртибли әлавәјә кәтирир.

Һәјәчанланма нәзәријјәсиндә енержијә икинчи тәртиб әлавә

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{V_{nk} V_{kn}}{E_n^o - E_k^o} = \lambda^2 \sum_k \frac{(x^3)_{nk}(x^3)_{kn}}{E_n^o - E_k^o} \qquad (48.16)$$

дүстуру илә верилир.

$(x^3)_{nk}$-ны һесабламаг үчүн јенә дә матрисаларын вурулма гајдасындан истифадә едәк:

$$(x^3)_{nk} = \sum_m (x^2)_{nm} (x)_{mk} \,.$$

$(x^2)_{nk}$ -ин (48.16) вә x_{mk} -нын (35.42) илә верилмиш ифадәләрини бурада јеринә јазсаг,

$$(x^3)_{nk} = \frac{x_o^3}{2\sqrt{2}} \left\{ \sum_m \sqrt{n(n-1)}\,\delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{mn} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} \right\} \times$$
$$\times \left\{ \sqrt{\frac{m}{2}}\delta_{m-1,k} + \sqrt{\frac{m+1}{2}}\delta_{m+1,k} \right\}$$

олар. Бурада m үзрә чәми көтүрәндән сонра

$$(x^3)_{nk} = \frac{x_o^3}{2\sqrt{2}} \left\{ \sqrt{n(n-1)(n-2)}\,\delta_{k,n-3} + 3n\sqrt{n}\delta_{k,n-1} + 3(n+1)\sqrt{n+1}\,\delta_{k,n+1} + \right.$$
$$\left. + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\,\delta_{k,n+3} \right\}$$

алыныр. Демәли, $(x^3)_{nk} = \langle n | x^3 | k \rangle$ матрисасынын јалныз $k=n\pm1$ вә $k=n\pm3$ матриса елементләри сыфырдан фәрглидир.

$$\langle n | x^3 | n-1 \rangle = 3x_o^3 \left(\frac{n}{2}\right)^{3/2},$$

$$\langle n | x^3 | n+1 \rangle = 3x_o^3 \left(\frac{n+1}{2}\right)^{3/2}, \qquad (48.17)$$

$$\langle n | x^3 | n-3 \rangle = \frac{x_o^3}{2} \left(\frac{n(n-1)(n-2)}{2}\right)^{1/2},$$

$$\langle n | x^3 | n+3 \rangle = \frac{x_o^3}{2} \left(\frac{(n+1)(n+2)(n+3)}{2}\right)^{1/2}.$$

Бурадан енержијә көрә икинчи тәртиб әлавә

$$E_n^{(2)} = \lambda^2 \left[\frac{((x^3)_{n,n-1})^2}{E_n^o - E_{n-1}^o} + \frac{((x^3)_{n,n+1})^2}{E_n^o - E_{n+1}^o} + \frac{((x^3)_{n,n-3})^2}{E_n^o - E_{n-3}^o} + \frac{((x^3)_{n,n+3})^2}{E_n^o - E_{n+3}^o} \right].$$

(48.5) вә (48.17) бәрабәрликләриндән истифадә едәрәк $E_n^{(2)}$ үчүн

$$E_n^{(2)} = -\frac{15}{4} \frac{\lambda^2 \hbar^2}{m^3 \omega^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) \qquad (48.18)$$

гијмәти алыныр.

(48.5), (48.6), (48.15) вә (48.18) ифадәләриндән анһармоник оссилјаторун енержи спектри үчүн, $\hbar$-ин квадраты илә мүтәнасиб һәдләр дәгиглији илә,

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{3\beta\hbar^2}{2m^2\omega^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) - \frac{15}{4}\frac{\lambda^2\hbar^2}{m^3\omega^4}\left(n^2 + n + \frac{11}{30}\right) \quad (48.19)$$

алыныр.

Анһармоник оссилјаторун квант сәвијјәләри үчүн алынмыш (48.19) ифадәсиндән молекулларын рәгси енержи сәвијјәләрини һесабламаг үчүн истифадә едилир. Рәгсләрин һармоник олдуғу фәрз олунарса, молекулларын рәгс-квант сәвијјәләри (48.6), һармониклик шәрти позулдуғу һалларда исә (48.18) ифадәси илә верилир.

§ 49. ШТАРК ЕФФЕКТИ

Тәбиәтдәки бүтүн маддәләр јүклү зәррәчикләрдән—нүвә вә електронлардан ибарәт атомлардан тәшкил олунмушдур. Онлар арасында мејдана чыхан Кулон гаршылыглы тә'сири маддәләрин әксәр хассәләрини тә'јин едир. Нүвәнин електрик (Кулон) саһәсиндә һәрәкәт едән електронун енержи спектри § 40-да һесабланмышдыр. Инди дә харичи електрик саһәсинин јүклү зәррәчикләрдән ибарәт нејтрал системә (атома) тә'сирини өјрәнәк.

Тәчрүбә көстәрир ки, харичи бирчинс електрик саһәсиндә атомларын спектрал хәтләри бир нечә хәттә парчаланыр. Бу һадисәјә *Штарк еффекти* дејилир. Белә парчаланма, јәгин ки, атомун стасионар сәвијјәсинин бир нечә сәвијјәјә парчаланма нәтичәси олур.

Атом интенсивлији $\vec{\mathcal{E}}$ олан харичи електрик саһәсинә дахил едилдикдә, електронун нүвә саһәсиндәки һәрәкәтини тәсвир едән $\hat{H}_o = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$ Һамилтон операторуна, атомла харичи саһә арасындакы гаршылыглы тә'сири характеризә едән $\hat{V} = -\vec{d}\,\vec{\mathcal{E}}$ оператору әлавә олунур, бурада $\vec{d} = -e\vec{r}$ атомун дипол моменти операторудур.

Координат системинин z охуну харичи саһә истигамәтиндә јөнәлтсәк, електрик саһәсиндә атомун Һамилтон оператору

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + e\mathcal{E}z \qquad (49.1)$$

олар.

Бурадан көрүнүр ки, харичи саһә дахил едилдикдә системин симметријасы позулур. Әввәлчә системин $\hat{H}_o$ оператору сферик симметријаја малик иди. Онун һәрәкәт мигдары моменти (квадраты мә'насында) вә моментин L_z пројексијасы сахланырды (һәрәкәт интеграллары иди). Инди исә систем аксиал симметријаја маликдир вә һәрәкәт мигдары моментинин јалныз L_z пројексијасы һәрәкәт интегралы олур. Башга сөзлә $\hat{H}$ оператору јалныз z оху (харичи саһә) әтрафында ихтијари бучаг гәдәр фырланмаја көрә инвариант галыр. Бундан башга, (49.1) оператору z охундан кечән истәнилән мүстәвидәки фәза координатларынын инверсијасына ($x \to -x$, $y \to -y$, $z \to -z$) көрә дә инвариантдыр. Фәза инверсијасы заманы $L_z = m\hbar$ пројексијасы ишарәсини дәјишдијиндән ($m \to -m$) һәрәкәт мигдары моментинин L_z пројексијасынын ишарәси илә фәргләнән стасионар һалларын енержиси ејни вә онлар икигат чырлашмыш олур.

Харичи електрик саһәсинин интенсивлији (тәхминән $10^4 \div 10^5$ *В/см*), атомун дахилиндә нүвәнин јаратдығы саһәнин интенсивлијиндән ($\sim 5 \cdot 10^9$ *В/см*) хејли кичик олдуғундан, биринчинин тә'сири алтында парчаланмыш E' енержи сәвијјәләри арасындакы мәсафә, ики ардычыл стасионар сәвијјә арасындакы мәсафәдән хејли кичик олур. Буна көрә дә $\hat{V}$ операторуну һәјәчанланма оператору гәбул едиб, системин

$$E\Psi = (\hat{H}_o + V)\Psi \qquad (49.2)$$

Шрединкер тәнлијини һәјәчанланма методу васитәси илә һәлл етмәк олар.

Һәјәчанланма нәзәријјәсинин биринчи јахынлашмасында һәјәчанланмамыш системин енержисинә биринчи тәртиб әлавә, һәјәчанланма операторунун бахылан һалдакы орта гијмәтинә бәрабәрдир:

$$E_n^{(1)} = \langle n\,|V\,|n\rangle = \int \Psi_n^{o*} \hat{V} \Psi_n^o (d\vec{r}). \qquad (49.3)$$

(§ 40) вә (§ 89) параграфларда һидрокен, һидрокенәбәнзәр вә бир оптик електронлу атомларын енержи спектрләри вә дalға функсијалары спектрләри һесабланмышдыр:

Һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомлар үчүн

$$E_n^o = -\frac{me^4 Z^2}{2n^2\hbar^2}; \qquad \Psi_{nlm}^o = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \qquad (49.4)$$

бир оптик електронлу атомлар үчүн исә

$$E_{nl}^o = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 (n + \sigma_l)^2}; \qquad \Psi_{nlm}^o = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad (49.5)$$

алыныр.

Биринчи һалда системин һәр бир енержи сәвијјәси һәм l вә һәм дә m квант әдәдләринә көрә n^2 тәртибдә, икинчи һалда исә јалныз m-ә көрә $2l+1$ тәртибдә чырлашмышдыр. Суперпозисија принсипинә көрә һидрокен атомунун E_n^o һалынын φ_n дalға функсијасы Ψ_{nlm}^o функсијалары илә

$$\varphi_n(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} C_{lm} \Psi_{nlm}^o, \qquad (49.6)$$

бир оптик електронлу атомларын E_{nl}^o һалынын φ_{nl} дalға функсијасы исә

$$\varphi_{nl}(r, \theta, \varphi) = \sum_m C_m \Psi_{nlm}^o \qquad (49.7)$$

кими ифадә олунар. Онда һәјәчанланмамыш системин енержисинә биринчи тәртиб әлавә һидрокен нөвлү атомлар үчүн

$$E_n^{(1)} = \int \varphi_n^* V \varphi_n (d\vec{r}) = \langle n\,|V\,|n\rangle, \qquad (49.8)$$

бир оптик електронлу атомлар үчүн исә

$$E_{nl}^{(1)} = \int \varphi_{nl}^* V \varphi_{nl} (d\vec{r}) = \langle nl\,|V\,|nl\rangle \qquad (49.9)$$

шәклиндә јазылыр.

(49.8) вә (49.9)-дан көрүнүр ки, һәр ики һалда атомун әсас һалына биринчи тәртиб әлавә һәмишә сыфра бәрабәрдир. Һәјәчанланмыш һалларын енержисинә биринчи тәртиб әлавә исә сыфырдан фәргли ола биләр.

Доғрудан да, һәр ики нөв атомун әсас һалы чырлашмамыш олур. Онларын әсас һалы ејни бир Ψ^o_{∞} функсијасы илә тәсвир олунур вә

$$E_1^{(1)} = E_{10}^{(1)} = e\mathcal{E}\int \Psi^{o*}_{100}\, z\, \Psi^o_{100}(d\vec{r}) = 0$$

олур, белә ки, интеграналты функсија тәк функсијадыр. Әсас һала икинчи вә јүксәк тәртибли әлавәләр исә сыфырдан фәргли олур. Мәсәлән, һидрокен атомунун әсас һалынын енержисинә икинчи тәртиб әлавә

$$E_1^{(2)} = e^2\mathcal{E}^2\sum_{nlm}\frac{\left|\int \Psi^{o*}_{100} z \Psi^o_{nlm}(d\vec{r})\right|^2}{E_1^o - E_n^o}$$

ифадәсиндән һесабланыр вә сыфырдан фәргли гијмәт алыр.

Һәјәчанланмыш һаллара кәлдикдә, онлар бу вә ја башга тәртибдән чырлашмыш олур. Белә һалларын енержисинә биринчи тәртиб әлавә а) һидрокен нөвлү атомлар үчүн (49.4) вә (49.8)-дән

$$E_n^{(1)} = \langle n\,|V\,|n\rangle = e\mathcal{E}\sum_{ll'mm'} C^*_{l'm'}C_{lm}\int \Psi^o_{nl'm'} z \Psi^o_{nlm}(d\vec{r}). \qquad (49.10)$$

б) бир оптик електронлу атомлар үчүн исә (49.5) вә (49.9)-дан

$$E^{(1)}_{nl} = \langle nl\,|V\,|nl\rangle = e\mathcal{E}\sum_{mm'} C^*_{m'}C_m\int \Psi^{o*}_{nlm'} z \Psi^o_{nlm}(d\vec{r}) \qquad (49.11)$$

олур.

Бир оптик електронлу атомларда атомун һәр бир стасионар һалы $(-1)^l$ илә тә'јин олунан мүәјјән чүтлүјә маликдир. (49.11)-дә m' вә m-ин мүхтәлиф гијмәтләр алмасына бахмајараг, интеграналты функсија фәза координатларынын инверсијасы заманы өз ишарәсини дәјишир, јә'ни о тәк функсијадыр. Она көрә дә $\int \Psi^{o*}_{nlm'} z \Psi_{nlm}(d\vec{r})$ интегралы һәмишә сыфра бәрабәр олур. Башга сөзлә, бир оптик електронлу атомлар үчүн енержијә биринчи тәртиб әлавә һәмишә сыфырдыр: $E^{(1)}_{nl} = 0$. Онлар үчүн енержијә икинчи вә јүксәк тәртибли әлавәләр исә сыфырдан фәргли галыр. Доғрудан да, харичи електрик саһәсинин тә'сири алтында E^o_{nl} сәвијјәси парчалананда алынан јени енержи сәвијјәләри арасындакы

$$\Delta E_{nl} = E^{(2)}_{nl} = E_{nl} - E^o_{nl} = \sum_{n'l'm'}\frac{V_{nlm,n'l'm'}V_{n'l'm',nlm}}{E^o_{nl} - E^o_{n'l'}}$$

фәрги харичи саһәнин интенсивлијинин квадраты илә мүтәнасибдир. Бу *квадратик Штарк еффект* адланыр.

Һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомлара кәлдикдә исә, (49.6)-дан көрүндүјү кими, онлар үчүн E^o_n стасионар һалы мүәјјән чүтлүјә малик олмур. (49.10)-да l'-ин l-ә бәрабәр гијмәтләриндә интеграналты функсија

тәк, l'-ин l-дән фәргли гијмәтләриндә исә чүт олур, биринчи һалларда интеграл сыфыр, икинчи һалларда исә сыфырдан фәргли галыр. Буна көрә дә $E^{(1)}_n = E_n - E^o_n = \Delta E_n$ әлавәси үмумијјәтлә сыфырдан фәргли вә харичи саһәнин биринчи дәрәчәси илә мүтәнасиб олур. Бу *хәтти Штарк еффекти* адланыр.

Харичи електрик саһәсиндә һидрокен атомунун E^o_n стасионар сәвијјәләринин парчаланмасы һадисәсинин үмуми квант нәзәријјәси рус дилиндә мөвчуд олан квант механикасы курсларынын әксәријјәтиндә верилмишдир. Лакин, һадисәнин маһијјәтини ајдынлашдырмаг үчүн һәр һансы бир һәјәчанланмыш стасионар сәвијјәнин парчаланмасыны тәһлил етмәклә кифајәтләнәк.

Бу мәгсәдлә һидрокен атомунун һәјәчанланмыш E^o_2 икинчи квант сәвијјәсинин харичи саһәдә парчаланмасыны тәһлил едәк. Билдијимиз кими, һидрокен атомунун истәнилән һәјәчанланмыш сәвијјәси n^2 тәртибиндә чырлашмышдыр. Бахылан E^o_2 квант сәвијјәси $\Psi^o_{200}, \Psi^o_{210}, \Psi^o_{211}, \Psi^o_{21-1}$ кими далға функсијалары илә характеризә олунан дөрд мүхтәлиф һалдан ибарәтдир, јә'ни бахылан сәвијјә дөрд гат чырлашмыш олур.

Бу функсијалар

$$\Psi^o_1 = \Psi^o_{200} = R_{20}Y_{00}(\theta,\varphi), \qquad \Psi^o_3 = \Psi^o_{211} = R_{21}Y_{11}(\theta,\varphi) \qquad (49.12)$$

$$\Psi^o_2 = \Psi^o_{210} = R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi), \qquad \Psi^o_4 = \Psi^o_{21-1} = R_{21}(r)Y_{1-1}(\theta,\varphi)$$

кими ишарә едәк. (14.28′) вә (40.40) -а әсасән

$$Y_{oo} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \qquad Y_{1o} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}; \qquad Y_{1\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

вә

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a^3}}e^{-\frac{r}{2a}}\left(1 - \frac{r}{2a}\right), \quad R_{21} = \frac{1}{\sqrt{6a^3}}e^{-\frac{r}{2a}}\frac{r}{2a}$$

(бурада a– Бор орбитинин радиусудур). Онда E^o_2 һалынын далға функсијасы

$$\Psi^o_{n=2} = \sum_{\alpha=1}^{4} C_\alpha \Psi^o_\alpha \qquad (49.13)$$

олар.

Атомун $\mathcal{E}$ харичи електрик саһәсиндә парчаланмыш квант сәвијјәләринин енержисини вә ујғун далға функсијаларыны тапмаг үчүн һәјәчанланмамыш ($\mathcal{E}$=0) системин һалларынын чырлашмыш олдуғу һал үчүн инкишаф етдирилмиш һәјәчанланма нәзәријјәсиндән истифадә етмәк олар.

Бу һал үчүн енержи тәсвириндә јазылмыш Шрединкер тәнлији (46.31) илә верилмишдир. Орада n=2 көтүрсәк, бахылан һал үчүн (46.31) тәнлији

$$(E_2^o - E_2 + V_{\alpha\alpha})C_\alpha + \sum_{\beta\neq\alpha} V_{\alpha\beta}C_\beta = 0 \qquad (49.14)$$

кими јазылыр, бурада

$$V_{\alpha\beta} = e\mathcal{E}\int \Psi_\alpha^{o*} z \Psi_\beta^o (d\vec{r}) \qquad (49.15)$$

вә Ψ_α^o-функсијалары (49.12) илә верилмишдир. z–тәк функсија олдуғундан (49.15) илә верилмиш он алты интегралдан јалныз еләләри сыфырдан фәргли олачаг ки, интегралалтындакы Ψ_α^o вә Ψ_β^o функсијалары мүхтәлиф чүтлүјә малик вә $\int e^{i(m'-m)\varphi}d\varphi = 2\pi\delta_{m'm}$ бәрабәрлијинә әсасән магнит квант әдәдләри исә бәрабәр олсун (m=m').

Беләликлә, јалныз

$$V_{21} = V_{12} = e\mathcal{E}\int \Psi_{200}^o z \Psi_{210}^o (d\vec{r}) = -3ae\mathcal{E} \qquad (49.16)$$

матрис елементләри сыфырдан фәргли олур, бурада a– биринчи Бор орбитинин радиусудур. Онда (49.14) системи

$$\begin{aligned} &(E_2^o - E_2)C_1 + V_{12}C_2 = 0 \\ &(E_2^o - E_2)C_2 + V_{21}C_1 = 0 \\ &(E_2^o - E_2)C_3 = 0 \\ &(E_2^o - E_2)C_4 = 0 \end{aligned} \qquad (49.17)$$

шәклинә дүшүр.

(49.17) бирчинс системин гејри-тривиал (сыфырдан фәргли) һәлләринин олмасы үчүн

$$\begin{vmatrix} E_2^o - E_2 & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & E_2^o - E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^o - E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^o - E_2 \end{vmatrix} = 0$$

бәрабәрлији өдәнилмәлидир. Детерминанты ачсаг, E_2-нин мәхсуси гијмәтләри

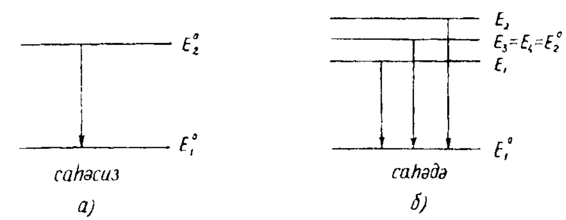
$$(E_2^o - E_2)^2\left[(E_2^o - E_2)^2 - V_{12}^2\right] = 0 \qquad (49.18)$$

тәнлијинин көкләри олар. Бурадан E_2 үчүн

$$E_2^I = E_2 + V_{12},\ E_2^{II} = E_2 + V_{12},\ E_2^{III} = E_2^{IV} = E_2^o \qquad (49.19)$$

кими үч мүхтәлиф көк алыныр. Белә ки, дөрд гат чырлашмыш E_2^o сәвијјәси харичи саһәнин тә'сири нәтичәсиндә үч мүхтәлиф сәвијјәјә парчаланыр, јә'ни чырлашма там јох, гисмән арадан галдырылыр вә $E_2^{III} = E_2^{IV} = E_2^o$ һалы ики гат чырлашмыш галыр. Харичи саһә олмадыгда спектрин $E_2^o \to E_1^o$ кечидинә ујғун хәтти, харичи саһәдә $E_2^I \to E_1^o$, $E_2^{II} \to E_1^o$ вә $E_2^{III} = E_2^{IV} \to E_1^o$ кечидләринә ујғун үч хәттә парчаланыр (шәкил 24).

Инди дә бу үч һалын сыфырынчы јахынлашмада далға функсијаларыны тапаг.



Шәкил 24. Атомун спектриндә $2p$–$1s$ кечидинә ујғун спектр хәттинин (а) електрик саһәсиндә үч хәттә(б) парчаланмасы.

Бу мәгсәдлә E_2 үчүн тапылмыш (49.19) көкләрини ајрылыгда (49.17) системиндә јазыб. C_α әмсалларыны тапмаг лазымдыр. E_2-нин јеринә онун $E_2^I = E_2^o + V_{12}$ көкүнү (49.17)-дә јазсаг, $C_1 = C_2 = C$; $C_3 = C_4 = 0$ алыныр. (49.13)-дән бу сәвијјәнин далға функсијасы*

$$\Psi_2^{oI} = C(\Psi_1^o + \Psi_2^o) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{200}^o + \Psi_{210}^o),\ \ E_2 = E_2^o + V_{12} \qquad (49.20)$$

E_2-нин $E_2^{II} = E_2 - V_{12}$ көкү үчүн исә C_1=–C_2=C, C_3=C_4=0 алыныр. Онда

$$\Psi_2^{oII} = C(\Psi_1^o - \Psi_2^o) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{200}^o - \Psi_{210}^o);\ \ E_2 = E_2^o - V_{12}. \qquad (49.21)$$

* (49.20) вә (40.21) ифадәләриндәки C вуруғу функсијаларын нормаланма шәртиндән тапылыр.

Ејнилә бунун кими E_2-нин E_2^{III} вә E_2^{IV} көкләриндә $C_1=C_2=0$, $C_3\neq0$, $C_4\neq0$ олур. Ујғун далға функсијасы

$$\Psi_2^{o(III,IV)} = C_3\Psi_3^o + C_4\Psi_4^o; \quad E_2^{III} = E_2^{IV} = E_2^o$$

алыныр, бурада C_3 вә C_4– ихтијари сабитләрдир.

Һидрокен атому үчүн јухарыда алынан нәтичәләр ашағыдакы кими изаһ олуна биләр.

Һидрокен атомунун һәјәчанланмыш һаллары мәркәзи симметријаја вә (49.6) -дан мүәјјән чүтлүјә малик дејилдир. Бу һалларда һидрокен атому мүәјјән $\vec{d} = -e\vec{r}$ дипол моменти кәсб едир. Белә атом харичи електрик саһәсинә дүшдүкдә онун саһә илә гаршылыглы тә'сири һәмин момент илә тә'јин олунур: $V = -\vec{d}\,\vec{\mathcal{E}}$. Атомун E_2^{III} вә E_2^{IV} сәвијјәләринин бир-биринә нәзәрән сүрүшмәмәси көстәрир ки, ја бу сәвијјәләрдә һидрокен атому дипол моментинә малик дејил, ја да моментин истигамәти саһәнин истигамәтинә перпендикулјардыр. E_2^{I} вә E_2^{II} сәвијјәләриндә исә дипол моменти, ујғун олараг, саһә истигамәтиндә вә она әкс истигамәтдә јөнәлмишдир.

Биринчи јахынлашмада һидрокен атому үчүн алынмыш бу нәтичәләр интенсивлији $\vec{\mathcal{E}} \sim 10^4$ *В/см* олан нисбәтән зәиф саһәләр үчүн тәчрүбә илә јахшы ујғунлашыр. Нисбәтән күчлү ($\vec{\mathcal{E}} \sim 10^5$ *В/см*) саһәләрдә исә m квант әдәдинә ујғун чырлашманын арадан көтүрүлмәси нәтичәсиндә квадратик Штарк еффекти һесабына сәвијјәләрин әлавә парчаланмасы баш верир. Даһа күчлү ($\vec{\mathcal{E}} > 10^5$ *В/см*) саһәләрдә исә атомун ионлашмасы нәтичәсиндә Штарк еффект там итир.

§ 50 ШҮАЛАНМА НӘЗӘРИЈЈӘСИ

а) Ејнштејн әмсаллары. Классик нәзәријјәјә көрә тә'чилли һәрәкәт едән електрик јүкүнә малик һәр бир зәррәчик шүаланма мәнбәји ола биләр. О, бир санијәдә тә'чилин квадратынын гијмәтилә мүтәнасиб

$$W^{кл} = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\ddot{\vec{r}}^{\,2} \tag{50.1}$$

мигдарда енержи шүаландырыр. Белә зәррәчик атомда һәрәкәт едән електрон оларса, онун гапалы орбит бојунча һәрәкәтинә нувәдән кечән һәр һансы ох үзрә мүәјјән ω дөври тезликлә баш верән рәгси һәрәкәт кими бахмаг олар. Онда зәррәчијин радиус вектору замана көрә

$$\vec{r} = \vec{r}_o \cos\omega t \tag{50.2}$$

гануну илә дәјишәр. (50.2)-дән

$$\ddot{\vec{r}} = -\omega^2\vec{r}_o\cos\omega t = -\omega^2\vec{r}$$

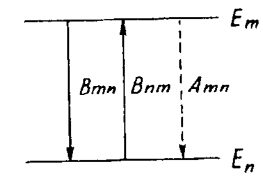
олдуғундан

$$W^{кл} = \frac{2\omega^4}{3c^3}\overline{(e\vec{r})^2} = \frac{2\omega^4}{3c^3}\vec{d}^{\,2} \tag{50.3}$$

олар. Бурадан чыхыр ки, (50.2) гануну илә рәгс едән истәнилән оссилјатор вә ја оссилјаторлар системи дә шүаланма мәнбәји ола биләр.

Беләликлә, классик нәзәријјәјә көрә һәр һансы системин шүаландырдығы енержи онун динамик характеристикалары илә тә'јин олунур: шүаланан енержинин тезлији системин механики рәгс тезлијинә бәрабәр вә онун интенсивлији рәгсин $\vec{r}$ амплитудунун вә ја системин дипол моментинин замана көрә квадратик орта гијмәтилә мүтәнасиб олур.

Квант нәзәријјәси бахымындан шүаланма механизми классик механизмдән тамамилә фәргләнир. Нилс Бор тәрәфиндән физикаја атомун стасионар квант һаллары анлајышы дахил едиләндән сонра, онун икинчи постулатына көрә, атомун вә ја һәр һансы квант системин шүабурахма вә шүаудма просесләри, системин бир стасионар квант һалындан дикәр стасионар квант һалына кечмәси нәтичәсидир. Енержиси бөјүк олан (јухары) һалдан енержиси кичик олан (ашағы) һала кечдикдә систем бу һалларын енержиләри фәргинә бәрабәр енержи шүаландырыр, ашағыдан јухары кечдикдә исә бу гәдәр енержи систем тәрәфиндән удулур. Дедикләримизи системин ики енержи һаллары (сәвијјәләри) тимсалында изаһ едәк.



Шәкил 25. Атомун E_m вә E_n сәвијјәләри арасында мүмкүн олан мәчбури (B_{mn},B_{nm}) вә спонтан (A_{mn}) кечидләрин схеми.

Ихтијари шәкилдә сечилмиш ики E_m вә E_n сәвијјәләри арасында үч чүр кечид мүмкүндүр (шәкил 25). Бүтөв хәтләрлә чәкилмиш кечидләр ***мәчбури кечидләр*** адланыр. Мәчбури кечидләр квант системинә едилән (мәсәлән, атома) һәр һансы харичи тә'сир нәтичәсиндә баш верир. Гырыг хәтлә чәкилмиш кечид исә ***спонтан (өзбашына) кечид*** адланыр. Јухары сәвијјәдән ашағы сәвијјәјә белә кечид системә һеч бир харичи тә'сир олмадыгда белә "өзбашына" баш верир.

Шрединкер нәзәријјәси чәрчивәсиндә јалныз атомун харичи тә'сир, мәсәлән, електромагнит саһәси илә гаршылыглы тә'сир нәтичәсиндә баш верән мәчбури кечидләрин нәзәријјәсини гурмаг олур, өзбашына кечидләрин сәбәби исә изаһ олунмадан галыр. Јалныз квант електродинамикасында (икинчи квантланма методу) спонтан кечидләри јарадан тә'сири мүәјјән етмәк вә шүаланманын там квант нәзәријјәсини гурмаг мүмкүн олур (бах 50.102). Буна көрә дә биз әввәлдә мәчбури кечидләрин һесабына системин шүаланма вә шүаудма просесләринин јарым классик нәзәријјәси үзәриндә дајаначағыг. Квант електродинамикасынын елементләри илә таныш олдугдан сонра исә јығчам шәкилдә шүаланманын квант нәзәријјәси шәрһ едиләчәкдир.

Шүаланма проблеминин квант нәзәријјәси бахымындан тәһлилини илк дәфә 1917-чи илдә Ејнштејн вермишди. О, мәчбури вә спонтан кечидләрин еһтималларыны характеризә етмәк үчүн ујғун олараг B вә A әмсалларыны дахил етмишди. Онлар һазырда *Ејнштејн әмсаллары* адланыр.

Квант нәзәријјәсинә көрә атом һәр һансы E_m һәјәчанланмыш сәвијјәдән ашағы ихтијари E_n енержи сәвијјәсинә өзбашына кечмәк еһтималына маликдир. Белә кечидин ваһид заманда баш вермә еһтималы A_{mn} илә ишарә олунур. Белә кечид заманы енержиси $\hbar\,\omega_{mn}=E_m-E_n$ олан фотон бурахылыр. Енержиси E_m олан һәјәчанланмыш атомларын сајыны N_m илә ишарә етсәк, системин ваһид заманда спонтан кечидләрин нәтичәсиндә шүаландырдығы енержи

$$W_{mn}^{сп}=\hbar\omega_{mn}N_m A_{mn} \tag{50.4}$$

олар.

Систем харичи електромагнит саһәсинин тә'сири алтында оларса, бу тә'сир атомларын јухары сәвијјәдән ашағы сәвијјәјә вә ашағы сәвијјәдән јухары сәвијјәјә мәчбури кечидләрини јарада биләр. Бу кечидләр заманы атомлар биринчи һалда фотон шүаландырыр, икинчи һалда исә харичдән үзәринә дүшән фотонлары удур. Ваһид заманда E_m сәвијјәсиндән E_n сәвијјәсинә мәчбури кечидләрин еһтималыны B_{nm} вә E_n-дән E_m-ә кечидин еһтималыны исә B_{mn} илә ишарә етсәк, бу кечидләр нәтичәсиндә ваһид заманда системин шүаландырдығы вә ја удduғу енержинин мигдары ујғун сәвијјәләрдәки атомларын N_m вә N_n сајы вә дүшән електромагнит саһәсинин $\rho(\omega,T)$ спектрал сыхлығы илә мүтәнасиб олачагдыр:

$$W_{mn}^{мәч}=N_m\rho(\omega,T)B_{mn}\hbar\omega_{mn}, \tag{50.5}$$
$$W_{nm}^{мәч}=N_n\rho(\omega,T)B_{nm}\hbar\omega_{nm}.$$

Бурада B_{mn} вә B_{nm} – ујғун мәчбури кечидләрин еһтималларыдыр.

Ејнштејн таразлыгдакы шүаланма (мүтләг гара чисмин шүаланмасы) үчүн A вә B әмсаллары арасындакы рабитәни мүәјјән етмишди. Бу рабитә квант механикасында мәчбури кечидләрин еһтималыны һесабламагла, спонтан кечидләрин еһтималыны тапмаға имкан верир.

Доғрудан да, әкәр шүаланма ону шүаландыран чисим илә динамик таразлыгдадырса, онда јухарыдан ашағыја кечидләрин (m-дән n-ә мәчбури вә m-дән n-ә спонтан) һесабына шүаланан енержинин мигдары n-дән m-ә мәчбури кечидләрдә удулан енержинин мигдарына бәрабәр олмалыдыр (системин температуру сабит сахланыр). Башга сөзлә, ваһид заманда чисмин шүаландырдығы вә онун шүаланма саһәсиндән удduғу енержиләр орта һесабла бир-биринә бәрабәр олур. Бу һалда (50.4) вә (50.5) ифадәләриндән

$$N_m B_{nm}\rho(\omega,T)\hbar\omega_{mn}+N_m A_{nm}\hbar\omega_{mn}=N_n B_{mn}\rho(\omega,T)\hbar\omega_{mn}$$

вә ја

$$N_m B_{nm}\rho(\omega,T)+N_m A_{nm}=N_n B_{mn}\rho(\omega,T) \tag{50.6}$$

бәрабәрлији алынар. Системдә електронларын (атомларын) енержијә көрә пајланмасыны Максвел–Болсман пајланмасы шәклиндә олдуғуну гәбул етсәк, јә'ни

$$N_m=Ce^{\frac{E_m}{kT}} \text{ вә } N_n=Ce^{\frac{E_n}{kT}}$$

(бурада k–Болсман сабитидир). (50.6) бәрабәрлији

$$B_{nm}\rho(\omega,T)e^{\frac{E_m}{kT}}+A_{nm}e^{\frac{E_m}{kT}}=B_{mn}\rho(\omega,T)e^{\frac{E_n}{kT}} \tag{50.7}$$

шәклинә дүшәр. Бурадан шүаланманын спектрал сыхлығы үчүн

$$\rho(\omega,T)=\frac{A_{nm}/B_{nm}}{\frac{B_{mn}}{B_{nm}}e^{\frac{E_m-E_n}{kT}}-1} \tag{50.8}$$

ифадәси алыныр.

Планк, микросистемләрин (атом вә молекулларын) енержисинин кәсилмәдән истәнилән гијмәт јох, јалныз мүәјјән дискрет гијмәтләр ала билдијини фәрз едәрәк, таразлыгдакы шүаланманын спектрал сыхлығы үчүн

$$\rho(\omega,T)=\frac{\hbar\omega^3}{8\pi^2c^3(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1)} \tag{50.9}$$

ифадәсини алмышды. (50.8) вә (50.9) ифадәләринин мүгајисәсиндән

$$\frac{B_{mn}}{B_{nm}}=1, \qquad \frac{A_{nm}}{B_{nm}}=\frac{\hbar\omega^3}{8\pi^2c^3}$$

алыныр. Бурадан чыхыр ки, јухарыдан ашағы вә ашағыдан јухары олан мәчбури кечидләрин еһтималлары бир-биринә бәрабәр, спонтан кечидләрин A_{nm} еһтималы исә һәмин сәвијјәләр арасындакы мәчбури кечидләрин B_{nm} еһтималы илә тә'јин олур:

$$B_{nm}=B_{mn}, \; A_{nm}=\frac{\hbar\omega^3}{8\pi^3c^3}B_{nm}. \tag{50.10}$$

Беләликлә, Шрединкер нәзәријјәси васитәсилә мәчбури кечидләрин еһтималы һесабланарса, (50.10)-дан спонтан кечидләрин еһтималыны тапмаг олар.

б) Сәрбәст електромагнит саһәси.

Мәнбәләр олмајан фәзада електромагнит саһәси

$$\operatorname{rot}\vec{\mathcal{E}} = \frac{1}{c}\frac{\partial H}{\partial t} \qquad \operatorname{div}\vec{\mathcal{E}} = 0\,, \tag{50.11}$$
$$\operatorname{rot}\vec{H} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{\mathcal{E}}}{\partial t} \qquad \operatorname{div}\vec{H} = 0$$

Максвел тәнликләри илә тәсвир олунур. $\vec{\mathcal{E}}$ вә $\vec{H}$ интенсивлик векторлары исә саһәнин $\vec{A}(\vec{r},t)$ вектор-потенсиалы илә

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{H} = \operatorname{rot}\vec{A} = \left[\nabla\vec{A}\right] \tag{50.12}$$

кими тә'јин олунур. (50.11) вә (50.12)-дән $\vec{A}(\vec{r},t)$ үчүн

$$\nabla^2\vec{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2} = 0 \tag{50.13}$$

далға тәнлији вә

$$\operatorname{div}\vec{A} = 0 \tag{50.14}$$

шәрти алыныр.

(50.13) тәнлијинин хүсуси һәлли

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{k},t)e^{i\vec{k}\vec{r}} \tag{50.15}$$

кими ахтарыла биләр. Буну (50.13)-дә јазсаг,

$$\ddot{\vec{A}}(\vec{k},t) + c^2k^2\vec{A}(\vec{k},t) = 0$$

вә бунун характеристик тәнлији

$$m^2+c^2k^2=0, \text{ бурадан } m=\pm\, ick$$

беләликлә

$$\vec{A}(\vec{k},t) = \vec{a}_1(\vec{k})e^{-ickt} + \vec{a}_2(\vec{k})e^{ickt}$$

олар. Онда (50.15) хүсуси һәлли

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{a}_1(\vec{k})e^{-ickt+i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}_2e^{ickt+i\vec{k}\vec{r}} \tag{50.16}$$

мүстәви далғасы шәклиндә олар.

Максвел тәнликләри хәтти диференсиал тәнликләр олдуғундан (50.13) тәнлијинин үмуми һәлли (50.16) хүсуси һәлләрин суперпозисијасы олар. Дикәр тәрәфдән, квант механикасынын үмуми принсипинә көрә, микросистемин сәрбәст һәрәкәти мәһдуд фәзада баш верирсә, о квантланыр, јә'ни бахылан микросистемин енержи, импулсу вә башга динамик кәмијјәтләри дискрет гијмәтләр алыр. Саһәнин ихтијари $V=L^3$ һәчми илә мәһдуд олдуғуну фәрз етсәк, (50.13) тәнлијинин V һәчминә нормаллашдырылмыш үмуми һәлли (50.16)-ја әсасән

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec{k}}\left\{\vec{a}_1(\vec{k})e^{-i\omega t+i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}_2(k)e^{i\omega t+i\vec{k}\vec{r}}\right\} \tag{50.17}$$

кими јазыла биләр, бурада $\omega=ck$ — далғанын тезлијидир.

(50.17)-нин икинчи һәддиндә $\vec{k}$ –ны $-\vec{k}$ илә әвәз етсәк, һәлл дәјишмәз, чүнки $\vec{k}$ үзрә чәм k_x,k_y,k_z үзрә $(-\infty,+\infty)$ интервалында көтүрүлмүш чәм кими баша дүшүлүр вә белә әвәз чәмдә јалныз һәдләрин ардычыллығыны дәјишмиш олар. Онда

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec{k}}\left\{\vec{a}_1(\vec{k})e^{-i\omega t+i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}_2(-\vec{k})e^{i\omega t-i\vec{k}\vec{r}}\right\}, \tag{50.18}$$

бурада $\vec{a}_1(\vec{k})$ – јајылан вә $\vec{a}_2(-\vec{k})$ –дүшән далғаларын интенсивлијини вә полјарлашманы тә'јин едән комплекс амплитудлар, $\vec{k}$ –далғанын јајылма истигамәтинә јөнәлмиш далға векторудур вә о

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_1,\ \ k_y = \frac{2\pi}{L}n_2,\ \ k_z = \frac{2\pi}{L}n_3 \tag{50.19}$$

кими дискрет гијмәтләр алыр (бах (11.20)), n_1, n_2, n_3–0,1,2,... кими там мүсбәт гијмәтләр алыр.

(50.18) ифадәсиндә $\vec{a}_1(\vec{k}) = \vec{a}(\vec{k})$ вә $\vec{a}_2(-\vec{k}) = a^*(\vec{k})$ әвәзләмәсини гәбул етсәк,

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec{k}}\left\{\vec{a}(\vec{k})e^{-i\omega t+i\vec{k}\vec{r}} + \vec{a}^*(\vec{k})e^{i\omega t-i\vec{k}\vec{r}}\right\} \tag{50.20}$$

олар.

в) Шүаланманын јарым классик нәзәријјәси.

Билдијимиз кими Шрединкер нәзәријјәсиндә зәррәчијин һәрәкәти квантланыр; онун енержиси, импулсу, һәрәкәт мигдары моменти вә башга динамик характеристикалары дискрет гијмәтләр алыр, лакин саһәләрә, хүсуси һалда електромагнит саһәсинә исә классик систем кими бахылыр.

Електромагнит саһәсинин тә'сири алтында олан јүклү зәррәчијин Шрединкер тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}(\breve{\vec{p}} - \frac{e}{æ}\vec{A})^2\Psi + e\varphi\Psi + U(\vec{r})\Psi, \tag{50.21}$$

бурада $\varphi(\vec{r},t)$ вә $\vec{A}(\vec{r},t)$ — електромагнит саһәсинин скалјар вә вектор потенсиалларыдыр.

Биз бу бөлмәдә јалныз атомун шүабурахма вә шүаудма просесләринин тәһлили илә мәшғул олачағыг, башга сөзлә, атомларын шүаланма саһәси илә гаршылыглы тә'сирини өјрәнәчәјик. Шүаланма саһәси исә јалныз $\vec{A}(\vec{r},t)$ вектор потенсиалы илә тәсвир олунур, онун үчүн скалјар потенсиал $\varphi = 0$-дыр.

Шүаланма саһәси енинә саһәдир, онун $\vec{\mathcal{E}}$ вә $\vec{H}$ интенсивлик векторлары саһәнин јајылма истигамәтинә перпендикулјардыр. Бу шәрт ријази олараг (50.14) шәклиндә јазылыр. Беләликлә, бахылын һал үчүн Шрединкер тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m}\breve{\vec{p}}^2 + U(r) \right)\Psi - \frac{e}{mc}\vec{A}\breve{\vec{p}}\Psi + \frac{e^2}{2mc^2}A^2\Psi \qquad (50.22)$$

шәклинә дүшүр.

Шрединкер нәзәријјәсиндә електромагнит саһәси классик систем һесаб олунмасына бахмајараг, мәчбури кечидләрин һесабына атомларын шүабурахма вә шүаудма просесләри үчүн дүзкүн нәтичә алыныр. Бу, бахылан һаллар үчүн ујғунлуг принсипинин өдәнилмәсинин нәтичәсидир.

Квантланмыш шүаланма саһәсинә квант осилјаторлар (саһәнин квантлары – фотонлар) чохлуғу (газы) кими бахмаг олар. Саһәнин һәр бир квант һалында, Бозе – Ејнштејн статистикасына көрә истәнилән сајда фотон ола биләр. Харичи шүаланма саһәсинин варлығы һесабына атом–шүаланма системинин һәр бир квант һалында фотонларын сајы кифајәт гәдәр бөјүк олур. Бу да ујғунлуг принсипинин тәләбинин өдәнилмәсинә кәтирир: квант вә классик нәзәријјәләрин нәтичәләри бир биринин үзәринә дүшүр. Дикәр тәрәфдән, $\vec{A}(\vec{r},t)$ векторунун өдәдији (50.13) тәнлији хәтти тәнлик олдуғундан зәиф интенсивликли шүаланма саһәси һалында да һәр ики нәзәријјә ејни нәтичәләрә кәтирир.

Бу мүлаһизәләр спонтан шүаланма үчүн өз мә'насыны итирир, чүнки спонтан кечидләр харичи електромагнит саһәси олмадығда белә баш верир вә белә кечидләр заманы бир фотон да бурахыла биләр. Бир вә һәтта бир нечә он фотонлу һаллар үчүн ујғунлуг принсипи тәтбиг олуна билмир. Беләликлә шүаланма просесләринин ардычыл квант нәзәријјәсини гурмаг үчүн, јәгин ки, шүаланма саһәсини дә квантламаг лазымдыр. Бу заман һәр ики нөв кечидләрин сәбәби ајдынлашмыш олар.

Атомун шүаланма (шүаудма) еһтималыны һесаблајаг. Јухарыда гејд етдик ки, атомун мәчбури кечидләри һесабына олан шүабурахма вә шүаудма просесләринин еһтималы бир-биринә бәрабәрдир. $\vec{A}(\vec{r},t)$-нин (50.20) ифадәсиндә икинчи һәдд шүабурахма, биринчи һәдд исә шүаудма просесләринә кәтирир. Буна көрә дә атомун јалныз шүаланма просесинин еһтималыны һесабламагла кифајәтләнмәк олар.

(50.22) тәнлијини

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\breve{H}_o + \breve{V})\Psi \qquad (50.23)$$

кими јазаг, бурада

$$\breve{H}_o = \frac{\breve{\vec{p}}^2}{2m} + U(r) \qquad (50.24)$$

шүаланма саһәси олмадығда һәјәчанланмамыш системин (атомун) Һамилтон оператору,

$$\breve{V}(t) = -\frac{e}{mc}(\vec{A}\breve{\vec{p}}) + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 \qquad (50.25)$$

һәјәчанланма операторудур. Шүаланма вә шүаудма просесләри атом системи илә шүаланма саһәси арасындакы бир актлы гаршылыглы тә'сирин нәтичәси олдуғу үчүн бахылан һалда $V(t)$ операторунун биринчи һәддини сахламаг лазымдыр. A^2 илә мүтәнасиб олан һәдд исә ики актлы просесләрә кәтирир (бах §57 вә §58).

Һесабламалары садәләшдирмәк үчүн мүәјјән тезликли далғаларын сечилмиш истигамәтдә шүаланмасы просесинә бахаг. Фәрз едәк ки, атом

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{a}^*(\vec{k})e^{i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} = \vec{A}(\vec{r})e^{i\omega t} \qquad (50.26)$$

илә характеризә олунан шүаланма илә һәјәчанланыр. Һәјәчанланма замана көрә периодик дәјишдијиндән, атомун E_m стасионар һалындан E_n стасионар һалына мәчбури кечидләрин еһтималы § 47-јә көрә

$$W_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\left|V^o_{mn}\right|^2 \delta(\omega - \omega_{mn}) \qquad (50.27)$$

олур, бурада ω-дүшән електромагнит саһәсинин тезлији, $\omega_{mn} = \frac{E^o_m - E^o_n}{\hbar}$ кечид тезлији, E^o_m вә E^o_n – һәјәчанланмамыш системин стасионар һалларынын енержиләри,

$$V^o_{mn} = -\frac{e}{mc}\int \Psi^{o*}_n(\vec{r})\vec{A}(\vec{r})\breve{\vec{p}}\Psi^o_m(\vec{r})(d\vec{r}) = -\frac{e}{mc}\int \Psi^{o*}_n e^{-i\vec{k}\vec{r}}(\vec{a}\breve{\vec{p}})\Psi^o_m(d\vec{r}) \qquad (50.28)$$

кечид матриса елементи, Ψ^o_m вә Ψ^o_n – атомун ујғун стасионар һалларынын далға функсијалары вә ја $\breve{H}^o$ операторунун мәхсуси функсијаларыдыр. $\vec{a} = a\vec{a}_o$ вә

$$J_{nm} = \int \Psi^o_n(\vec{r})e^{-i\vec{k}\vec{r}}\breve{\vec{p}}\Psi^o_m(\vec{r})(d\vec{r}) \qquad (50.29)$$

ишарәләрини гәбул етсәк, (50.28) ифадәсини

$$V^o_{mn} = -\frac{ea}{mc}(\vec{a}_o\vec{J}_{nm}) \qquad (50.30)$$

кими јазмаг олар, бурада $\vec{a}^{o}$ – ваһид вектордур. Оптикада ишыг далғасынын (шүасынын) полјарлашма истигамәти $\vec{\mathcal{E}}$ електрик интенсивлик векторунун истигамәти илә тә'јин олунур. (50.12)- дән $\vec{\mathcal{E}}$-нин истигамәти $\vec{A}$ вектор потенсиалын истигамәти үзәринә дүшдүјүндән $\vec{a}^{o}$ вектору шүаланманын полјарлашма истигамәтини тә'јин едән ваһид вектор олур. a–далғанын амплитудунун мүтләг гијмәтидир.

(50.30)-у (50.27)-дә јазсаг, m– һалындан n– һалына кечид еһтималы

$$W_{mn}=\frac{2\pi}{\hbar^2}\frac{e^2a^2}{m^2c^2}\left|\vec{a}^{o}\vec{J}_{mn}\right|^2\delta(\omega_{mn}-\omega). \qquad (50.31)$$

Шүаланманын интенсивлијини характеризә едән a^2-ны

$$\vec{S}=\frac{c}{4\pi}\left[\vec{\mathcal{E}}\vec{H}\right] \qquad (50.32)$$

Умов–Појтинг векторунун көмәјилә гијмәтләндирмәк олар. Билдијимиз кими, Умов–Појтинг вектору мәнбәји әһатә едән сферанын ваһид сәтһиндән ваһид заманда кечән шүаланма енержиси селидир. (50.12) вә (50.26) ифадәләриндән $\vec{\mathcal{E}}$ вә $\vec{H}$ интенсивлик векторларынын һәгиги һиссәси үчүн

$$\vec{\mathcal{E}}=\frac{\omega}{c}a\vec{a}^{o}\sin(\omega t-\vec{k}\vec{r}),\quad \vec{H}=a\left[\vec{a}^{o}\vec{k}\right]\sin(\omega t-\vec{k}\vec{r})$$

$\vec{\mathcal{E}}$ вә $\vec{H}$-ын бу гијмәтини (50.32)-дә јазыб, алынан ифадәдән замана (рәгсин T периодуна) көрә орта гијмәт көтүрсәк, шүаланан енержи селинин мүтләг гијмәти үчүн

$$S=\frac{\omega k a^2}{8\pi}=\frac{\omega^2a^2}{8\pi c} \qquad (50.33)$$

алынар (бурада $k=\dfrac{\omega}{c}$). S-и, ваһид заманда ваһид сәтһдән кечән ишыг селини, шүаланманын спектрал сыхлығы $\rho(\omega,T)$ илә дә ифадә етмәк олар

$$S=\frac{\omega^2a^2}{8\pi c}=\rho(\omega)c, \qquad (50.34)$$

бурада c –ишыг сүр'әтидир. (50.34)-дән

$$a^2=\frac{8\pi c^2}{\omega^2}\rho(\omega).$$

Буну (50.31)-дә јазсаг,

$$W_{mn}=\frac{16\pi^2e^2}{\hbar^2m^2\omega^2}\rho(\omega)\left|\vec{a}^{o}\vec{J}_{mn}\right|^2\delta(\omega-\omega_{mn}). \qquad (50.35)$$

Бурада $\delta(\omega-\omega_{mn})$ функсијанын иштиракы шүаланан ишығын ω тезлијинин атомун $\omega_{mn}=\dfrac{E_m-E_n}{\hbar}$ кечид тезлијинә бәрабәр олдуғуну көстәрир.

Гејд едәк ки, шүаланманын атом системи тәрәфиндән удулма еһтималы үчүн дә ејнилә бу чүр ифадә алыныр, орада јалныз m илә n индексләринин јерини дәјишмәк лазымдыр.

Шүаланан вә ја удулан ишыг далғаларынын λ далға узунлуғу атомун өлчүләриндән кифајәт гәдәр бөјүк олан һалларда (50.29) илә верилмиш $\vec{J}_{mn}$ матриса елементини һесабламаг олар. Мәсәлән, көрүнән ишыг үчүн $k=\dfrac{2\pi}{\lambda}\sim10^5$ $см^{-1}$, атомун өлчүсү исә $r\sim10^{-8}$ $см$ олдуғундан $kr\sim10^{-3}$ тәртибиндә кәмијјәт олур. Демәли, белә һалларда $e^{-i\vec{k}\vec{r}}$ вуруғуну $i\vec{k}\vec{r}$-ин үстләринә көрә сыраја ајырмаг,

$$e^{-i\vec{k}\vec{r}}=1-i\vec{k}\vec{r}+\frac{1}{2!}(i\vec{k}\vec{r})^2+\ldots$$

вә сыранын биринчи ики һәдди илә кифајәтләнмәк олар:

$$\vec{J}_{nm}=\int\Psi_n^{o*}(\vec{r})\hat{\vec{p}}\Psi_m^{o}(\vec{r})(d\vec{r})-i\int\Psi_n^{o*}(\vec{k}\vec{r})\hat{\vec{p}}\Psi_m^{o}(\vec{r})(d\vec{r})=p_{nm}+i((\vec{k}\vec{r})\vec{p})_{nm}. \quad (50.36)$$

$\vec{p}_{nm}$–импулс операторунун матриса елементидир, $((\vec{k}\vec{r})\hat{\vec{p}})_{nm}$ матриса елементини исә

$$((\vec{k}\vec{r})\hat{\vec{p}})_{nm}=m((\vec{k}\vec{r})\frac{d\vec{r}}{dt})_{nm}=\frac{m}{2}\frac{d}{dt}((\vec{k}\vec{r})\vec{r})_{nm}-\frac{m}{2}\left(\left[\vec{k}\left[\vec{r}\,\frac{d\vec{r}}{dt}\right]\right]\right)_{nm} \qquad (50.37)$$

кими ифадә етмәк олар. Ихтијари оператор үчүн матриса шәклиндә јазылмыш

$$\breve{L}_{nm}=\left(\frac{\partial\breve{L}}{\partial t}\right)_{nm}+\frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}_o\breve{L}\right]_{nm}$$

һәрәкәт тәнлијинин көмәјилә (бурада $\breve{H}_o$ оператору (50.21) илә верилмишдир) $p_{nm}=m(\dot{\vec{r}})_{nm}=m\left(\dfrac{d\vec{r}}{dt}\right)_{nm}$ вә $\dfrac{d}{dt}((\vec{k}\vec{r})\vec{r})_{nm}$ матриса елементләри үчүн ујғун оларaг

$$p_{nm} = im\omega_{nm}\vec r_{nm}, \qquad \frac{d}{dt}((\vec k\vec r)\vec r)_{nm} = i\omega_{nm}((\vec k\vec r)r)_{nm}$$

ифадәләри алыныр. Беләликлә

$$e\vec J_{nm} = i\omega_{nm} me\vec r_{nm} - \frac{m\omega_{mn}}{2} e((\vec k\vec r)\vec r)_{nm} + \frac{ie}{2}\left(\left[\vec k\left[\vec r\vec p\right]\right]\right)_{nm} \tag{50.38}$$

олур. Бу векторун проjексиjалары үчүн

$$(eJ_\alpha)_{nm} = im\omega_{mn}(r_\alpha)_{nm} - \frac{m\omega_{mn}}{2} e((\vec k\vec r)r_\alpha)_{nm} + \frac{ie}{2}\left(\left[\vec k\left[\vec r\vec p\right]\right]_\alpha\right)_{nm} \tag{50.39}$$

(бурада α=1,2,3). Классик физикада $e\vec r=\vec d$ – системин дипол моменти, $\vec M = -\frac{e}{2mc}[\vec r\vec p] = -\frac{e}{2mc}\vec L$ –магнит моменти ($\vec L=[\vec r\vec p]$– һәрәкәт мигдары моменти) вә $Q_{\beta\alpha} = \frac{e^2}{2} r_\beta r_\alpha$ исә квадрупол моменти (тензору) олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$(eJ_\alpha)_{nm} = im\omega_{mn}(d_\alpha)_{nm} - im\omega_{nm}\left(\left[\vec k^o \vec M\right]_\alpha\right)_{nm} - m\omega_{mn}(k^o_\beta Q_{\beta\alpha})_{nm} \tag{50.40}$$

олар (бурада $\vec k^o = \frac{\vec k}{|\vec k|}$).

(50.40) бәрабәрлијиндә биринчи һәд атомун дипол шүаланмасыны, икинчи һәд магнит дипол шүаланмасыны вә үчүнчү һәд исә квадрупол шүаланмасыны тәсвир едир.

Атомун дипол шүаланмасы үзәриндә дајанаг, jә'ни (50.40) ифадәсиндә биринчи һәдлә мәһдудлашаг, онда

$$e\vec J_{nm} = im\omega_{mn}e\vec r_{nm} \tag{50.41}$$

олар. Бу заман (50.35) ифадәсини $\omega_{mn} = \frac{E_m-E_n}{\hbar}$ тезлијинин шүаланмасы үчүн Ејнштејн әмсалы илә ифадә етмәк олар:

$$W_{nm}= \frac{4\pi^2}{\hbar^2}\rho(\omega_{nm})\left|\vec a^o\vec d_{nm}\right|^2 = B_{nm}\rho(\omega_{mn}), \tag{50.42}$$

бурада e–јүкүн Гаусс ваһиди $\frac{e}{\sqrt{4\pi}}$ илә әвәз олунмушдур.

Шүаланан далғанын јајылма истигамәтинин $d\Omega=\sin d\theta d\varphi$ чисим буҹағы дахилинә олма еһтималы исә

$$dW_{nm}=W_{nm}\; d\Omega = \rho(\omega_{mn})B_{nm}d\Omega \tag{50.43}$$

вә jа

$$W_{nm} = \rho(\omega_{mn})\int B_{nm}d\Omega \tag{50.43'}$$

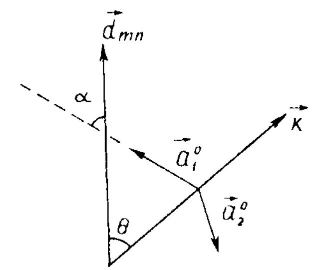
олар. (50.42)-дән алыныр ки, мәҹбури шүаланманын Ејнштејн әмсалы

$$B_{nm} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}\left|\vec a^o\vec d_{nm}\right|^2 \tag{50.44}$$

олур. Атомун електрик (дипол) моменти илә шүаланманын полјарлашма истигамәтини көстәрән $\vec a^o$ вектору арасындакы буҹағы α илә ишарә етсәк (шәкил 26),

$$B_{nm} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}|d_{nm}|^2\cos^2\alpha. \tag{50.45}$$

Шүаланма саһәси енинә саһә олдуғундан $\vec a^o$ вектору шүанын јајылма истигамәти $\vec k$-ја перпендикулјар олмалыдыр. Јәгин ки, ики полјарлашма истигамәтиндән бири ($\vec d_{nm}$, $\vec k$) мүстәвисиндә $\vec k$ векторуна перпендикулјар: $\vec a^o = \vec a^o_1$, икинҹиси исә һәмин мүстәвинин өзүнә перпендикулјар $\vec a^o = \vec a^o_2$ олар (шәкил 26).



Шәкил 26. Шүаланманын ихтијари $\vec a_1$ вә $\vec a_2$ полјарлашма истигамәтләринин сечилмәси.

$\vec a^o = \vec a^o_1$ оланда $\alpha = \frac{\pi}{2}-\theta$

вә

$$\cos\alpha = \cos(\frac{\pi}{2}-\theta) = \sin\,\theta$$

$$B^{(1)}_{nm} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2}|d_{nm}|^2\sin^2\theta, \tag{50.46}$$

$\vec a^o=\vec a^o_2$ оланда исә $\alpha=\frac{\pi}{2}$ олдуғундан

$$B^{(2)}_{nm}=0$$

олур. Демәли, атомун шүаландырдығы ишығын полјарлашма истигамәтини тә'јин едән $\vec{\mathcal{E}}$ електрик интенсивлик вектору дипол шүаланмасы заманы ($\vec{d}_{nm}$, $\vec{k}$) мүстәвисиндә јерләшир.

Мәчбури вә спонтан шүаланмалары характеризә едән, B_{nm} вә A_{nm} әмсалларыны әлагәләндирән (50.10) мүнасибәтинин көмәјилә $d\Omega$ чисим бучағы алтында баш верән спонтан шүаланманын еһтималыны да тапмаг олар. (50.10)-а әсасән

$$dW_{nm}^{(\text{сп})} = A_{nm} d\Omega = \frac{\hbar\omega_{mn}^3}{8\pi^2 c^3} B_{nm} d\Omega \tag{50.48}$$

$\vec{a}^{\,o} = \vec{a}_1^{\,o}$ оланда (50.44)-ә көрә

$$dW_{nm}^{(1)\text{сп}} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\left|d_{nm}\right|^2 \sin^2\theta d\Omega \tag{50.49}$$

вә $\vec{a}^{\,o} = \vec{a}_2^{\,o}$ оланда исә

$$dW^{(2)\text{сп}} = 0 \tag{50.50}$$

олар.

E_m сәвијјәсиндән E_n сәвијјәсинә кечид заманы спонтан шүаланманын там еһтималы

$$W_{mn}^{\text{сп}} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\left|d_{nm}\right|^2 \int_0^{\pi} \sin^2\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

вә $\cos\theta = x$ гәбул етсәк,

$$W_{mn}^{\text{сп}} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\left|d_{nm}\right|^2 2\pi \int_{-1}^{1}(1-x^2)dx = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3}\left|d_{nm}\right|^2 \tag{50.51}$$

олар. Атомар системдә ω_{mn} тезлијинин там шүаланма еһтималы исә

$$W_{mn}^{\text{сп}} = A_{nm} = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3}\left|d_{nm}\right|^2 \tag{50.52}$$

кими ифадә олунар.

г) Икинчи квантланма методу.

Биз индијә гәдәр атом вә атом системләринә енержи, импулс вә һәрәкәт мигдары моменти дискрет дәјишән квант механики систем, електромагнит саһәсинә исә классик мәнбәјин јаратдығы классик саһә кими бахмышыг. Атом системләри бир квант һалындан дикәринә кечдикдә шүаландырдығы вә ја удduғу електромагнит саһәси илә әтрафында јаранан електромагнит саһәсинин тезлик спектрләри, јәгин ки, ејни характерли олмур. Биринчи һалда електромагнит саһәсинин спектри дискрет гурулуша (мәнбәјин квант кечидләринә ујғун), икинчи һалда исә кәсилмәз гурулуша малик олур. Башга сөзлә, биринчи спектр квант, икинчи спектр исә классик характер дашыјыр. Квант мәнбәләрин бурахдығы (удduғу) електромагнит саһәсинә классик саһә кими бахдығда онларын иштиракы илә баш верән физики һадисәләри тәсвир етмәк үчүн индијә кими истифадә етдијимиз тәдгиг методу јарамыр. Белә мәсәләләрин һәллиндә, јәгин ки, квант системи һалынын дәјишмәсинин саһә мәнбәјинә тә'сирини нәзәрә алмаг вә електромагнит саһәсинә квант системи кими бахмаг лазым кәлир.

Микросистемләрин мүшаһидә олунан хассәләрини там изаһ етмәк үчүн Нјутонун корпускулјар тәсвириндән Де-Бројл–Шрединкерин далға тәсвиринә кечмәли олдуг вә көстәрдик ки, микросистемләр корпускул далға дуализминә маликдир. Елементар зәррәчикләрин вә атомар системләрин далға хассәләринә малик олмасы бахымындан апарылан тәдгигатлар (Шрединкер нәзәријјәси) көстәрди ки, атомар системләрин вә мәһдуд фәзада сәрбәст һәрәкәт едән зәррәчикләрин енержиси, импулсу вә дикәр динамик кәмијјәтләри дискрет гијмәтләр алыр, јә'ни онларын һәрәкәти квантланыр. Бу квантланмаја *биринчи квантланма* дејилир.

Билдијимиз кими далға-зәррәчик дуализми һәр зәррәчијә ујғун саһә, һәр саһәјә ујғун зәррәчик гаршы гојур. Лакин зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сирә онлара ујғун де-Бројл далғалары саһәси илә тә'сири дашыјан саһә арасындакы гаршылыглы тә'сир кими бахдыгда, тәбиәтдә тәсадүф олунан физики һадисәләрин там нәзәријјәсини гурмаг (спонтан шүаланманын нәзәријјәси кими) ја мүмкүн олмур, ја да мәсәләнин һәлли бир сыра ријази чәтинликләрә вә физики анлашылмазлыглары кәтирир.

Буна көрә дә саһәләр арасындакы гаршылыглы тә'сири онлара ујғун зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сирлә әвәз етмәк зәруријјәти ортаја чыхыр. Зәррәчикләрин гаршылыглы тә'сирини ики күрәнин тоггушмасы бахымындан тәһлил етдикдә, физики һадисәләрин һесабланмасы вә анализи хејли асанлашыр вә онларын там дәгиг нәзәријјәсини гурмаға имкан верир.

Саһәнин она ујғун ејни зәррәчикләр системи илә әвәз олунмасы методу *икинчи квантланма* адланыр. Бу метод васитәси илә, тәбиәтиндән асылы олмајараг, истәнилән саһәни ујғун ејни зәррәчикләр системи, о чүмләдән де-Бројл далғалары саһәсини (белә саһәләр спинор саһәләр дә адланыр) фермионлар, електромагнит саһәсини исә фотонлар системи илә әвәз етмәк мүмкүн олур.

Бурада спинор саһәләрин квантланмасында алынан антикоммутатив мүнасибәтләри чыхармагла кифајәтләниб, електромагнит саһәсинин квантланмасы үзәриндә мүфәссәл дајаначағыг.

Икинчи квантланма методунда сәрбәст саһәјә ујғун далға тәнлијинин һәлли олан далға функсијалары, јә'ни саһә вектору (спинор саһәләрдә $\Psi(\vec{r},t)$ функсија, електромагнит саһәсиндә исә $\vec{A}(\vec{r},t)$ -вектор потенсиалы) системин һал векторуна тә'сир едән вә онун һалынын дәјишмәсинә сәбәб олан оператор гәбул олунур. Саһә вектору операторунун маһиjjәтини ajдынлашдырмаг вә онун һал векторуна тә'сир ганунуну тапмаг ишини, үмумилиjи позмадан, електромагнит саһәси үчүн көрмәк, алынан нәтичәләри дикәр саһәләр үчүн үмумиләшдирмәк олар. Бу мәгсәдлә әввәлчә (50.20)-дә $\vec{a}(\vec{k})$ (еләчә дә $\vec{a}^*(\vec{k})$) амплитудуну

$$\vec{a}(\vec{k}) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} \sum_{\lambda} \vec{a}^{o\lambda}(\vec{k}) C(\vec{k}, \lambda) \tag{50.53}$$

ифадәси илә әвәз едәк, бурада $\vec{a}^{o\lambda}(\vec{k})$ –шүаланманын полjарлашма истигамәтини тә'jин едән ваһид вектор (λ=1,2), $C(\vec{k}, \lambda) - \vec{A}(\vec{r}, t)$-вектор потенсиалын оператор хассәләрини өзүндә әкс етдирән вуругдур. Бу һалда (50.20) ифадәси

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}} \left\{ \vec{a}^{o\lambda} C(\vec{k}, \lambda) e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} + a^{*o\lambda} C^{+}(\vec{k}, \lambda) e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}} \right\}. \tag{50.54}$$

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ оператору квант механикасынын оператор һәрәкәт тәнлиjини өдәмәлидир. О, ашкар шәкилдә замандан асылы олдуғу үчүн оператор һәрәкәт тәнлиjи Һејзенберг тәсвириндә jазылар (бах § 25):

$$\frac{\partial \breve{\vec{A}}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left[\breve{H}\breve{\vec{A}}\right] = \frac{i}{h}(\breve{H}\breve{\vec{A}} - \breve{\vec{A}}\breve{H}). \tag{50.55}$$

Бурада

$$\breve{H} = \frac{1}{8\pi}\int\left(\vec{\mathcal{E}}^2 + H^2\right)(d\vec{r}) = \frac{1}{8\pi}\int\left\{\left(\left(-\frac{1}{c}\frac{\partial A}{\partial t}\right) + \left[\vec{\nabla}\vec{A}\right]\right)^2\right\}(d\vec{r}) \tag{50.56}$$

електромагнит саһәсинин Һамилтон операторудур.

Електрик саһәсинин

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -i\sum_{\vec{k}, \lambda} \omega \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} \left(a^{o\lambda} C_{k\lambda} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} - \vec{a}^{o*\lambda} C^{+}_{k\lambda} e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}}\right) \tag{50.57}$$

вә магнит саһәсинин

$$\vec{H} = \left[\vec{\nabla}\vec{A}\right] = i\sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} \left\{ \left[\vec{k}\vec{a}^{o\lambda}\right] C_{k\lambda} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} - \left[\vec{k}\vec{a}^{o*\lambda}\right] e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}} \right\} \tag{50.58}$$

интенсив векторларын ифадәләрини (50.56)-да jазыб, саһәнин

$$(\vec{k}\vec{a}^{o\lambda}) = (\vec{k}\vec{a}^{o*\lambda}) = 0$$

енинә шәртини нәзәрә алсаг (вә бурада $C(k, \lambda) = C_{k\lambda}$ кими ишарә олунур)

$$\frac{1}{V}\int e^{i(\vec{k} \pm \vec{k}')\vec{r}}(d\vec{r}) = \delta_{\vec{k}, \pm\vec{k}'} \tag{50.59}$$

вә δ-символунун хассәсинә әсасән $\vec{k}'$ үзрә чәми көтүрсәк, $\breve{H}$ үчүн

$$\breve{H} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}, \lambda} \hbar\omega(C_{k\lambda}C^{+}_{k\lambda} + C^{+}_{k\lambda}C_{k\lambda}) \tag{50.60}$$

ифадәси алынар. Һесабламалары садәләшдирмәк мәгсәди илә електромагнит саһәсинә классик саһә кими бахмағы давам етдирәк. Далғанын амплитудуну тә'jин едән $C_{k\lambda}$ вә $C^{+}_{k\lambda}$ кәмиjjәтләринә ади әдәд кими бахаг. Онда онлар бир-бирилә коммутасиjа едәр. Дикәр тәрәфдән, үмумилиjи позмадан, мүлаһизәләри (50.20)-дәки чәмин ихтиjары бир һәддин әсасында гурмаг олар; jә'ни

$$\breve{H} = \sum_{k', \lambda'} \hbar\omega' C^{+}_{k'\lambda'} C_{k'\lambda'}$$

$$\breve{A} \sim C_{k\lambda} e^{-i\omega t + ikr}$$

көтүрмәк олар. $\breve{H}$ вә $\breve{A}$ -нын бу ифадәләрини (50.55)-дә jазыб, һәр тәрәфи $e^{-i\omega t + ikr}$ ихтисар етсәк,

$$-\omega C_{k\lambda} = \sum_{k'\lambda'} \omega'(C^{+}_{k'\lambda'}C_{k'\lambda'}C_{k\lambda} - C_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'}C_{k'\lambda'}). \tag{50.61}$$

Көстәрмәк олар ки, (50.61) тәнлиjинин ики һәлли вар. Онлары алмаг үчүн чәмин алтындакы ифадәjә $C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda}C_{k'\lambda'}$ һәддини әлавә едиб, чыхаг:

$$-\omega C_{k\lambda} = \sum_{k'\lambda'} \omega'(C^{+}_{k'\lambda'}C_{k'\lambda}C_{k\lambda} \mp C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda}C_{k'\lambda'} \pm$$
$$\pm C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda}C_{k'\lambda'} - C_{k\lambda}C_{k'\lambda'}C_{k'\lambda'}). \tag{50.62}$$

Бу ахырынчы ифадәни ашағыдакы кими ики чүр груплашдырмаг олар:

$$-\omega C_{k\lambda} = \sum_{k'\lambda'} \omega'\left\{C^{+}_{k'\lambda'}(C_{k'\lambda'}C_{k\lambda} \mp C_{k\lambda}C_{k'\lambda'}) - (C_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} \mp C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda})C_{k'\lambda'}\right\} \tag{50.62'}$$

(50.62′) тәнлиjи

$$C_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} - C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{50.63}$$
$$C_{k'\lambda'}C_{k\lambda} - C_{k\lambda}C_{k'\lambda'} = 0$$

вә jа

$$C_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} + C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{50.64}$$
$$C_{k\lambda}C_{k'\lambda'} + C_{k'\lambda'}C_{k\lambda} = 0$$

шәртләри дахилиндә еjнилик кими өдәнилир.

(50.20)-дә $\vec{A}$ -ны $C^{+}_{k\lambda}e^{i\omega t-ikr}$ илә мүтәнасиб көтүрмүш олсајдыг

$$C_{k'\lambda'}C^{+}_{k\lambda} - C^{+}_{k\lambda}C_{k'\lambda'} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \qquad (50.63')$$
$$C^{+}_{k'\lambda'}C^{+}_{k\lambda} - C^{+}_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} = 0$$

вә ја

$$C_{k'\lambda'}C^{+}_{k\lambda} + C^{+}_{k\lambda}C_{k'\lambda'} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \qquad (50.64)$$
$$C^{+}_{k'\lambda'}C^{+}_{k\lambda} + C^{+}_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} = 0$$

алардыг. Беләликлә $C_{k\lambda}$ вә $C^{+}_{k\lambda}$ кәмијјәтләри ашағыдакы коммутатив

$$C_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} - C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \qquad (50.65)$$
$$C_{k\lambda}C_{k'\lambda'} - C_{k'\lambda'}C_{k\lambda} = 0$$
$$C^{+}_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} - C^{+}_{k'\lambda'}C^{+}_{k\lambda} = 0$$

вә антикоммутатив

$$C_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} + C^{+}_{k'\lambda'}C_{k\lambda} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \qquad (50.66)$$
$$C_{k\lambda}C_{k'\lambda'} + C_{k'\lambda'}C_{k\lambda} = 0$$
$$C^{+}_{k\lambda}C^{+}_{k'\lambda'} + C^{+}_{k'\lambda'}C^{+}_{k\lambda} = 0$$

мүнасибәтләри өдәјир.

(50.65) вә (50.66) мүнасибәтләри $C_{k\lambda}$ вә $C^{+}_{k\lambda}$ кәмијјәтләринин ади әдәд јох, операторлар олдуғуну көстәрир. Индијә гәдәр таныш олдуғумуз енержи, импулс, һәрәкәт мигдары моменти вә башга физики кәмијјәтләрә ујғун операторларын тә'сир ганунлары бизә мә'лумдур. Онларын системин һал векторуна (далға функсијасына) тә'сири ујғун кәмијјәтләрин дәјишмәси нәтичәсиндә системин һалынын дәјишмәсинә кәтирир. Һалын белә дәјишмәләри заманы системдә зәррәчикләрин сајы сабит галыр. Лакин, јәгин ки, системдә зәррәчикләрин сајынын дәјишмәси дә онун һалыны дәјишдирә биләр. Атом системләри тәрәфиндән фотонларын бурахылыб, удулмасы, зәррәчикләрин бир-биринә чеврилмәси (мәсәлән, електрон-позитрон чүтү енержисинин гијмәтиндән асылы олараг фотонлара, башга нөв фермионлара, барионлара, адронлара вә и.а. чеврилә биләр) просесләриндә гаршылыглы тә'сир нәтичәсиндә зәррәчикләрин сајы дәјишир, бир нөв зәррәчикләр јох олур, дикәр нөв зәррәчикләр јараныр.

Биз индијә гәдәр бу чүр просесләри өјрәнмәмишик вә өјрәнә дә билмәздик, чүнки бизим әлимиздә зәррәчикләрин сајынын дәјишмәсини тәсвир едән нәзәријјә јох иди.

Белә һадисәләри тәсвир етмәк үчүн зәррәчикләрин сајынын дәјишмәсинә кәтирән просесләри тәсвир едән нәзәријјә гурмаг, квант механикасына бу дәјишмәни ичра едән оператор дахил етмәк лазымдыр.

Асанлыгла көстәрмәк олар ки, (50.65) вә (50.66) јердәјишмә мүнасибәтләрини өдәјән $C_{k\lambda}$ вә $C^{+}_{k\lambda}$ операторлары бу нөв оператолардыр.

Квант-механики системин һалынын дәјишмәсини тәсвир едән һал вектору, координат вә замандан башга зәррәчикләрин сајындан да асылы ола биләр:

$$\Psi = \Psi(x,y,z,t,N), \qquad (50.67)$$

бурада N–системдәки зәррәчикләрин сајыдыр. Зәррәчикләрин сајынын бу ва ја башга сәбәбдән дәјишмәси фәзанын ихтијари нөгтәсиндә истәнилән заман баш верә биләр, јә'ни N заман вә координатларын функсијасы ола билмәз. она көрә дә Ψ һал векторуну һәмишә $\Psi(x,y,z,t)$ вә $\Phi(N)$ функсијаларынын һасили кими көтүрмәк олар:

$$\Psi = \Psi(x,y,z,t)\Phi(N). \qquad (50.68)$$

Дикәр тәрәфдән, $C_{k\lambda}$ вә $C^{+}_{k\lambda}$ операторларынын $\Phi(N)$-ә тә'сири јалныз $(\vec{k},\lambda)$ индексләри илә тә'јин олунан һалдакы зәррәчикләрин сајынын дәјишмәсинә кәтирдијиндән вә мүхтәлиф һалларда сајын дәјишмәси бир-бириндән асылы олмадығындан

$$\Phi(N) = \Phi(N_{k\lambda}, N_{k'\lambda'},\ldots, N_{k''\lambda''}) = \Phi(N_{k\lambda})\,\Phi(N_{k'\lambda'})\ldots\,\Phi(N_{k''\lambda''}) \quad (50.69)$$

кими јазыла биләр.

Гејд едәк ки, (50.65) јердәјишмә мүнасибәтләри спини $\hbar$-ын там мисилләринә (0,1,2,...) бәрабәр олан зәррәчикләрә (бозонлара) ујғун саһәнин квантланмасыны характеризә едир вә Бизе-Ејнштејн статистикасына кәтирир. (50.66) мүнасибәтләри исә спини јарым там ($1/2\cdot\hbar$, $3/2\cdot\hbar$, $5/2\cdot\hbar$,...) олан зәррәчикләрә ујғун саһәнин квантланмасыны характеризә едир вә Ферми–Дирак статистикасына кәтирир.

(50.65)-дән көрүнүр ки, јалныз ејни бир импулса ($\vec{k}$) вә поліарлашмаја (λ) ујғун операторлар бир-бирилә коммутасија етмир:

$$C_{k\lambda}C^{+}_{k\lambda} - C^{+}_{k\lambda}C_{k\lambda} = 1, \qquad (50.70)$$

јә'ни бири дикәринә нәзәрән оператор олур. Мүхтәлиф индексләрә ујғун операторлар исә бир-биринә нәзәрән өзләрини ади әдәдләр кими апарыр.

$C_{k\lambda}$ вә $C^{+}_{k\lambda}$ операторларын физики маһијјәтини вә тә'сир ганунуну мүәјјән етмәк үчүн $\breve{N}_{k\lambda} = C^{+}_{k\lambda}C_{k\lambda}$ операторунун $N_{k\lambda}$ мәхсуси гијмәтинә ујғун нормаланмыш мәхсуси функсијасыны $\Phi(N_{k\lambda})$ илә ишарә едәк:

$$\breve{N}_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = C^{+}_{k\lambda}C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = N_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}). \qquad (50.71)$$

Бу бәрбәрлији солдан $\Phi^*(N_{k\lambda})$ функсијасына вурандан сонра, зәррәчикләр сајы фәзасы үзрә интеграллајыб, $\Phi(N_{k\lambda})$ үчүн

$$(\Phi(N_{k\lambda}),\ \Phi(N_{k\lambda}))=1 \tag{50.72}$$

нормаланма шәртини нәзәрә алсаг,

$$N_{k\lambda} = (\Phi(N_{k\lambda}), \breve{N}_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})) = (\Phi(N_{k\lambda}), C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})) \tag{50.73}$$

алынар. Һәр истәнилән оператора ермит гошма оператор гаршы гојула биләр – теоремине әсасән (50.73)-дән

$$N_{k\lambda} = (C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}), C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})) = (C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}), C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}))\,. \tag{50.74}$$

јә'ни $\breve{N}_{k\lambda}$ операторунун мәхсуси гијмәтләри һәмишә мүсбәтдир нәтичәсинә кәлирик.

Көстәрәк ки, $\Phi' = C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})$ вә $\Phi'' = C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})$ функсијалары да $\breve{N}_{k\lambda}$ операторунун мәхсуси функсијаларыдыр. Доғрудан да, (50.69)-дан

$$\begin{aligned}\breve{N}_{k\lambda}\Phi' &= C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = C_{k\lambda}(C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}-1)\ \Phi(N_{k\lambda}) = \\ &= (N_{k\lambda}-1)C_{k\lambda}\Phi = (N_{k\lambda}-1)\Phi', \\ \breve{N}_{k\lambda}\Phi'' &= C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = C^+_{k\lambda}(1+C^+_{k\lambda}C_{k\lambda})\Phi(N_{k\lambda}) = \\ &= (1+N_{k\lambda})C^+_{k\lambda}\Phi = (1+N_{k\lambda})\Phi''.\end{aligned}$$

Беләликлә, Φ' вә Φ'' функсијалары $\breve{N}_{k\lambda}$ операторунун, ујғун оларағ, $N_{k\lambda}-1$ вә $N_{k\lambda}+1$ мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијалары олур. Башга сөзлә, $C_{k\lambda}$-нын $\Phi(N_{k\lambda})$-ја тә'сири $N_{k\lambda}-1$ мәхсуси гијмәтинә ујғун $\Phi(N_{k\lambda}-1)$ мәхсуси функсијасына, $C^+_{k\lambda}$-нин $\Phi(N_{k\lambda})$-ја тә'сири исә $N_{k\lambda}+1$ мәхсуси гијмәтинә ујғун $\Phi(N_{k\lambda}+1)$ мәхсуси функсијасына кәтирир

$$C_{k\lambda}\ \Phi(N_{k\lambda})=a_1\Phi(N_{k\lambda}-1), \tag{50.75}$$

$$C^+_{k\lambda}\ \Phi(N_{k\lambda})=a_2\Phi(N_{k\lambda}+1).$$

Бурадан чыхыр ки, $C_{k\lambda}$ вә $C^+_{k\lambda}$ операторларын јалныз

$$(\Phi(N_{k\lambda}-1), C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})) = \langle N_{k\lambda}-1|C_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle = a_1\,, \tag{50.76}$$

$$(\Phi(N_{k\lambda}+1), C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})) = \langle N_{k\lambda}+1|C^+_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle = a_2$$

матриса елементләри сыфырдан фәргли олур. $C_{k\lambda}$ операторунун $\Phi(N_{k\lambda})$-ја тә'сири $\Phi(N_{k\lambda})$ һалыны $\Phi(N_{k\lambda}-1)$ һалына, $C^+_{k\lambda}$-нын тә'сири исә

$\Phi(N_{k\lambda})$ һалыны $\Phi(N_{k\lambda}+1)$ һалына чевирир: $C_{k\lambda}$ оператору бахылан һалда фотонларын сајынын бир ваһид азалмасына, $C^+_{k\lambda}$ оператору исә бир ваһид артмасына кәтирир, јә'ни $C_{k\lambda}$ фотонун удулма, $C^+_{k\lambda}$ исә фотонун доғулма (јаратма) оператору олур.

a_1 вә a_2 сабитләрини тапмаг үчүн (50.73)-ү

$$N_{k\lambda} = \langle N_{k\lambda}|C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle = \sum_{N_{k'\lambda'}} \langle N_{k\lambda}|C^+_{k\lambda}|N_{k'\lambda'}\rangle\ \langle N_{k'\lambda'}|C_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle$$

шәклиндә јазаг. $N_{k'\lambda'}$ үзрә чәм апаранда јалныз (50.76) илә верилмиш матриса елементләринин сыфырдан фәргли галдығыны вә ермит гошма операторун јазылма гајдасыны нәзәрә алсаг,

$$N_{k\lambda} = \langle N_{k\lambda}-1|C^+_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle\ \langle N_{k\lambda}-1|C_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle = \left|\langle N_{k\lambda}-1|C_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle\right|^2, \tag{50.77}$$

$$N_{k\lambda}+1 = \langle N_{k\lambda}+1|C^+_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle\ \langle N_{k\lambda}+1|C^+_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle = \left|\langle N_{k\lambda}+1|C^+_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle\right|^2$$

алынар. Бурадан исә $C_{k\lambda}$ вә $C^+_{k\lambda}$-нын тә'сир ганунлары үчүн (50.77)-ин биринчисиндән

$$C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda}}\,\Phi(N_{k\lambda}-1)\,, \tag{50.78.1}$$

икинчисиндән исә

$$C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda}+1}\,\Phi(N_{k\lambda}+1) \tag{50.78.2}$$

алыныр.

(50.78.1) бәрабәрлијинә $C^+_{k\lambda}$ вә (50.78.2)-јә исә $C_{k\lambda}$ операторлары илә солдан тә'сир етсәк,

$$C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda}}\,C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}-1) = N_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda})\,, \tag{50.79}$$

$$C_{k\lambda}C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k\lambda}+1}\ C_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}+1) = (N_{k\lambda}+1)\Phi(N_{k\lambda})$$

алыныр. Бу ахырынчылар исә (50.70) мүнасибәтинә кәтирир. Доғрудан да (50.79)-да ашағыдакы бәрабәрликдән јухарыдакыны тәрәф-тәрәфә чыхсаг,

$$(C_{k\lambda}C^+_{k\lambda} - C^+_{k\lambda}C_{k\lambda})\Phi(N_{k\lambda}) = (N_{k\lambda}+1-N_{k\lambda})\Phi(N_{k\lambda}) = 1\cdot\Phi(N_{k\lambda})$$

вә ја оператор тәнлији шәклиндә

$$C_{k\lambda}C^+_{k\lambda} - C^+_{k\lambda}C_{k\lambda} = 1$$

алынар.

Инди дә шүаланма саһәсинин (50.60) илә верилмиш $\breve{H}$ Һамилтон операторунун $\Phi(N_{k\lambda})$-ә тә'сирини һесаблајаг. (50.79) мүнасибәтләриндән көрүнүр ки, $\Phi(N_{k\lambda})$ функсијасы $\breve{H}$-ын да мәхсуси функсијасыдыр. Онун мәхсуси гијмәти саһәнин E енержиси олдуғундан,

$$\breve{H}\Phi(N) = E\Phi(N) = \frac{1}{2}\sum_{k\lambda}\hbar\omega(C_{k\lambda}C^+_{k\lambda} + C^+_{k\lambda}C_{k\lambda})\Phi(N_{k\lambda}, N_{k'\lambda'}\dots)$$

(50.79)-а әсасән

$$E = \sum_{k\lambda}\hbar\omega(N_{k\lambda} + \frac{1}{2}) \qquad (50.80)$$

алыныр. Бу ифадә хәтти осилјаторун енержисини хатырладыр, бурада чәм фотонлар системинин (саһәнин) мүхтәлиф $(\vec{k},\lambda)$ һаллары үзрә кедир, $N_{k\lambda}$ исә $(\vec{k},\lambda)$ һалындакы фотонларын сајыны көстәрир.

Саһәнин һалларынын һамысында фотонларын сајынын сыфра бәрабәр олдуғуну ($N_{k\lambda}=0$, k, λ -нын бүтүн мүмкүн олан гијмәтләриндә) фәрз етсәк, шүаланма саһәсинин енержиси

$$E = \sum_{k\lambda}\frac{\hbar\omega}{2} \to \infty$$

олур. Саһәнин бу һалына електромагнит саһәсинин **вакууму** дејилир. Классик нәзәријјәјә көрә саһәнин беләә һалы харичи електромагнит саһәсинин бахылан фәзада мөвчуд олмамасына ујғундур, јә'ни бу һалда $\vec{\mathcal{E}} = 0, \vec{H} = 0$ олур. Онда (50.56)-ја әсасән онун енержиси дә сыфыр олмалы иди. Лакин квант механикасында вакуумун енержиси сыфырдан фәргли, өзү дә кифајәт гәдәр бөјүк сабит гијмәтә бәрабәрдир.

Билдијимиз кими һәр һансы кәмијјәтин гијмәти һесабланаңда ујғун аддитив сабит башланғыч (сыфыр) кими көтүрүлә биләр. Бу сәбәбдән саһә нәзәријјәсиндә вакуум һалынын енержиси E_o сыфра бәрабәр көтүрүлүр (E_o=0). Лакин бу һеч дә саһәнин бу һалынын атом системләринә тә'сиринин сыфра бәрабәр олмасы демәк дејилдир. Бу тә'сир бир чох физики һадисәләрдә өзүнү бүрузә верир. Доғрудан да, бизим бу параграфда өјрәнәчәјимиз атомун спонтан шүаланмасы шүаланма саһәсинин вакуум һалынын атомдакы електрона тә'сири нәтичәсидир. Бу тә'сир електронун јухары һалдан ашағы һала кечидини тә'мин едир. Бундан башга, бу тә'сир атомун $2s_{1/2}$ һалынын $2p_{1/2}$ һалына нисбәтән јухары сүрүшмәсинә (Лемб сүрүшмәси, бах §80) сәбәб олур вә и.а.

ғ) Шүаланманын квант нәзәријјәси.

(50.78) мүнасибәтләринә әсасән дејә биләрик ки, шүаланма саһәсинин (50.54) илә верилмиш вектор потенсиалы зәррәчикләр сајындан асылы олан һал векторуна тә'сир едән оператордур. Онун $C_{k\lambda}$ илә мүтәнасиб олан биринчи һәддин тә'сири бахылан һалда бир фотонун удулмасына, $C^+_{k\lambda}$ илә мүтәнасиб олан икинчи һәддинин тә'сири исә бир фотонун һәмин һалда јаранмасына кәтирир.

Атомар системләрин шүаланма (шүаудма) просесинин еһтималыны тапмаг үчүн гаршылыглы тә'сири характеризә едән $\breve{V}(t)$ функсијасыны, ујғунлуг принсипинә әсасән, оператор һесаб едилир. Онун ифадәсиндәки $\vec{A}$-вектор потенсиалына (јә'ни фотонун далға функсијасына) ујғун (50.54)) илә верилмиш $\breve{\vec{A}}$ операторуну атомар системин шүаланмасына кәтирән икинчи (биринчи) һәдди илә әвәз етмәк лазымдыр. Онда (50.25) ифадәси

$$V(t) = -\frac{e}{mc}(\breve{\vec{A}}\breve{\vec{p}}) = -\frac{e}{mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}}\sum_{k\lambda}\frac{1}{\sqrt{\omega}}e^{i\omega t - ik\vec{r}}(\vec{a}^{*o\lambda}\breve{\vec{p}})C^+_{k\lambda} \qquad (50.25)$$

Шүаланма (шүаудма) просеси еһтималынын (50.27) ифадәси өз шәклини сахлајыр. Лакин (50.28)-дәки V^o_{nm} әвәзинә

$$\breve{V}^{o'}_{nm} = -\frac{e}{mc}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3}}\sum_{k\lambda}\frac{1}{\sqrt{\omega}}\int\Psi^{o*}_n(\vec{r})e^{-ik\vec{r}}(\vec{a}^{o*\lambda}\breve{\vec{p}})\Psi^o_m(\vec{r})(d\vec{r})C^+_{k\lambda}$$

јахуд

$$\breve{V}^o_{nm} = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3}}\sum_{k\lambda}\frac{1}{\sqrt{\omega}}(\vec{a}^{o*\lambda}\vec{J}_{nm})C^+_{k\lambda} \qquad (50.81)$$

јазмаг лазымдыр. Бурада $\vec{J}_{nm}$ ифадәси (50.29) илә верилмишдир. Буна ермит гошма оператор

$$\breve{V}'^{o}_{mn} = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3}}\sum_{k'\lambda'}\frac{1}{\sqrt{\omega'}}(\vec{a}^{o\lambda'}J^+_{mn})C_{k'\lambda'} \qquad (50.82)$$

јазылыр. (50.81) вә (50.82)-дән

$$\left|\breve{V}^{o1}_{nm}\right|^2 = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2L^3}\sum_{kk'\lambda'\lambda}\frac{1}{\sqrt{\omega\omega'}}(\vec{a}^{o\lambda'}\vec{J}^+_{mn})(\vec{a}^{o*\lambda}\vec{J}_{nm})C_{k'\lambda'}C^+_{k\lambda}\,. \qquad (50.83)$$

(50.65) јердәјишмә мүнасибәтләриндән вә (50.79)-ун икинчи бәрабәрлијиндән

$$C_{k'\lambda'}C^+_{k\lambda}\Phi(N_{k\lambda}) = \sqrt{N_{k'\lambda'}+1}\sqrt{N_{k\lambda}+1}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}\Phi(N_{k\lambda})$$

олур, бурада $N_{k\lambda} = N(\vec{k},\lambda)$ –атом-шүаланма системинин $|m>$ башланғыч һалында импулсу $\hbar\vec{k}$ вә полјарлашма ишарәси λ ($\lambda=\pm1$) олан фотонларын сајыдыр. Буну (50.83)-дә јазыб, δ-символлары васитәсилә $\vec{k}'$ вә λ' үзрә олан чәмләри көтүрсәк,

$$|V_{nm}^{o1}|^2 = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2 L^3}\sum_{\vec{k}\lambda}\frac{1}{\omega}(N_{k\lambda}+1)(\vec{a}^{o\lambda}\vec{J}^{+}_{mn})(\vec{a}^{o*\lambda}\vec{J}_{nm}) \qquad (50.84)$$

алынар.

Системин һәрәкәти сонлу $V = L^3$ һәчми илә мәһдудлашырса, онун енержиси, импулсу вә башга динамик кәмијјәтләри дискрет спектрә малик олур. L^3 һәчминдә олан шүаланма саһәсинин далға әдәдинин (импулсун) k_x, k_y, k_z компонентләри (50.19)-а көрә $k_i = \frac{2\pi}{L}n_i \, (i = 1,2,3)$ кими дискрет гијмәтләр алыр. Онларын ән кичик дәјишмәләри $\Delta k_i = \frac{2\pi}{L}\Delta n_i$ вә импулс фәзасынын елементар һәчми

$$\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \frac{(2\pi)^3}{L^3}\Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3$$

олар. k_i-нин ән кичик дәјишмәси n_i там әдәдинин ардычыл ики гијмәтинин фәрги илә тә'јин олундуғундан $\Delta n_i = 1 \ (i = 1,2,3)$ вә

$$1 = \Delta n_1 \Delta n_2 \Delta n_3 = \frac{L^3}{(2\pi)^3}\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z \qquad (50.85)$$

олар.

(50.84)-дә чәмин алтында ваһиди онун (50.85)-дә верилмиш ифадәси илә әвәз едиб, L-и сонсузлуға јахынлашдырмаг шәртилә лимитә кечәк. Бу заман Δk_i-ләр сонсуз кичик гијмәтә јахынлашдығындан

$$\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L^3}\sum_{\vec{k}} \to \frac{1}{(2\pi)^3}\int(d\vec{k}) \qquad (50.86)$$

вә

$$|V_{nm}^{o1}|^2 = \frac{\hbar e^2}{4\pi^2 m^2}\sum_{\lambda}\frac{(d\vec{k})}{\omega}(N_{k\lambda}+1)(\vec{a}^{o\lambda}\vec{J}^{+}_{mn})(\vec{a}^{o*\lambda}\vec{J}_{nm}) \qquad (50.87)$$

олур.

Буну (50.27)-дә јеринә јазсаг, шүаланманын еһтималы үчүн

$$W_{nm} = \frac{e^2}{2\pi\hbar m^2}\sum_{\lambda}\int\frac{(d\vec{k})}{\omega}(N_{k\lambda}+1)(\vec{a}^{o\lambda}\vec{J}^{+}_{mn})(\vec{a}^{o*\lambda}\vec{J}_{nm})\delta(\omega_{mn}-\omega) \qquad (50.88)$$

алыныр.

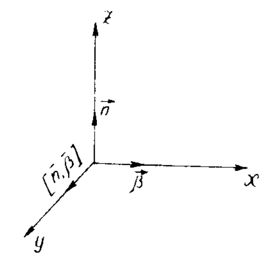
Сферик координат системиндә

$$(d\vec{k}) = k^2 dk d\Omega = \frac{\omega^2 d\omega}{c^3}d\Omega \qquad (50.89)$$

олдуғуну нәзәрә алыб (бурада $\omega = ck$, $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ – елементар чисим бучағыдыр), харичи шүаланма саһәсинин изотроп, јә'ни фотонларын $N(\vec{k},\lambda)$ сајынын θ вә φ бучагларындан асылы олмадығыны фәрз етсәк, (50.88)-дәки ω үзрә интегралы δ-функсија васитәсилә көтүрмәк олар:

$$W_{nm} = \frac{e^2\omega_{mn}}{2\pi\hbar m^2 c^3}\sum_{\lambda}(N(\omega,\lambda)+1)\int d\Omega(\vec{a}^{o\lambda}\vec{J}^{+}_{mn})(\vec{a}^{+o\lambda}\vec{J}_{nm}) \qquad (50.90)$$

Инди дә (50.90)-да λ үзрә, јә'ни шүаланма саһәсинин полјарлашма истигамәтләри үзрә чәм көтүрәк. Билдијимиз кими, шүаланма саһәси енинә саһәдир. $\vec{a}^{o\lambda}$ полјарлашма вектору һәмишә шүанын (фотонун) јајылма истигамәти $\vec{k}$ -ја перпендикулјардыр. Декарт координат системиндә z охуну $\vec{k}$ вектору истигамәтиндә ($\vec{n} = \frac{\vec{k}}{|k|}$) јөнәлтсәк, $\vec{a}^{o\lambda}$ -вектору ја x вә ја да y оху үзрә јөнәлмиш олар.



Шәкил 27 *а*.

Бу бахымдан полјарлашма истигамәтләри үзрә чәм* ихтијары $\vec{b}$ вә $\vec{c}$ векторлары үчүн

$$\sum_{\lambda}(\vec{a}^{o\lambda}\vec{b})(\vec{a}^{*o\lambda}\vec{c}) = (\vec{b}\vec{c}) - (\vec{n}\vec{b})(\vec{n}\vec{c}) \qquad (50.91)$$

нәтичәсинә кәтирир, бурада $\vec{b} = \vec{J}^{+}_{mn}$ вә $\vec{c} = \vec{J}_{nm}$ көтүрсәк,

$$W_{nm} = \frac{e^2\omega_{mn}}{2\pi\hbar m^2 c^3}(N(\omega)+1)\int d\Omega\left\{(\vec{J}^{+}_{mn}\vec{J}_{nm}) - (\vec{n}\vec{J}^{+}_{mn})(\vec{n}\vec{J}_{nm})\right\} \qquad (50.93)$$

---

* (50.91) бәрабәрлијини исбат етмәк үчүн шүаланманын даирәви полјарлашмыш олдуғуну гәбул едәк. Онда $\vec{a}^{o\lambda}$ вектору

$$\vec{a}^{o\lambda} = \frac{1}{2}(\vec{\beta} + i\lambda[\vec{n}\vec{\beta}]) \qquad (50.92)$$

кими көтүрүлә биләр, бурада $\vec{\beta} - x$ (вә ја y) оху, $[\vec{n}\vec{\beta}] - y$ (вә ја x) оху үзрә хәтти полјарлашманы характеризә едән ваһид вектор (шәкил 27 *а*), $\lambda \pm 1$ – сағ вә сол даирәви полјарлашманы тә'јин едән вуруг, $i = \sqrt{-1}$ -дыр. Бу һалда ади вектор һесабы илә (50.91) бәрабәрлијини чыхармаг олар.

олур, бурада $N(\omega)$–енержиси $\hbar\omega$ вә ики полјарлашма истигамәти үзрә орта гијмәт көтүрүлмүш фотонларын сајыдыр.

(50.93) ифадәсинин (50.42) илә мүгајисәсиндән көрүнүр ки, фотонун шүаланма еһтималы башланғыч һалда шүаланма саһәси (фотонлар) олмадығда ($N(\omega)\sim\rho(\omega)=0$) белә сыфырдан фәрглидир. Белә шүаланма *спонтан шүаланма* адланыр, шүаланма еһтималынын $N(\omega)$ илә мүтәнасиб олан һиссәси исә *мәчбури шүаланма* адланыр. Спонтан шүаланманын еһтималы (50.93)-дән

$$W^{сп}_{nm}=A_{nm}=\frac{e^2\omega_{mn}}{2\pi\hbar m^2c^3}\int d\Omega\left\{\vec{J}^*_{mn}\vec{J}_{nm}-(\vec{n}\vec{J}^*_{mn})(\vec{n}\vec{J}_{nm})\right\},\quad(50.94)$$

мәчбури шүаланманын еһтималы исә

$$W^{мчш}_{nm}=\frac{e^2\omega_{mn}}{2\pi\hbar m^2c^3}N(\omega)\int d\Omega\left\{(\vec{J}^*_{mn}\vec{J}^+_{nm})-(\vec{n}\vec{J}^*_{mn})(\vec{n}\vec{J}_{nm})\right\}.\quad(50.95)$$

$W^{мчш}_{nm}$ -ны шүаланманын спектрал сыхлығы $\rho(\omega)$ илә ифадә етмәк үчүн $\rho(\omega)$ илә $N(\omega)$ арасындакы әлагәни мүәјјән едәк.

Харичи шүаланма саһәсинин изотроп олдуғуну фәрз едиб, онун ики полјарлашма истигамәтинә малик олдуғуну нәзәрә алсаг, шүаланма саһәсинин енержи сыхлығы

$$u=8\pi\int\rho(\omega)d\omega\quad(50.96)$$

кими јазыла биләр. Дикәр тәрәфдән шүаланманын u енержи сыхлығыны фотонларын $N(\omega)$ сајы илә дә ифадә етмәк олар. (50.86) вә (50.89)-а әсасән

$$u=\sum_k\frac{\hbar\omega 2N(\omega)}{L^3}=\frac{2\hbar}{8\pi^3}\int d\vec{k}\,\omega N(\omega)=\frac{\hbar}{\pi^2c^3}\int\omega^3N(\omega)d\omega\quad(50.97)$$

олар. (50.96) вә (50.97)-нин мүгајисәсиндән

$$\frac{N(\omega)}{\rho(\omega)}=\frac{8\pi^3c^3}{\hbar\omega^3}\quad(50.98)$$

алынар. $N(\omega)$-ны бурадан (50.95)-дә әвәз етсәк,

$$W^{мчш}_{nm}=\frac{4\pi^2e^2}{\hbar^2m^2\omega^2_{mn}}\rho(\omega)\int d\Omega\left\{\vec{J}^+_{mn}\vec{J}_{nm}-(\vec{n}\vec{J}^+_{mn})(\vec{n}\vec{J}_{nm})\right\}=\rho(\omega_{mn})B_{nm}\quad(50.99)$$

Гејд едәк ки, атом системләринин шүаудма просеси, јә'ни ашағы n сәвијјәсиндән јухары m сәвијјәсинә кечидләрин еһтималы үчүн дә ејнилә белә ифадә алыныр, јалныз фәрг ондадыр ки, алынмыш ифадәдә n-ин јериндә m, вә m-ин јериндә n индекси дурур:

$$W^{мчш}_{mn}=\rho(\omega_{nm})B_{mn}.\quad(50.99')$$

Бурадан мәчбури кечидләрин Ејнштејн әмсалы үчүн ашағыдакы үмуми ифадә алыныр:

$$B_{nm}=\frac{4\pi^2e^2}{\hbar^2m^2\omega^2_{mn}}\int d\Omega\left\{\vec{J}^+_{mn}\vec{J}_{nm}-(\vec{n}\vec{J}^+_{mn})(\vec{n}\vec{J}_{nm})\right\}.\quad(50.100)$$

(50.93), (50.94) вә (50.99) ифадәләриндән јухары m сәвијјәсиндән ашағы n сәвијјәсинә кечидин там еһтималы

$$W_{nm}=A_{nm}+\rho(\omega_{nm})B_{mn}.\quad(50.100.а)$$

Асанлыгла көстәрмәк олар ки, шүаланманын јарым классик нәзәријјәси бөлмәсиндә бахылан хүсуси һалда B_{nm}-ин (50.100) илә верилмиш ифадәси дипол шүаланмасы үчүн алынмыш (50.44) ифадәси үзәринә дүшүр. Гејд етмәк лазымдыр ки, B_{nm}-и билавасите һесабламаға еһтијач јохдур, беләки спонтан шүаланманын A_{nm} еһтималы һесабланандан сонра, онлар арасындакы (50.10) мүнасибәтиндән истифадә едәрәк B_{nm}-и тапмаг олар.

Харичи шүаланма саһәсинин тә'сири алтында јухары E_m сәвијјәсиндән ашағы E_n сәвијјәсинә кечән N_m атомларын ваһид заманда шүаландырдығы енержи

$$I_{nm}=\hbar\omega_{mn}N_mW^{мчш}_{nm}=\hbar\omega_{mn}N_m\rho(\omega_{mn})B_{nm},\quad(50.100.б)$$

ашағы E_n сәвијјәсиндән јухары E_m сәвијјәсинә кечән N_n атомларын уддуғу енержи исә

$$I_{mn}=\hbar\omega_{nm}N_nW^{мчш}_{mn}=-\hbar\omega_{mn}N_n\rho(\omega_{mn})B_{mn}\quad(50.100.в)$$

бәрабәр олар; бурада N_m вә N_n–атомлар системинин (маддәнин) ујғун сәвијјәләринин *тутулма дәрәчәси* адланыр.

B_{nm} вә B_{mn} әмсалларынын бир-биринә бәрабәр олдуғуну нәзәрә алсаг, маддәнин ваһид заманда удуб бурахдығы енержинин үмуми мигдары

$$I=I_{nm}+I_{mn}=h\omega_{mn}\rho(\omega_{mn})B_{nm}(N_m-N_n).\quad(50.100.г)$$

Атомлар системи илә шүаланма термодинамик таразлыгда олдугда, системин T температуру сәвијјәләрин тутулма дәрәчәсини, јә'ни маддәдә атомларын енержијә көрә пајланмасыны там тә'јин едир:

$$N_m=ae^{-\frac{E_m}{kT}},\quad N_n=ae^{-\frac{E_n}{kT}},$$

бурада k–Болсман сабитидир. $E_m>E_n$ олдуғундан, термодинамик таразлыг һалында һәмишә $N_n>N_m$ вә буна көрә дә $I<0$ олур, јә'ни шүаланма илә термодинамик таразлыгда олан атомлар системинин харичи саһәнин тә'сири алтында уддуғу енержи шүаландырдығы енержидән чох олур. Буна көрә дә маддәдән кечән шүаланманын интенсивлији һәмишә азалыр.

Лакин бу вә ја башга јолла јухары сәвијјәләрин тутулма дәрәчәсини ашағы сәвијјәләрин тутулма дәрәчәсинә нисбәтән бөјүтмәк оларса, јә'ни $N_m > N_n$ шәрти өдәниләрсә, термодинамик таразлыг позулар вә маддәдән кечмиш шүаланманын интенсивлији күчләнмиш олар ($I > 0$). Квант генераторларынын (лазер, мазер) иш принсипи буна әсасланыр.

д) Дипол, магнит-дипол вә квадрупол спонтан шүаланмасы.

Спонтан шүаланма еһтималынын (50.94) ифадәсинә дахил олан $\vec{J}_{nm} = \int \Psi_n^{*o}(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{\vec{p}} \Psi_m^o(\vec{r})(d\vec{r})$ интегралы үчүн $kr \sim 10^{-3}$ јахынлашмасында

$$e\vec{J}_{nm} = im\omega_{nm} e\vec{r}_{nm} + \frac{ie}{2}\left(\left[\vec{k}\left[\vec{r}\vec{p}\right]\right]\right)_{nm} - \frac{m\omega_{nm}}{2} e(\vec{r}(\vec{k}\vec{r}))_{nm} \tag{50.39}$$

ифадәси алынмышды. Еһтималы системин $\vec{d} = -e\vec{r}$ електрик дипол моментинин $\vec{d}_{nm}$ матрисасы илә тә'јин олунан шүаланма дипол вә ја $E1$ шүаланмасы, орбитал моментин $\vec{L} = \left[\vec{r}\vec{p}\right]$ вә ја $\vec{M} = -\frac{e}{2mc}\vec{L}$ магнит моментинин $\vec{M}_{nm}$ матрисасы илә тә'јин олунан шүаланма магнит-дипол вә ја $M1$–шүаланмасы, нәһајәт $(\vec{r}(\vec{k}\vec{r})) \approx k_i r_i r_j \approx k_i Q_{ij}$ квадрупол моментинин $(Q_{ij})_{nm}$ матриса елементи илә тә'јин олунан шүаланма исә квадрупол вә ја $E2$ шүаланмасы адланыр.

Дипол кечидләрин еһтималыны тапмаг үчүн (50.94)-дә $\vec{J}_{nm}$ интегралы (50.39)-дан биринчи һәддә бәрабәр көтүрүлүр:

$$W_{nm}^{\text{сп}} = A_{nm}^{\text{ш}} = \frac{e^2\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\left\{(\vec{r}_{mn}^{\,*}\vec{r}_{nm}) - (\vec{n}\vec{r}_{mn})^*(\vec{n}\vec{r}_{nm})\right\} d\Omega \tag{50.101}$$

$\vec{d} = -e\vec{r}$ дипол моменти илә шүаланманын јајылма $\vec{n} = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}$ истигамәти арасындакы бучаглары θ, φ илә ишарә едиб (шәкил 27), бучаглар үзрә интеграл апарсаг,

$$A_{nm}^{\text{ш}} = \frac{4}{3}\frac{\omega_{mn}^3 e^2}{\hbar c^3}\left|\vec{r}_{nm}\right|^2 = \frac{4}{3}\frac{\omega_{mn}^3}{\hbar c^3}\left|\vec{d}_{nm}\right|^2 \tag{50.102}$$

олар. Бу исә шүаланманын јарым классик нәзәријјәсиндә алынмыш (50.52) ифадәси үзәринә дүшүр.

$\vec{d}_{nm}$ матриса елементи сыфра бәрабәр оларса, електрик дипол кечидләри гадаған олунмуш олур. Бу заман ола билсин ки, атом системләри

магнит-дипол вә квадрупол кечидләри һесабына шүа бурахыб, удсун. Бу кечидләрин еһтималыны һесабламаг үчүн J_{mn}-ин (50.39) ифадәсиндә икинчи вә үчүнчү һәдләри көтүрмәк лазымдыр.

Магнит-дипол кечидләрин еһтималыны һесаблајаг. Бунун үчүн әввәлчә (50.39)-ун икинчи һәддиндә $\hat{\vec{L}} = \left[\vec{r}\hat{\vec{p}}\right]$ орбитал һәрәкәт мигдары моменти операторуну

$$\hat{\vec{M}} = -\frac{e}{2mc}\hat{\vec{L}}$$

мүнасибәтиндән ујғун $\hat{\vec{M}}$-магнит моменти оператору илә әвәз едәк:

$$eJ_{nm}^{\text{маг}} = i\frac{e}{2}\left(\left[\vec{k}\vec{L}\right]\right)_{nm} = \frac{ie\omega_{mn}}{2c}\left[\vec{n}\vec{L}\right]_{nm} = i\omega_{mn} m\left(\left[\vec{n}\vec{M}\right]\right)_{nm}.$$

Дикәр тәрәфдән $(\vec{n}\vec{J}^{\text{маг}}) = 0$ вә вектор һесабынын $\left[\vec{a}\vec{b}\right]\left[\vec{c}\vec{d}\right] = (\vec{a}\vec{c})(\vec{b}\vec{d}) - (\vec{a}\vec{d})(\vec{b}\vec{c})$ бәрабәрлијини нәзәрә алсаг,

$$A_{nm}^{\text{маг}} = \frac{\omega_{mn}^3}{2\pi\hbar c^3}\int d\Omega\left\{\vec{M}_{mn}^{\,*}\vec{M}_{nm} - (\vec{n}M_{mn}^{+})(\vec{n}\vec{M}_{nm})\right\},$$

бурадан (50.102)-нин алынмасына охшар олараг

$$A_{nm}^{\text{маг}} = \frac{4\omega_{mn}^3}{3\hbar c^3}\left|\vec{M}_{nm}\right|^2 \tag{50.103}$$

олар. Беләликлә, магнит-дипол шүаланмасы електрик-дипол шүаланмасындан дипол моментинин магнит моменти илә әвәз едилмәси илә фәргләнир.

Инди дә квадрупол кечидләрин еһтималыны һесаблајаг. Бунун үчүн (50.94)-дә $e\vec{J}_{nm}$ интегралы әвәзиндә (50.39)-дан квадрупол шүаланмаја кәтирән үчүнчү һәдди јазаг:

$$A_{nm}^{\text{кв}} = \frac{e^2\omega_{mn}^5}{8\pi\hbar c^5}\int d\Omega\left\{(\vec{r}(\vec{n}\vec{r}))_{mn}^{+}(\vec{r}(\vec{n}\vec{r}))_{nm} - ((\vec{n}\vec{r})(\vec{n}\vec{r}))_{mn}^{+}((\vec{r}\vec{n})(\vec{r}\vec{n}))_{nm}\right\}. \tag{50.104}$$

Бучаглар үзрә интеграллананда сонра*

$$A_{nm}^{\text{кв}} = \frac{e^2\omega_{mn}^5}{30\hbar c^3}\left\{3(x_i x_j)_{mn}^{+}(x_i x_j)_{nm} - (r^2)_{mn}^{+}(r^2)_{nm}\right\}. \tag{50.105}$$

---

* Бах: [3], сәһ 164

Буну атом системинин квадрупол моменти (тензору)

$$Q_{ij} = e(3x_i x_j - r^2\delta_{ij})$$

илә ифадә етсәк,

$$A^{\text{кв}}_{nm} = \frac{\omega^5_{mn}}{90\hbar c^5}(Q_{ij})^+_{mn}(Q_{ij})_{nm} \tag{50.106}$$

алынар.

Нүмунә үчүн һидрокен атомунда $2p$ һалындан $1s$ һалына дипол спонтан кечидин еһтималыны һесаблајаг. Билдијимиз кими һидрокен атомунун $1s$ әсас һалы чырлашмамыш, $2p$ һалы исә $n=2$, $l=1$, $m=-1,0,1$ кими үч гат чырлашмышдыр. $1s$ һалы Ψ_{100}, $2p$ һалы исә Ψ_{210}, Ψ_{211}, Ψ_{21-1}, функсијалары илә тәсвир олунур. (51.8) сечмә гајдаларына көрә бу үч һалын һәр бириндән Ψ_{100} һалына кечид ола биләр. Лакин, мәсәләни садәләшдирмәк мәгсәдилә $\vec{d}$-векторунун z оху үзрә јөнәлмиш һалда $\Psi_{210} \to \Psi'_{100}$ кечидин еһтималыны һесаблајаг:

$$|d_z|_{21,10} = \int \Psi^+_{210} d_z \Psi_{100}(d\vec{r}) = -e\int \Psi^+_{210} z \Psi_{100}(d\vec{r}) = -e\int \Psi_{210} r\cos\theta \Psi_{100}(d\vec{r}).$$

ифадәсиндә Ψ_{210}, вә Ψ_{100} функсијаларыны (40.40)-дан ифадәләри илә әвәз етсәк,

$$(d_z)_{21,10} = e\int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr \int Y_{10}\cos\theta Y_{00} d\Omega$$

$Y_{10} = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$, $Y_{00} = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$ олдуғундан, бучаглара көрә интеграл

$$\int Y_{10}\cos\theta Y_{00} d\Omega = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

вә

$$(d_z)_{21,10} = \frac{e}{\sqrt{3}}\int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr$$

алынар. Буну (50.102)-дә јазсаг,

$$A^{\text{ди}}_{21,10} = \frac{4}{3}\frac{\omega^3_{21}}{\hbar c^3}\frac{e^2}{3}\left|\int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr\right|^2$$

Радиал $R_{10} = 2e^{-\frac{r}{a}}$ вә $R_{21} = \dfrac{1}{\sqrt{6a^3}} e^{-\frac{r}{2a}} \dfrac{r}{2a}$ функсијаларын ифадәләрини јухарыдакы интегралда јазыб, һиссә-һиссә интеграл апарсаг,

$$\int_0^\infty R_{21} r^3 R_{10} dr = \sqrt{\frac{2^{15}}{3^9}}\, a,$$

(бурада $a = \dfrac{\hbar^2}{me^2}$ -дыр) вә

$$A^{\text{ди}}_{21,10} = \frac{2^{17}}{3^{11}}\frac{\omega^3_{21}\hbar^3}{m^2c^3e^2}$$

олар. Бурада кечид тезлијини

$$\omega_{21} = \frac{E_{2p} - E_{1s}}{\hbar} = \frac{3}{8}\cdot\frac{me^4}{\hbar^3} \tag{50.107}$$

гијмәти илә әвәз етсәк, нәһајәт

$$A^{\text{ди}}_{21,10} = \left(\frac{2}{8}\right)^8 \alpha^3 \frac{mc^4}{\hbar^3} \tag{50.107'}$$

аларыг. Беләликлә Лајман серијасынын биринчи хәттинин интенсивлији (50.107) вә (50.107′)-дән

$$I_{21} = \hbar\omega_{21} A^{\text{ди}}_{21,10} = \frac{2^5}{3^7}\hbar\alpha^3\left(\frac{mc^4}{\hbar^3}\right)^2 \tag{50.107''}$$

олур.

§ 51. ДИПОЛ, МАГНИТ-ДИПОЛ ВӘ КВАДРУПОЛ ШҮАЛАНМАСЫ ҮЧҮН СЕЧМӘ ГАЈДАЛАРЫ

Мәркәзи саһәдә һәрәкәт едән зәррәчијин дипол шүаланмасы үзәриндә дајанаг. Белә шүаланмаја мисал олараг һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларын вә ја бир оптик електронлу атомларын дипол шүаланмасыны көстәрмәк олар. Белә системләрин һалы (бах:(40.40))

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = R_{nl}(r)P^m_l(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{51.1}$$

функсијасы илә тә'јин олунур. Атом системинин һәр һансы һәјәчанланмыш $m(n',l',m')$ һалындан $n(n,l,m)$ һалына кечидин еһтималыны тә'јин едән дипол моментинин матриса елементинин квадратыны

$$\left|\vec d_{mn}\right|^2 = \left|\vec d_{n'l'm',nlm}\right|^2 = e^2\left(\left|x_{mn}\right|^2 + \left|y_{mn}\right|^2 + \left|z_{mn}\right|^2\right) \qquad (51.2)$$

кими јазсаг, (50.102) вә (50.105)-дән көрүнүр ки, дипол кечидләринин еһтималы о вахт сыфырдан фәргли галар ки, x,y,z операторларына ујғун матриса елементләриндән ән азы бири сыфра бәрабәр олмасын. Һансы кечидләр үчүн бу шәртин өдәнилдијини јохлајаг.

Електронун атомдакы һәрәкәтинә вә фотонун полјарлашма хассәсинә ујғун олараг x,y,z-ә ујғун матрисалары әвәзиндә $\xi=x+iy$, $\eta=x-iy$ вә $\zeta=z$-ә ујғун матрисалары һесабламаг даһа әлверишлидир.

(50.39) вә (50.101) ифадәләриндән көрүнүр ки, дипол, магнитдипол вә квадрупол шүаланмаларынын еһтималы r радиус-векторун (јә'ни x,y,z вә ја ξ,η,ζ координатларынын) матриса елементләринин мүхтәлиф дәрәчәләри илә мүтәнасибдир. § 42-дә көстәрдик ки, һидрокен, һидрокенәбәнзәр вә бир оптик електронлу атомлар һалында n баш квант әдәдинин истәнилән дәјишмәләриндә l–орбитал вә m –магнит квант әдәдләри

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0 \pm 1 \qquad (51.3)$$

кими дәјиширсә (бах (42.12)), координат операторларынын кечид матриса елементләри сыфырдан фәргли галыр. Башга сөзлә, бахылан атом үчүн (51.3) сечмә гајдалары өдәнилирсә, о, бир стасионар һалдан дикәринә кечә билир.

(50.38), (50.90) вә (51.2) ифадәләриндән бир нәтичә олараг чыхыр ки, атомларын бахылан кечиди онун шүаланмасы илә нәтичәләнирсә, (51.3) сечмә гајдалары јалныз дипол шүаланмасы үчүн доғрудур. Магнит-дипол вә квадрупол шүаланмалары үчүн башга сечмә гајдалары алыныр (бах: § 42).

(50.90) вә (51.2) бәрабәрликләриндән алыныр ки, $\Delta m = 0$ сечмә гајдасы фотонун z оху үзрә полјарлашмасына, $\Delta m = \pm 1$ сечмә гајдасы исә фотонун z охуна перпендикулјар истигамәтдә полјарлашмаја (x, y мүстәвисиндә), јахуд да саг вә сол даирәви полјарлашмаја ујғундур.

(51.3) сечмә гајдалары әслиндә атом-фотон системинин һәрәкәт мигдары моментинин сахланма ганунуну ифадә едир. l-ин бир ваһид дәјишмәси көстәрир ки, дипол кечидләри заманы бурахылан фотон өзү илә ваһидә бәрабәр һәрәкәт мигдары моменти апарыр. Атом системинә тә'сир едән шүаланма саһәси (јә'ни фотонун $\vec A(\vec r,t)$ далға функсијасы) изотроп олдуғундан, фотонун өзү илә апардығы моменти онун ваһидә бәрабәр спин моменти илә ејниләшдирилә биләр. Јухарыда биз верилмиш импулс вә полјарлашмаја малик фотонларын шүаланмасына бахдыг. Импулс вә һәрәкәт мигдары моменти операторлары коммутасија етмәдијиндән белә фотонлар верилмиш импулс вә полјарлашма илә ејни заманда мүәјјән һәрәкәт мигдары моментинә малик ола билмәз. Лакин, далға узунлуғу атом системинин өлчүсүндән хејли бөјүк олан фотонларын шүаландығы һалларда $e^{i\vec k\vec r}$ -ин сырасында биринчи һәдлә кифајәтләнириксә,

бунунла биз верилмиш һәрәкәт мигдары моментинә малик олан фотонлары сечмиш олуруг.

(51.3) сечмә гајдалары чүтлүјүн сахланма ганунунда өдәнилмәсини тә'мин едир. Доғрудан да, §15 көстәрмишдик ки, сферик симметрик саһәдә һәрәкәт едән зәррәчијин мүмкүн олан һалларынын чүтлүјү $(-1)^l$ илә тә'јин олунур. $\vec d = -e\vec r$ операторуна ујғун матрисанын $d_{n'l'm',nlm} = -e\int \Psi^*_{n'l'm'}\vec r\,\Psi_{nlm}(d\vec r)$ елементләри $l' = l \pm 1$ вә ја $\Delta l = \pm 1$-дә сыфырдан фәргли олдуғундан $\Psi^*_{n'l'm'}$ вә Ψ_{nlm} функсијалары мүхтәлиф чүтлүјә малик олмалыдыр. Бу заман $\vec r \to -\vec r$ күзкү әкси чеврилмәсиндә интегралалты функсија гијмәт вә ишарәсини дәјишмир, бу чеврилмәјә көрә о инвариант галыр, јә'ни системин чүтлүјү сахланыр.

(51.3) сечмә гајдалары зәррәчијин спин һаллары нәзәрә алынмадығы, јә'ни орбитал һәрәкәтлә спин моменти арасында рабитә олмадығы һалларда доғрудур. Башга сөзлә, бахылан просесләрдә орбитал вә спин моментләри ајрылыгда сахланыр. Спинлә орбитал һәрәкәт арасында рабитә олдугда исә (спин-орбитал гаршылыглы тә'сир сыфыр дејил) сечмә гајдалары орбитал вә спин моментләринин вектори чәми олан $\vec J = \vec L + \vec S$ там моменти үчүн јазылыр, белә ки бу, һалда јалныз там момент сахланыр.

Дипол шүаланмасында там момент үчүн сечмә гајдалары

$$\Delta j = 0, \ \pm 1, \ \Delta m_j = 0, \ \pm 1 \qquad (51.4)$$

олур. Бурада $j = l \pm \frac{1}{2}$ — көмәкчи квант әдәди ($J^2 = \hbar^2 j(j+1)$), $m_j = m \pm \frac{1}{2}$ — көмәкчи магнит квант әдәдидир. (51.4) -дән көрүндүјү кими, бурада $\Delta j = 0$, јә'ни там моментин гијмәти ејни олан һаллар арасында електрик-дипол кечидләри гадаған олунмур, беләки системин һалларынын чүтлүјү там моментлә јох, јалныз орбитал моментлә әлагәдардыр. Лакин, атомун $j_1=0$ вә $j_2=0$ олан ики һалы арасындакы кечид исә гадағандыр, белә кечиддә там момент үчүн сахланма гануну өдәнилмир, чүнки атом $\to$ атом + фотон системиндә там момент ваһид олур (фотонун спини ваһиддир).

$M1$ магнит-дипол кечидләрин еһтималы $\vec M_{nm} = \frac{e}{2mc}\left[\vec r\vec p\right]_{nm} = \frac{e}{2mc}\vec L_{nm}$ матриса елементи илә тә'јин олунур. Бу кечидләрдә дә фотон өзү илә ваһидә бәрабәр момент апарыр. Күзкү әкси чеврилмәсиндә $\left[\vec r\vec p\right]$ вуруғу ишарәсини дәјишмәдијиндән интеграла дахил олан $\Psi^*_{n'l'm'}$ вә Ψ_{nlm} функсиjаларынын һәр икисинин чүтлүjү еjни олмалыдыр. Бу сәбәбдән магнит-дипол кечидиндә бурахылан фотон електрик-дипол кечидиндә бурахылан фотона нәзәрән әкс чүтлүjә малик олмалыдыр (jә'ни, бири $\vec{A} = \vec{a}\cos(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ функсиjасы илә тәсвир олунурса, дикәри $\vec{A} = \vec{a}\sin(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ функсиjасы илә тәсвир олунмалыдыр).

Билдиjимиз кими, сферик симметрик (мәркәзи) саһәдә башланғыч вә сон һалын Ψ_m вә Ψ_n -далға функсиjалары $\breve{L}_z$ операторунун мәхсуси функсиjаларыдыр. Буна көрә $\langle m|L_z|n\rangle = \langle n', l', m'|L_z|nlm\rangle$ матриса елементи $m \neq n$ оланда сыфыр олур, $\breve{L}_x$ вә $\breve{L}_y$ операторлары исә jалныз магнит квант әдәдини $+\ 1$ гәдәр дәjишир (n,l квант әдәдләрини дәjишмир) (бах § 35). Мәркәзи саһәдә магнит квант әдәди m-ин мүхтәлиф гиjмәтләринә енержинин еjни бир гиjмәти уjғун кәлдиjиндән, m илә фәргләнән һаллар арасындакы кечидләр заманы енержи нә бурахылыр вә нә дә удулур.

Атом харичи магнит саһәсинә салындыгда исә сәвиjjәләрин енержиси m магнит квант әдәдиндән асылы олур (бах: Зеjеман еффекти). Белә сәвиjjәләр арасындакы кечидләр заманы исә енержи удулуб бурахылыр.

Беләликлә, $M1$ дипол шүаланмасы үчүн сечмә гаjдалары

$$\Delta l = 0, \Delta m = \pm 1 \qquad (51.5)$$

олур.

Квадрупол кечидләри үчүн сечмә гаjдалары (51.3) сечмә гаjдалары әсасында тапыла биләр. Квадрупол моменти матрисасынын елементләриндән бирини, мәсәлән $(xy)_{mn}$-и көтүрәк. $m(n',l',m')$ һалындан $n(n,l,m)$ һалына кечидин матриса елементи

$$\begin{aligned}\langle n\ |xy|\ m\rangle &= \langle n,l,m\ |xy|\ n',l',m'\rangle = \\ &= \langle n,l,m\ |x|\ n''l''m''\rangle\langle n''l''m''\ |y|\ n'l'm'\rangle\end{aligned} \qquad (51.6)$$

олар. (51.3) көрә

$$l'' = l' \pm 1,\ \ l'' = l \pm 1,\ \ m'' = m',\ \ m'' = m,\ \ m'' = m \pm 1,\ \ m'' = m' \pm 1 \qquad (51.7)$$

бәрабәрликләри өдәнилдикдә (51.6) сыфырдан фәргли галыр. Бурадан

$$\Delta l = 0, \pm 2,\ \ \Delta m = 0, \pm 1, \pm 2 \qquad (51.8)$$

сечмә гаjдалары алыныр, jә'ни $E2$ кечиди заманы шүаланан фотон ики ваһид һәрәкәт мигдары апарыр.

51 *а*. МЕССБАУЕР ЕФФЕКТИ

1958-чи илдә кәнч алман физики Рудолф Мессбауер кристал гәфәсдә олан нүвәләрин бурахдығы γ шүаланманын спектриндә Γ тәбии енә малик, jерини дәjишмәмиш, jә'ни тәпмәjә мә'руз галмамыш спектр хәтти мүшаһидә етмишди. Гәфәсин температуру ашағы дүшдүкчә бу хәттин нисби интенсивлиjи кәскин артырды. Бир аз сонра белә нөв нүвәләрин удулма спектриндә дә jухарыдакына уjғун спектр хәтти мүшаһидә олунду.

Бу фактлар әсасында нүвәләрин γ шүаланмасынын удулмасыны тәдгиг едән тәчрүбәләрдә елә шәраит jаратмаг мүмкүн оларды ки, γ шүаларын маддәләр тәрәфиндән удулмасы әсасән резонанс характер дашысын. Онда нүвәләрин jашама мүддәти кифаjәт гәдәр бөjүк олан ашағыда jерләшмиш һәjәчанланмыш сәвиjjәләрә уjғун шүаланмада ени 2Γ-jә jахын кәскин резонанс хәтти мүшаһидә олунар.

Бу истигамәтдә апарылан тәдгигатларда ени чох дар олан спектр хәттини алмаг вә аjырдетмә габилиjjәти гејри-ади шәкилдә бөjүк олан детектор jаратмаг имканы әлдә едилмиш олду.

Мессбауерин мәгаләләри журналларда чыхан кими дүнjанын бир чох тәдгигат лабораториjаларында "Мессбауер еффекти" ады алтында γ-шүаларын тәпмәсиз шүаланмасы вә резонанс удулмасы һадисәләринин интенсив тәдгиги башланды. Бир чох елементләрин изотопларында бу еффектин мүшаһидәсиндән сонра нүвә физикасында, кимjәви физикада, нисбилик нәзәриjjәсиндә вә физиканын дикәр бөлмәләриндә тәсадүф олунан бир чох проблемләрин һәлли үчүн онун тәтбиги башланды.

Мессбауер еффектинин маһиjjәти ашағыдакындан ибарәтдир. Тутаг ки, күтләси M олан нүвә E енержили γ-квант шүаландырыр. Бу заман нүвә $\vec{p} = -\frac{E}{c}\vec{n}$-нә бәрабәр тәпмә импулсу алыр ($\vec{n}$ $-\gamma$-квантын шүаланма истигамәтиндәки ваһид вектордур). Бу заман нүвә $E_T = \frac{p^2}{2M}$ вә jа $E_T = \frac{E^2}{2Mc^2}$ гәдәр тәпмә енержиси алыр.

Башланғычда сүкунәтдә олан нүвәнин бурахдығы γ - квантын енержиси $E_\gamma = E - E_T$-jә бәрабәр олар. Белә нүвәнин E енержили γ кванты резонанс удмасы үчүн ахырынчынын енержиси һәjәчанланмыш сәвиjjәнин $E + E_T$ енержисиндән сәвиjjәнин Γ тәбии ениндән чох фәргләнмәмәлидир. Беләликлә, башланғычда сүкунәтдә олан сәрбәст нүвәләрин шүаланма вә удулма спектр хәтләри арасындакы енержи фәрги $2E_T$-jә бәрабәр олур. Бу фәрг E-дән чох кичик олса да, о, һәjәчанланмыш сәвиjjәнин Γ тәбии ениндән хеjли бөjүкдүр вә γ-квантын резонанс удулмасы мүмкүн деjилдир. Мәсәлән, тәчрүбәдә истифадә олунан Sn^{119} изотопун биринчи һәjәчанланма сәвиjjәсинин енержиси 23,8 *кеВ*, она уjғун тәпмә енержиси $E_T \approx 0{,}0025$ *кеВ*, сәвиjjәнин тәбии ени исә $\Gamma \approx 3\cdot 10^{-8}$ *еВ*-

дур. Бурадан көрүнүр ки, E_T енержиси Γ-дән тәхминән 10^5 дәфә бөјүкдүр.

Мессбауерә гәдәр нүвәнин γ-кванты шүаландырмасына ујғун хәтт илә γ-кванты удмасына ујғун хәтт арасындакы $2E_T$ енержи фәргини арадан көтүрмәк үчүн Доплер еффекти јарадан гурғулардан истифадә едилирди.

$2E_T$-јә бәрабәр Доплер јердәјишмәсини јаратмаг үчүн γ-кванты шүаландыран вә ону удан нүвәләрин нисби хәтти сүр'әти, тәпмә импулсунун јухарыдакы ифадәсиндән, $\upsilon \approx \frac{E}{Mc}$-јә бәрабәр олмалыдыр. Мәсәлән, јухарыда адыны чәкдијимиз Sn^{119} изотопу үчүн бу сүр'әт тәхминән $6\,10^3$см/сан олмалыдыр. Нисби сүр'әтин гијмәти бөјүк олдуғундан гојулан мәгсәд үчүн истифадә олунан белә методлар о гәдәр дә јарарлы дејилди.

Мессбауер Ir^{119} нүвәсинин енержиси 129 *кеВ* олан һәјәчанланмыш сәвијјәнин енини өлчмәк үчүн әввәлкиләрдән там фәргли олан јени метод тәклиф етди. Бу методда γ-квантлары шүаландыран вә онлары удан мәнбә'ләрин нүвәләринин тәпмәјә уғрамасы ортадан көтүрүлүр.

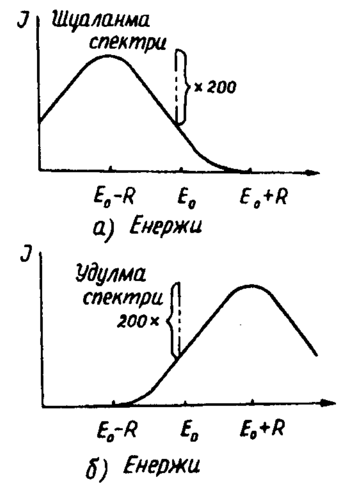
Мессбауер көстәрди ки, γ-квантлары шүаландыран вә удан нүвәләр алчаг температурлу кристала јерләшдирилдикдә γ-квантлар бурахылыб удулдугда тәпмә импулсу, әксәр һалларда, бүтөв кристала верилир. Верилән енержи кристалын дахили енержисинә нәзәрән чүз'и олдуғундан, кристалда истилик рәгсләри һәјәчанланмыр. Башга сөзлә, кристалын алдығы кинетик енержи бурахылан нүвәнин һәјәчанланмыш сәвијјәнин Γ ениндән олдугча кичик олур. Бу һадисә мүтләг бәрк чисимдән олан кичик күрәнин, күтләси кифајәт гәдәр бөјүк олан мүтләг бәрк диварла тоггушмасына охшајыр. Күрә һансы сүр'әтлә дивара дәјирсә, һәмин сүр'әтлә дә кери сычрајыр, јә'ни тоггушмада енержи иткиси баш вермир.

Бунун нәтичәсиндә γ-квантлары шүаландыран вә удан нүвәләрин спектрләриндә ујғун спектр хәтләринин, тәпмә импулсу һесабына ортаја чыха биләчәк нисби $2E_T$ сүрүшмәси сыфра бәрабәр олур вә сүкунәтдәки кристалда олан нүвәләрин бурахдығы γ-шүалар резонанс сәпилир вә ја дикәр сүкунәтдәки кристалда олан нүвәләр тәрәфиндән резонанс удулур. Сонракы тәдгигатлар көстәрди ки, отаг температурунда вә һәтта нисбәтән даһа јүксәк температурларда да Мессбауер еффекти мүшаһидә олунур.

Тәпмәсиз шүаланан вә удулан γ-квантлар кристалын шүаланма вә удулма спектрләриндә ени Γ-јә бәрабәр хәтләр верир. Һәр ики һалда хәтләр һәјәчанланмыш сәвијјәнин $E=E_0$-а ујғун нөгтәсиндә јерләшир (шәкил 28 *а*, *б*-дә шагули гара хәтләр).

Мессбауер еффектинин кәшфиндән сонра физиканын бир чох саһәләриндә чох инчә вә бөјүк дәгиглик тәләб едән физики һадисәләрин өјрәнилмәсинә имкан јаранды. Мәсәлән, Мессбауер еффекти, илк дәфә, нүвәләрин енержи сәвијјәләринин ифрат инчә гурулушуну бөјүк дәгигликлә өлчмәјә имкан верди.

Мәсәлән 10^5 һерс-ли магнит саһәсиндә нүвәнин ифрат инчә гурулуш сәвијјәләри арасындакы фәрг $\Delta E = 10^{-6}eB$-дур. γ-квантларын енержиси бир нечә он *кеВ* олдугда белә ифрат инчә гурулушу өлчән чиһазын ајырычы габилијјәти 10^{-10}-дан бөјүк олмалыдыр. Нүвә спектроскопијасында бу дәгиглик јалныз Мессбауер еффекти кәшф олунандан сонра мүмкүн олмушду.



Шәкил 28.
а) Шүаланма спектри
б) Удулма спектри

Нүвәнин енержи сәвијјәләринин ифрат инчә гурулушу нүвәнин магнит вә квадрупол моментләри илә атомун дахилиндәки бағлы вә кристалдакы сәрбәст електронлар вә кристалын дахили саһәләри арасында мејдана чыхан гаршылыглы тә'сир нәтичәси олдуғундан, тәпмәсиз резонанс удулма һадисәси истифадә едилән тәчрүби методлар нүвәнин һәјәчанланмыш сәвијјәсинә ујғун магнит вә квадрупол моментләринин гијмәтини, нүвәнин дахилиндәки магнит саһәсинин гијмәт вә истигамәтини тә'јин етмәјә имкан верир.

Мессбауер еффектиндән бәрк чисимләр физикасында, физики кимјада истифадәси даһа еффектли олмушдур. Онун васитәсилә кристалын истилик рәгсләринин спектри тә'јин едилмиш, икинчи нөв фаза кечидләри тәдгиг едилмиш, металлар ифрат кечиричилик һалына кечдикдә онун фонон вә електрон спектрләринин хассәләриндә баш вермиш дәјишикликләр өјрәнилмиш, кимјәви реаксијаларын кинетикасы тәдгиг едилмишдир вә и. а.

Мессбауер еффекти нисбилик нәзәријјәсиндә дә өз тәтбигини тапмышдыр. О, γ квант гравитасија потенсиаллары мүхтәлиф олан ики нөгтә арасындан кечдикдә, јер шәраитиндә, онун тезлијинин дәјишмәсини өлчмәјә имкан вермишдир.

Бу еффектин тәтбигләри олдугча кенишдир. Гыса да олса онларын үзәриндә дајанмаға белә имканымыз јохдур. Биз бурада еффектин физики маһијјәтини вә онун бә'зи тәтбиг саһәләрини көстәрмәклә кифајәтләнирик. Еффектин нәзәријјәси вә даһа кениш шәкилдә тәтбиги илә марагланан шәхсләр хүсуси әдәбијјата мүрачиәт едә биләрләр.

VII ФӘСИЛ

СӘПИЛМӘНИН КВАНТ НӘЗӘРИЈЈӘСИ

§ 52. СӘПИЛМӘНИН ЕФФЕКТИВ КӘСИЛИ

Зәррәчијин һәр һансы бир зәррәчиклә гаршылыглы тә'сир нәтичәсиндә өз әввәлки һәрәкәт истигамәтини дәјишмәси һадисәсинә сәпилмә дејилир. Сәпилмә нәзәријјәси бә'зән тоггушма нәзәријјәси дә адланыр, белә ки, классик механикада зәррәчикләрин өз әввәлки һәрәкәт истигамәтини дәјишмәси, онларын бир-бирилә билаваситә тоггушмасы нәтичәси кими баша дүшүлүр.

Сәпилмә просесинин замана көрә кедиши ашағыдакы кими тәсәввүр олунур: сонсуз узаглашдырылмыш (јә'ни $t\to-\infty$ -да) ики зәррәчик бир-биринә гаршы һәрәкәт едәрәк мүәјјән $t=t_0$ анында гаршылыглы тә'сирдә олур (јә'ни тоггушур) вә мүхтәлиф истигамәтләрдә сонсузлуға ($t\to+\infty$) кедир. §57–59-да бахачағымыз фотонларын атомларла тоггушмасына һәср олунмуш һадисәләр (дисперсија, фотоеффект, Комптон еффект) бу бахымдан тәһлил едилмишдир. Лакин бә'зи һалларда сәпилмә просесинин заманын кедишинә көрә, јә'ни квант кечидләри нәзәријјәси әсасында тәһлилини стасионар тәһлиллә әвәз етмәк әлверишли олур.

Сәпилмә просесинин замана көрә тәсвириндән стасионар тәсвирә кечмәк үчүн фәрз олунур ки, сонсузлугдан кәлән зәррәчикләр сели, сәпилмә мәркәзи илә гаршылыглы тә'сирдә олараг (тоггушараг) сәпилән селә чеврилир. Бурада сәпичи мәркәзә дүшән селдә зәррәчикләрин сыхлығынын кифајәт гәдәр кичик, сәпилмә мәркәзләри арасындакы мәсафәнин кифајәт гәдәр бөјүк олдуғу гәбул олунур. Бу онун үчүн лазымдыр ки, дүшән селдәки зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмасын (зәррәчикләр бири дикәриндән асылы олмајараг сәпилсин) вә һәр бири јалныз бир сәпичи мәркәздән сәпилсин. Стасионар тәсвирдә сәпилмә мәсәләсиндә мәгсәд, сәпичи саһә мә'лум олдугда, сәпичи мәркәздән кифајәт гәдәр узаг мәсафәдә сәпилән зәррәчикләр селинин дүшән зәррәчикләр селинин функсијасы кими тапмагдан ибарәтдир.

Сәпилмә мәсәләси ашағыдакы кими гојулур. Гаршы-гаршыја кәлән ики зәррәчикләр сели арасында гаршылыглы тә'сир олмадыгда онлар һәрәкәт истигамәтини дәјишмәдән өз һәрәкәтини давам етдирир. Гаршылыглы тә'сир ортаја чыханда исә онлар гаршылыглы сәпилир. Сәпилмә просесиндә зәррәчикләр енержисини дәјишмәјиб, јалныз һәрәкәт истигамәтини дәјишдикдә белә сәпилмә' *еластик сәпилмә*, һәрәкәт истигамәтиндән башга онларын дахили һалы (енержи вә башга физики характеристикалары) дәјишдикдә (зәррәчикләр һәјәчанландыгда), јени зәррәчикләр јарандыгда вә ја әввәлкиләр удулдугда белә сәпилмә *гејри-еластик сәпилмә* адланыр.

§ 57 вә 58-дә көстәрмишик ки, физики һадисә еффектив кәсиклә сәчијјәләнир. Сәпилмә просеси үчүн ону белә дә ифадә етмәк олар: сәпилмә просесинин еффектив кәсији ваһид заманда θ, φ бучаглары истигамәтиндә көтүрүлмүш $d\Omega$ чисим бучағы дахилиндә сәпилән $dN(\theta,\varphi)$ зәррәчикләр сајынын сәпичи мәркәзә дүшән зәррәчикләрин сели сыхлығына нисбәтинә бәрабәрдир:

$$d\sigma=\frac{dN(\theta,\varphi)}{j_{\text{дүш}}}. \qquad (52.1)$$

$d\sigma$–диференсиал еффектив кәсик адланыр.

Сәпичи мәркәздән хејли узаг ($r\to\infty$) мәсафәдә сәпилән зәррәчикләр сели сыхлығыны $j_{\text{сәп}}$ илә ишарә етсәк, $dN(\theta,\varphi)$-ни $j_{\text{сәп}}$ илә ифадә етмәк олар:

$$dN(\theta,\varphi)=j_{\text{сәп}}\,dS=j_{\text{сәп}}\,r^2d\Omega. \qquad (52.2)$$

Бурада $dS=r^2d\Omega$ – сәпичи мәркәзи r мәсафәдә гапајан S сәтһинин $d\Omega$ чисим бучағы алтында көрүнән һиссәсидир. (52.2)-ни (52.1)-дә јазсаг,

$$d\sigma=\frac{j_{\text{сәп}}}{j_{\text{дүш}}}r^2d\Omega. \qquad (52.3)$$

Бурадан көрүнүр ки, еффектив кәсијин өлчүсү (димензиону) сәтһин өлчүсү илә ејнидир вә θ, φ бучагларындан асылыдыр.

Дүшән зәррәчикләрин сел сыхлығы тәчрүбәдә әввәлчәдән мә'лум олдуғундан ($j_{\text{дүш}}$=const) һадисәнин там еффектив кәсији көстәрилән күрәнин сәтһи үзрә көтүрүлмүш интеграла бәрабәр олар:

$$\sigma=\frac{1}{j_{\text{дүш}}}\oint\vec{j}_{\text{сәп}}\,(r,\theta,\varphi)d\vec{S}. \qquad (52.4)$$

Интеграл көтүрүлән сәтһин сәпичи мәркәздән кифајәт гәдәр узагда јерләшдији (атом өлчүләри бахымындан) гәбул олундуғундан, бу сәтһин һәр бир нөгтәсиндән кечән зәррәчијин радиал истигамәтдә һәрәкәт етдији фәрз олунур. Онда (52.4) бәрабәрлији

$$\sigma=\frac{1}{j_{\text{дүш}}}\oint j_{r\,\text{сәп}}\,dS_r \qquad (52.5)$$

кими јазылар.

§ 53. СӘПИЛМӘ АМПЛИТУДУ

Ики зәррәчикдән ибарәт системин һәрәкәтини тәсвир едәркән (§ 40) көрдүк ки, бу һәрәкәти системин әталәт мәркәзинин сәрбәст һәрәкәтинә ((40.8) тәнлији) вә зәррәчикләрдән биринин дикәринә нәзәрән нисби һәрәкәтинә кәтирмәк олур. Нисби һәрәкәти тәсвир едән Шрединкер тәнлији (40.9)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi + V(r)\Psi = E\Psi \qquad (53.1)$$

шәклиндәдир. Бурада $V(r)$–гаршылыглы тә'сирин потенсиал енержиси, $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ – системин кәтирилмиш күтләсидир, $\vec{r}$ –зәррәчикләр арасындакы мәсафәдир.

Сонсузлугдан кәлиб $V(r)$ саһәсиндә сәпиләрәк сонсузлуға кедән зәррәчијин енержиси, јәгин ки, сыфырдан бөјүк олмалыдыр. Бу бахымдан (53.1) тәнлијинә μ –күтләли зәррәчијин сүкунәтдә олан икинчи зәррәчијин јаратдығы $V(r)$ саһәсиндә һәрәкәтини тәсвир едән тәнлик кими дә бахмаг олар. Белә зәррәчијин $r\to\infty$ -да мүшаһидә олунма еһтималынын сыфырдан фәргли галмасы үчүн (53.1)-ә дахил олан $E > 0$ олмалыдыр. Беләликлә, сәпилмә нәзәријјәсиндә енержинин алдығы гијмәтләр ардычыллығы кәсилмәз спектр тәшкил едир.

Зәррәчијин белә һәрәкәтиндә $V(r)$ функсијасы, јәгин ки, мүәјјән мәһдуд областда сыфырдан фәргли олур:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > a \\ \neq 0, & r \le a \end{cases} \qquad (53.2)$$

Бу област гүввәләрин тә'сир областы адланыр. Белә областда һәрәкәт едән зәррәчијин (53.1) Шрединкер тәнлијини

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = W(r)\ \Psi \qquad (53.3)$$

шәклиндә јазаг. Бурада

$$W(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r), \qquad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}. \qquad (53.4)$$

Гүввәләрин тә'сир областындан кәнарда зәррәчик сәрбәст һәрәкәт етдијиндән онун һәрәкәти

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = 0 \qquad (53.5)$$

тәнлијинин һәлли олан мүстәви далға илә тәсвир олунур. Координат системинин z-охуну дүшән зәррәчијин һәрәкәти истигамәтиндә јөнәлтсәк, V һәчминә нормаланмыш (V һәчминдә бир зәррәчијин олмасына ујғун) дүшән зәррәчијин далға функсијасы

$$\Psi^o = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{ikz} \qquad (53.6)$$

олар. Дүшән зәррәчикләрин еһтимал сели сыхлығы исә

$$j_{дүш} = j_z = \frac{i\hbar}{2\mu}\left(\Psi^o \frac{\partial\Psi^{o*}}{\partial z} - \Psi^{o*}\frac{\partial\Psi^o}{\partial z}\right) = \frac{\hbar k}{\mu V} = \frac{p}{\mu V} = \frac{\upsilon}{V}, \quad (53.7)$$

бурада $\frac{p}{\mu} = \upsilon$ –дүшән зәррәчијин сүр'әтидир.

$W(r)$ саһәсиндә сәпилән зәррәчикләрин далға функсијасы (53.3) тәнлијинин һәлли олар. Хүсуси төрәмәли (53.3) тәнлијинин һәллини тапмаг үчүн Ψ -ни һәјәчанланмамыш системин Ψ^o далға функсијаларынын суперпозисијасы шәклиндә ахтармаг әвәзинә, ону интеграл тәнлик шәклинә салаг.

Фәрз едәк ки, фәзада

$$\rho(\vec{r},t) = \rho_o(\vec{r})e^{i\omega t} \qquad (53.8)$$

сыхлығы илә пајланмыш електрик јүкләринин јаратдығы саһәнин скалјар потенсиалы

$$\varphi(\vec{r},t) = \varphi_o(\vec{r})e^{i\omega t} \qquad (53.9)$$

Классик електродинамикадан мә'лумдур ки, $\varphi(\vec{r},t)$ потенсиалы

$$\nabla^2\varphi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} = -4\pi\rho \qquad (53.10)$$

Даламбер тәнлијини өдәјир. Бу тәнлијин һәлли мә'лумдур. $\vec{r}\,'$ нөгтәсинин јахын әтрафында јерләшмиш $\rho(\vec{r}\,',t)dV'$ јүкләринин фәзанын һәр һансы $\vec{r}$ нөгтәсиндә t анында јаратдығы саһәнин скалјар потенсиалы

$$\varphi(\vec{r},t) = \int \frac{\rho\left(\vec{r}\,',\ t - \frac{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}{c}\right)}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|}(d\vec{r}\,'), \qquad (53.11)$$

бурада $(d\vec{r}\,') = dV = dx'dy'dz'$; $|\vec{r} - \vec{r}\,'| - \vec{r}\,'$ нөгтәсиндән $\vec{r}$ мүшаһидә нөгтәсинә гәдәр олан мәсафәдир. (53.11)-дә (53.10) тәнлијинин јалныз кечикән һәлләри көтүрүлмүшдүр, чүнки мәһз онлар сәпилмә мәркәзиндән әтраф фәзаја јајылан – сәпилән далғалары характеризә едир.

(53.8)-дән $\rho(\vec{r},t)$ -нин, (53.9)-дан $\varphi(\vec{r},t)$ -нин ифадәләрини (53.11)-дә јазыб $e^{i\omega t}$ вуруғуна ихтисар етдикдә, (53.11) тәнлији

$$\varphi_o(\vec r) = \int \frac{\rho(\vec r\,')e^{i\frac{\omega}{c}|\vec r-\vec r\,'|}}{|\vec r - \vec r\,'|}(d\vec r\,') \tag{53.12}$$

шәклинә дүшәр. Еjни шәкилдә ρ вә φ-нин (53.8) вә (53.9)-дан ифадәләрини (53.10)-да јаздыгда

$$\nabla^2\varphi_o + \frac{\omega^2}{c^2}\varphi_o = -4\pi\rho_o. \tag{53.13}$$

(53.13) тәнлијинин (53.3) тәнлији илә мүгајисәсиндән көрүнүр ки, $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ вә $\rho_o(\vec r) = -\frac{1}{4\pi}W(\vec r)\Psi$ олдугда бу ики тәнлик бир-биринин үзәринә дүшүр. Она көрә (53.3)-үн һәлли

$$\Psi(\vec r) = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ik|\vec r-\vec r\,'|}}{|\vec r - \vec r\,'|}W(\vec r\,')\Psi(\vec r\,')(d\vec r\,') \tag{53.14}$$

(53.14)-үн алынмасы кедишиндән көрүнүр ки, (53.14) интеграл тәнлији сәпилән зәррәчикләрин далға функсијасыны тә'јин едир. z -охунун мүсбәт истигамәтиндә сәпилән зәррәчикләрдән башга, гүввәләрин тә'сир етдији областдан кәнарда, һәмин истигамәтдә һәрәкәт едән зәррәчикләр дә мөвчуд олдуғундан, (53.3) тәнлијинин үмуми һәлли бу ики зәррәчикләр нөвүнә ујғун хүсуси һәлләрин суперпозисијасы олар:

$$\Psi(\vec r) = \frac{e^{ikz}}{\sqrt V} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ik|\vec r-\vec r\,'|}}{|\vec r - \vec r\,'|}W(\vec r\,')\Psi(\vec r\,')(d\vec r\,') \tag{53.15}$$

Бу, (53.3) диференсиал тәнлијә еквивалент интеграл тәнликдир.

Гејд едәк ки, јалныз еластики сәпилмә үчүн (53.6) вә (53.14) дүстурларындакы k-лар мүтләг гијмәтчә бир-биринә бәрабәрдир.

Инди дә көстәрәк ки, (53.3) тәнлијинин (53.14) илә верилмиш хүсуси һәлли сәпичи мәркәздән узагларда, јә'ни $r \gg a$ јахуд $r\to\infty$ -да дағылан (сәпилән) далғаны характеризә едир.

Доғрудан да, сәпичи мәркәздән узаг мәсафәдә ($r\to\infty$)

$$|\vec r - \vec r\,'| = r\left(1 - \frac{2\vec r\vec r\,'}{r^2}\right)^{\frac12} \approx r\left(1 - \frac{\vec r\vec r\,'}{r^2}\right)$$

олдуғундан, (53.14) вә (53.15) ифадәләри ујғун олараг

$$\Psi_c = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int W(\vec r\,')e^{-ik\vec r\,'}\Psi(\vec r\,')(d\vec r\,') = A(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{53.16}$$

вә

$$\Psi_z = \frac{e^{ikz}}{\sqrt V} + A(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{53.17}$$

Бурада $\vec k = |\vec k|\frac{\vec r}{r}$ вә

$$A(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int W(\vec r\,')e^{-ik\vec r\,'}\Psi(\vec r\,')(d\vec r\,') \tag{53.18}$$

сәпилмә амплитуду адланыр.

Беләликлә, $r\to\infty$ -да сәпилән зәррәчикләри тәсвир едән (53.17) далға функсијасы дүшән мүстәви далға илә сәпилән сферик далғанын суперпозисијасына бәрабәрдир. Бу, (53.10) тәнлијинин һәллиндә јалныз кечикән һәлләрин сечилмәси вә $r\to\infty$ -да јалныз сәпичи мәркәздән узаглашан зәррәчикләрин олмасы илә әлагәдардыр. Бу тәләб бүтүн сәпилмә мәсәләләри үчүн үмуми бир тәләбдир.

Сәпилмәнин $d\sigma$ еффектив кәсијини $A(\theta,\varphi)$ сәпилмә амплитуду илә ифадә етмәк үчүн сәпилән зәррәчикләрин селинин сыхлығыны һесаблајаг. Биз јухарыда гејд етдик ки, сәпичи мәркәздән узагларда зәррәчикләр $\vec r$ радиус вектору бојунча һәрәкәт едир. Онда еффектив кәсијин (52.3) ифадәсинә j_c векторунун јалныз j_{rc} радиал компоненти дахил олур.

Зәррәчикләр сели сыхлығынын (53.7) ифадәсинә ујғун олараг

$$j_{rc} = \frac{i\hbar}{2\mu}(\Psi_c\nabla_r\Psi_c^+ - \Psi_c^+\nabla_r\Psi_c)$$

олур, бурада $\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}$ олдуғундан $\Psi_c(r)$ -ин (53.16) ифадәсиндән

$$j_{rc} = \frac{\hbar k}{\mu r^2}|A(\theta,\varphi)|^2 \tag{53.19}$$

алыныр. $j_{дүш}$-нин вә j_{rc}-нин (53.19) ифадәләрини (52.3)-дә јеринә јазсаг,

$$d\sigma(\theta,\varphi) = |A(\theta,\varphi)|^2 d\Omega. \tag{53.20}$$

Беләликлә, сәпилмәнин диференсиал еффектив кәсијини тә'јин етмәк үчүн сәпилмә амплитудуну тапмаг лазымдыр.

§ 54. ЕЛАСТИК СӘПИЛМӘ

(53.16) вә ја (53.17) тәнликләриндә ахтарылан $\Psi(\vec r)$ функсијасы, јухарыда гејд етдијимиз кими, интеграл алтында олдуғуна көрә, о, интеграл тәнликдир. Ону адәтән ардычыл јахынлашма методу илә һәлл едирләр.

Биринчи јахынлашмада (53.17) тәнлијинин сағ тәрәфинә онун W=0-а ујғун (53.6) һәллини јазмаг олар:

$$\Psi^{(1)} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} - \frac{1}{4\pi\sqrt{V}}\int \frac{e^{ik|\vec r - \vec r'|}}{|\vec r' - \vec r|} W(\vec r')e^{ikz'}(d\vec r'). \qquad (54.1)$$

$\Psi^{1)}$ -ин бу ифадәсини (53.17) интеграл тәнлијин сағ тәрәфиндә $\Psi(\vec r')$-ин јеринә јазмыш олсаг, онун икинчи јахынлашмада даһа дәгиг һәллини алмыш оларыг. Лакин, биз биринчи јахынлашма илә кифајәтләнәчәјик. Бу јахынлашма *Борн јахынлашмасы* адланыр.

Тәчрүбәдә һәмишә сәпилән зәррәчикләр сәпичи мәркәздән хејли узаг мәсафәләрдә (атом өлчүләринә нәзәрән) мүшаһидә олунур. Она көрә дә (54.1) функсијасынын асимптотик (r>>a вә ја $r\to\infty$) ифадәсини тапмаг лазым олур, интеграл исә гүввәләрин тә'сир областында ($r' \le a$) көтүрүлдүјүндән $\vec r >> \vec r'$ олур. (54.1)-ә дахил олан интегралын асимптотик ифадәси (53.16) илә верилмишдир. (54.1)-дә $kz' = \vec k_o \vec r'$ әвәзини гәбул етсәк, $\Psi^{(1)}(\vec r)$ функсијасынын асимптотик ифадәси

$$\Psi^{(1)}_{ac} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi\, r\sqrt{V}}\int W(\vec r')e^{i(\vec k_o - \vec k)\vec r'}(d\vec r') \qquad (54.2)$$

олар. Гејд едәк ки, еластик сәпилмәдә $|\vec k| = |\vec k_o|$-дыр.

$W(\vec r')$-ин (53.4) илә верилмиш ифадәсини (54.2)-дә јазсаг,

$$\Psi^{(1)}_{ac} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2\sqrt{V}}\frac{e^{ikr}}{r}\int V(\vec r')e^{i(\vec k_o - \vec k)\vec r'}(d\vec r') \qquad (54.3)$$

Бу ифадәнин (53.17) илә мүгајисәсиндән алыныр ки, Борн јахынлашмасында сәпилмә амплитуду

$$A(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2\sqrt{V}}\int V(\vec r')e^{i\vec q\vec r'}(d\vec r') \qquad (54.4)$$

ифадәси илә тә'јин олунур. Бурада тоггушма вектору адланан

$$\vec q = \vec k_o - \vec k\ ,\ \ q = 2k\sin\frac{\theta}{2}. \qquad (54.5)$$

Бу ахырынчы ифадәләрдә $\vec k_o$ –дүшән зәррәчикләрин һәрәкәти истигамәтиндә, $\vec k$ исә сәпичи мәркәздән сәпилән зәррәчикләр мүшаһидә

едилән нөгтәјә чәкилән радиус-вектор истигамәтиндә јөнәлмишдир. Онда θ –сәпилмә бучағы олур.

$V(\vec r)$ потенсиал функсија илә сәчијјәләнән саһә сферик (мәркәзи) симметријаја маликдирсә, $V(\vec r)$ јалныз $\vec r$ -ин мүтләг гијмәтиндән асылы олур. Онда белә саһәдә сәпилмә амплитуду јалныз θ сәпилмә бучағынын функсијасыдыр. Бахылан саһәдәки һәрәкәт үчүн (54.4)-дә бучаглара көрә интеграллар асанлыгла көтүрүлүр. Доғрудан да, $\vec q$ илә $\vec r'$ (бурада штрихи атмаг олар) векторлары арасындакы бучаглары θ' вә φ' илә ишарә етсәк (θ илә гарышдырмамаг үчүн)

$$A(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_0^\infty V(r)r^2dr\int_0^\pi e^{iqr\cos\theta'}\sin\theta' d\theta'\int_0^{2\pi}d\varphi' = -\frac{\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2dr \quad (54.6)$$

$A(\theta)$-нын бу ифадәсини (53.20)-дә јазанда еластик сәпилмәни сәчијјәләндирән диференсиал еффектив кәсик үчүн Борн јахынлашмасында

$$d\sigma = \frac{4\mu^2}{\hbar^4}\left|\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2dr\right|^2 d\Omega \qquad (54.7)$$

кими үмуми ифадә алыныр.

Инди дә (54.7) дүстуру васитәсилә Z_1e јүкүнә малик ихтијари бир зәррәчијин Z_2e нөгтәви јүкүн јаратдығы Кулон саһәсиндә сәпилмәнин диференсиал еффектив кәсијини һесаблајаг. Мәсәлән, Z_2e јүклү нүвәнин Кулон (мәркәзи) саһәсиндә сәпилән зәррәчик електрон (Z_1=1), α-зәррәчик (Z_1 =2), истәнилән атомун иону вә и.а. ола биләр.

Z_1e јүклү зәррәчијин белә саһә илә гаршылыглы тә'сир енержиси

$$V(r) = \pm\frac{Z_1Z_2e^2}{r} \qquad (54.8)$$

олар. Бу (54.7) -дә јазылса,

$$d\sigma = \frac{4\mu^2}{\hbar^4}\frac{Z_1^2Z_2^2e^4}{q^2}\left|\int_0^\infty \sin qrdr\right|^2 d\Omega \qquad (54.9)$$

алынар. Бурада тәсадүф олунан $\int_0^\infty \sin qrdr$ интегралы адәтән $\int_0^\infty e^{-\lambda r}\sin qrdr$ интегралынын $\lambda \to 0$ шәртилә көтүрүлмүш лимити кими ачылыр:

$$\lim_{\lambda\to0}\int_0^\infty e^{-\lambda r}\sin qrdr = \lim_{\lambda\to0}\frac{1}{2i}\int_0^\infty\left[e^{(iq-\lambda)r} - e^{-(iq+\lambda)r}\right]dr = \frac{1}{q} \qquad (54.10)$$

(54.10)-у (54.9)-да јаздыгда јүклү зәррәчикләрин Кулон саһәсиндә сәпилмәсини сәчијјәләндирән вә илк дәфә Резерфордун классик нәзәријјәдә σ үчүн алдығы ифадәјә кәлирик:

$$\sigma = \frac{(\mu Z_1 Z_2 e^2)^2}{4p^4 \sin^4\theta/2}. \qquad (54.11)$$

Бурада $p=\hbar k$ — сәпилән зәррәчијин импулсудур.

б) Асанлыгла көстәрмәк олар ки, квант кечидләри нәзәријјәсинин (бах §47) биринчи јахынлашмасы да јухарыда бахылан просес үчүн (54.11) ифадәсини кәтирир. Башга сөзлә, Борн јахынлашмасы гејри-стасионар һәјәчанланма нәзәријјәсинин биринчи јахынлашмасына еквиваләнтдир.

Доғрудан да, фәрз едәк ки, $t\to-\infty$-да сәрбәст һәрәкәт едән систем (јә'ни зәррәчик) $\Psi_n(\vec r,t)=\frac{1}{\sqrt V}e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n t-\vec p_n\vec r)}$ дalға функсијасы илә сәчијјәләнән $|n>$ башланғыч һалдан, $V(r)$ сферик симметрик саһәнин тә'сири алтында сәпиләндән сонра $t\to\infty$-да $\Psi_k=\frac{1}{\sqrt V}e^{-\frac{i}{\hbar}(E_k t-\vec p_k\vec r)}$ далға функсијасы илә характеризә олунан сәрбәст һәрәкәтин һәр һансы $<k|$ һалына кечмишдир (бурада n вә k –индексләри кәсилмәдән дәјишир). Гејри-стасионар һәјәчанланма нәзәријјәсинин (47.12) вә (47.17) дүстурларына көрә белә кечидин еһтималы

$$W_{kn}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\frac{1}{V}\int e^{-i\vec k\vec r}V(r)e^{i\vec k_o\vec r}(d\vec r)\right|^2\delta(E_k-E_n) \qquad (54.12)$$

олар. Адәтән системин сон мүмкүн һаллардан һансына кечдији мә'лум олмадығындан сәпилмә просесләриндә системин сон мүмкүн һаллардан һәр һансы биринә (фәрги јохдур һансына) кечид еһтималы һесабланыр. Еһтималларын топланмасы теореминә көрә белә һадисәнин еһтималы сон мүмкүн һалларын еһтималлары чәми кими һесабланыр. Беләликлә, бахылан һадисәнин там еһтималы (54.12)-дән $\vec k$ далға вектору үзрә көтүрүлмүш чәмә (интеграла) бәрабәрдир:

$$W=\sum_{\vec k} W_{kn}=\frac{2\pi}{\hbar V}\sum_{\vec k}\frac{1}{V}\left|\int e^{i\vec q\vec r}V(\vec r)(d\vec r)\right|^2\delta(E_k-E_n). \qquad (54.13)$$

Бурада

$$\frac{1}{V}\sum_{\vec k}\to\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec k=\frac{1}{(2\pi)^3}\int k^2 dk d\Omega$$

кечидиндән истифадә едиб, һәр ики һалда зәррәчијин сәрбәст һәрәкәт етдијини, јә'ни $E_n=\frac{p_n^2}{2\mu}=\frac{\hbar^2k_o^2}{2\mu}$ вә $E_k=\frac{p_k^2}{2\mu}=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$W=\frac{1}{\hbar(2\pi)^2V}\left|\int e^{i\vec q\vec r}V(r)(d\vec r)k^2dkd\Omega\delta\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}(k^2-k_o^2)\right]\right| \qquad (54.14)$$

олар. Бурада $\vec q=\vec k-\vec k_o$ тоггушма векторудур. (54.14)-ә дахил олан k үзрә интегралы δ-функсија васитәсилә көтүрүб, еластик сәпилмә үчүн $|\vec k|=|\vec k_o|$ олдуғуну нәзәрә аланда кечид еһтималы үчүн

$$W=\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{\mu k}{\hbar^3V}\left|\int e^{i\vec q\vec r}V(r)(d\vec r)\right|^2d\Omega=\int W(\theta)d\Omega \qquad (54.15)$$

алынар. Бурада

$$W(\theta)=\frac{\mu k}{(2\pi)^2\hbar^3V}\left|\int e^{i\vec q\vec r}V(r)(d\vec r)\right|^2. \qquad (54.16)$$

Сәпилмә амплитуду $A(\theta,\varphi)$-нин (54.4) илә верилмиш ифадәсинә әсасән

$$W(\theta)=\frac{\hbar k}{\mu V}|A(\theta,\varphi)|^2 \qquad (54.17)$$

олар.

Сәпилән зәррәчикләрин бучаглара көрә пајланмасыны характеризә едән $W(\theta)$ еһтималыны һадисәнин еффектив кәсији илә әлагәләндирмәк үчүн ону дүшән зәррәчикләрин еһтимал сели сыхлығына бөлмәк лазымдыр. (53.7) вә (54.17)-дән

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{W(\theta)}{\upsilon/V}=\frac{\mu}{\hbar k}V\,W(\theta)=|A(\theta,\varphi)|^2 \qquad (54.18)$$

алыныр. Бу исә (53.20) дүстурунун үзәринә дүшүр.

§ 55. ПАРСИАЛ ДАЛҒАЛАР МЕТОДУ. ПАРСИАЛ ЕФФЕКТИВ КӘСИК

Әввәлки параграфда зәррәчикләрин ихтијари $V(\vec r)$ саһәсиндә сәпилмә просесинин тәхмини нәзәријјәси илә таныш олдуг вә хүсуси бир һал кими, јүклү зәррәчијин Кулон саһәсиндә сәпилмәсини характеризә едән еффектив кәсијин аналитик ифадәси тапылды. Инди дә (53.1) вә ја (53.3)

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = W(r)\Psi \qquad (53.3)$$

тәнлијинин дәгиг һәллини тапмаға чалышаг. Сәпичи саһә сферик симметрик, јә'ни $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|)$ олдугда (53.3) тәнлијинин дәгиг һәлли үчүн парсиал далғалар методу тәклиф олунмушду.

Зәррәчијин сферик симметрик саһәдә сәпилмә нәзәријјәси онун белә саһәдәки һәрәкәти илә әлагәдардыр. Белә һәрәкәт һәм финит (мәһдуд фәзада) $E < 0$ вә һәм дә инфинит (сонсуз фәзада) $E > 0$ һаллары үчүн §40-да тәһлил едилмишдир. Орада көстәрилмишдир ки, енержинин $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2\mu} > 0$, һәрәкәт мигдары моментинин квадратынын $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ вә һәрәкәт мигдары моментинин $L_z = m\hbar$ пројексијасынын мәхсуси гијмәтләринә ујғун хүсуси һәлл

$$\Psi_{klm} = C_{klm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad (55.1)$$

(бах (40.69)), енержинин мүәјјән $E_k = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ гијмәтинә ујғун үмуми һәлли исә

$$\Psi_k = \sum_{l,m} C_{klm} R_{kl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \qquad (55.2)$$

шәклиндә јазылыр.

Јәгин ки, сәпилмә просеси үчүн (55.2) үмуми һәлдән елә хүсуси һәлл тапылмалыдыр ки, онун асимптотик ($r \to \infty$-дакы) ифадәси (53.17) илә верилмиш

$$\Psi_{r\to\infty} = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{V}} + A(\theta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (55.3)$$

функсијасы үзәринә дүшсүн. (54.6) илә верилмиш $A(\theta,\varphi)$ сәпилмә амплитуду сферик симметрик саһәдәки һәрәкәт үчүн φ бучағындан асылы олмадығындан, (55.3) асимптотик һәлл дә φ-дән асылы олмур. (55.2)-дән φ-дән асылы олмајан һәлл о вахт алынар ки, чәмдә m-дән асылы олан бүтүн һәдләр атылмыш олсун, јә'ни $Y_{l0}(\theta)$ илә мүтәнасиб һәдләр сахлансын. Y_{l0} Лежандр полиному $P_l(\cos\theta)$-дән сабитлә фәргләндијиндән, ахтарылан һәлл

$$\Psi(r,\theta) = \sum_l C_l R_l(r) P_l(\cos\theta) \qquad (55.4)$$

олар. $\Psi(r,\theta)$ функсијасынын дәгиг ифадәсини тапмаг үчүн C_l-әмсаллары тапылмалыдыр. Бунун үчүн $R_l(r)$-ин (39.18′) илә верилмиш

$$R_l(r) = a\frac{e^{ikr}}{r} + b\frac{e^{-ikr}}{r} \qquad (55.5)$$

асимптотик ифадәсинә мүрачиәт едәк. Енержи $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ мүсбәт олдугда $k = \sqrt{\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}}$ һәгиги әдәд олдуғундан, (55.5) функсијасы мәркәзә дүшән вә ондан чыхан (сәпилән) сферик далғаларын суперпозисијасы олур. E>0 - да $R_l(r)$-ин дә һәгиги функсија олмасы үчүн ону

$$R_l(r) = a_l\frac{\sin(kr + \beta_l)}{r} \qquad (55.6)$$

шәклиндә јазмаг олар (функсијанын биргијмәтлилик шәртиндән). Онда

$$\Psi_{r\to\infty} \approx \sum_{l=0}^{\infty} C_l a_l P_l(\cos\theta)\frac{\sin(kr + \beta_l)}{r}. \qquad (55.7)$$

Сонракы һесабламаларын әлверишли апарылмасы үчүн $\beta_l = \delta_l - l\dfrac{\pi}{2}$ вә $C_l a_l = \dfrac{b_l}{k}$ әвәзләрини көтүрәк

$$\Psi_{r\to\infty} = \sum_{l=0}^{\infty} b_l P_l(\cos\theta)\frac{\sin(kr + \delta_l - l\pi/2)}{r}. \qquad (55.8)$$

Зәррәчикләрин сферик симметрик саһәдәки һәрәкәтинә аид истәнилән мәсәләнин асимптотик һәллини (55.8) шәклиндә көстәрмәк олар. $A(\theta)$ сәпилмә амплитудунун b_l әмсалларындан вә δ_l фазаларындан асылы ифадәсини тапмаг үчүн (55.3) функсијасыны да (55.8) шәклиндә көстәрәк. Бунун үчүн әввәлчә e^{ikz} функсијасыны $P_l(\cos\theta)$ Лежандр полиномлары үзрә сыраја ајыраг (P_l - функсијалары там систем тәшкил едир):

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(r) P_l(\cos\theta). \qquad (55.9)$$

Бурада $f_l(r)$ әмсаллары јәгин ки, r-ин функсијасы олар.

Физики олараг e^{ikz}-ин белә сыраја ајрылмасы мүстәви далғаны дурғун сферик далғаларын суперпозисијасы шәклиндә көстәрмәк, јә'ни һәрәкәт мигдары моментинин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун һаллар үзрә координат башланғычына (r=0) нәзәрән сыраја ајырмаг демәкдир. Бу сыранын һәр бир һәдди $W(r)$=0-да (53.3) тәнлијинин һәллидир.

$f_l(r)$ әмсалларыны тапмаг үчүн (55.9)-у солдан $P_l(\cos\theta)$-ја вуруб, θ-нын бүтүн дәјишмә $(0,\pi)$ интервалы үзрә интеграллајаг. Әлверишлилик үчүн $\cos\theta = x$ әвәзини көтүрүб $(0,\pi)$ интервалыны $(-1,1)$ илә әвәз едәк:

$$\int_{-1}^{1} e^{ikrx} P_{l'}(x)dx = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(r)\int_{-1}^{1} P_{l'}(x)P_l(x)dx$$

(14.27)-дән

$$\int_{-1}^{1} P_{l'}(x)P_l(x)dx = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \tag{55.10}$$

олдуғуну нәзәрә алыб, l үзрә чәми $\delta_{ll'}$ символу васитәсилә көтүрсәк,

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2}\int_{-1}^{1} e^{ikrx}P_l(x)dx \tag{55.11}$$

алынар.

$f_l(r)$-ин r-ин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә ифадәсини тапмаг үчүн (55.11)-дә сағ тәрәфдә дајанан интегралы һиссә-һиссә ачаг:

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{1}\left\{\frac{e^{ikrx}}{ikr}P_l(x)\Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1}\frac{e^{ikrx}}{ikr}\frac{dP_l(x)}{dx}dx\right\}$$

$P_l(x)$ ин (14.25) илә верилмиш

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

ифадәсиндән $P_l(x=1)=1$, $P_l(x=-1)=(-1)^l$ олдуғундан

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2}\left\{\frac{e^{ikr}-(-1)^l e^{-ikr}}{ikr} - \frac{1}{ikr}\int_{-1}^{1} e^{ikrx}\frac{dP_l(x)}{dx}dx\right\} \tag{55.12}$$

олар. $P_l(x)$-ин јухарыдакы ифадәсиндән көрүндүјү кими о, l-ин үстлү полиному олдуғу һалда $\frac{dP_l(x)}{dx}$ төрәмәси $(l-1)$ үстлү полиному олур. Она көрә дә (55.12)-дәки интегралы бир дәфә дә һиссә-һиссә ачаг, алынан нәтичә $\frac{1}{(ikr)^2}$ илә мүтәнасиб олур. Беләликлә, (55.11)-дәки интегралы l дәфә һиссә-һиссә ачанда алынан һәр бир һәддә r-ин үстү ондан әввәл кәлән һәддән бир ваһид бөјүк олачаг. $f_l(r)$-ин асимптотик ифадәси ахтарылдығындан $\frac{1}{r^2}$-дан башлајараг бүтүн сонракы һәдләри биринчи һәддә нәзәрән атмаг олар:

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2}\cdot\frac{e^{ikr}-(-1)^l e^{-ikr}}{ikr} \tag{55.13}$$

Бу ифадәни садәләшдирмәк үчүн $(-1)^l$-и

$$(-1)^l = (e^{i\pi})^l = e^{il\pi/2}e^{il\pi/2}$$

ифадәси илә әвәз едәк. Онда

$$f_l(r) = \frac{2l+1}{2}e^{il\pi/2}\frac{e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}}{ikr},$$

бурада

$$e^{il\pi/2} = (\cos\pi/2 + i\sin\pi/2)^l = i^l$$

олдуғуну нәзәрә алдыгда

$$f_l(r) = i^l(2l+1)\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{kr} \tag{55.14}$$

алынар. $f_l(r)$-ин бу ифадәсини (55.9)-да јеринә јазанда (55.3) функсија-сынын биринчи e^{ikz} һәдди үчүн

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{kr} \tag{55.15}$$

асимптотик ифадәси алыныр.

Инди дә (55.3) функсијасынын икинчи һәддиндә $A(\theta)$ сәпилмә амплитудуну Лежандр полиномлары үзрә сыраја ајыраг:

$$A(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} g_l P_l(\cos\theta) \tag{55.16}$$

бурада g_l әмсаллары әдәддир.

(55.15) вә (55.16) ифадәләрини (55.3)-дә јеринә јазсаг,

$$\Psi_{r\to\infty} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{\sin(kr+\delta_l-l\pi/2)}{kr} + \sum_{l=0}^{\infty} g_l P_l(\cos\theta)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{55.17}$$

Дикәр тәрәфдән биз јухарыда көрдүк ки, һәмин бу функсија (55.8) илә верилмиш асимптотик ифадәјә дә маликдир. θ-нын истәнилән гијмәтиндә бу функсијаларын бир-биринә бәрабәр олмасы үчүн $P_l(\cos\theta)$-нын үјғун әмсаллары бир-биринә бәрабәр олмалыдыр. (55.8) вә (55.16)-да i^l-и $e^{il\pi/2}$ вә синуслары експоненсиал функсијаларла әвәз едиб, ики функсијанын бәрабәрлијини тәләб етсәк, әмсаллар арасында

$$\frac{1}{2ik}b_l e^{i(\delta_l - l\pi/2)} = \frac{2l+1}{2ik} + g_l$$
$$\frac{1}{2ik}b_l e^{-i(\delta_l - l\pi/2)} = \frac{2l+1}{2ik}e^{il\pi} \qquad (55.18)$$

мүнасибәтләр алынар. Икинчи мүнасибәтдән

$$b_l = (2l+1)e^{i(\delta_l + l\pi/2)} \qquad (55.19)$$

вә b_l-ин бу гијмәтини (55.18)-ин биринчи мүнасибәтиндә јеринә јазсаг, g_l үчүн

$$g_l = \frac{2l+1}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1) \qquad (55.20)$$

алынар. Нәһајәт g_l -ин бу ифадәсини (55.16)-да јазсаг,

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta). \qquad (55.21)$$

Бурадан (53.17)-јә ујғун сәпилмәнин диференсиал ефектив кәсији үчүн

$$d\sigma = |A(\theta)|^2 d\Omega = \frac{1}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta)\right|^2 d\Omega \qquad (55.22)$$

алынар. (55.22)-дән көрүнүр ки, сәпилмәнин ефектив кәсији δ_l- фазалары чохлуғу илә тә'јин олунур.

Сәпилмәнин σ там ефектив кәсијини тапмаг үчүн комплекс кәмијјәтин модулунун квадратыны ачыб, θ-бучағы үзрә интеграл көтүрәк. (55.22)-дә θ-дәјишәниндән x=cosθ дәјишәнинә кечиб $d\Omega$=sin$\theta d\theta d\varphi$= =$-2\pi d(\cos\theta)$=$-2\pi dx$-дән истифадә етсәк,

$$\sigma = \frac{\pi}{2k^2}\sum_{l,l'=0}^{\infty}\left[(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)\right]\left[(2l'+1)(e^{-2i\delta_{l'}} - 1)\right]\int_{-1}^{1}P_l(x)P_{l'}(x)dx,$$

(55.10)-а көрә

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l} - 1)(e^{-2i\delta_l} - 1) =$$
$$= \frac{(2i)^2}{k^2}\pi\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\frac{e^{i\delta_l} - e^{-i\delta_l}}{2i}\cdot\frac{e^{-i\delta_l} - e^{i\delta_l}}{2i}e^{-i\delta_l}$$

јахуд

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \qquad (55.23)$$

(55.23)-дән көрүнүр ки, сәпилмәнин σ там еффектив кәсији парсиал еффектив кәсикләр адланан σ_l-ин чәми кими көстәрилә биләр:

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l, \qquad (55.24)$$
$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l.$$

Парсиал еффектив кәсикләрин һәр бири зәррәчијин l квант әдәди илә тә'јин олунан һәрәкәт мигдары моментинин мүәјјән гијмәтинә ујғундур. Мәсәлән, l =0 -да сәпилмә s -сәпилмә (σ_0), l=1-дә p-сәпилмә (σ_1) вә и.а. адланыр.

(55.22) вә (55.23)-дән көрүнүр ки, зәррәчијин верилмиш гүввә саһәсиндә сәпилмәнин һәм диференсиал вә һәм дә там еффектив кәсикләри δ_l- фазалар чохлуғу илә тә'јин олунур. Башга сөзлә, сәпилмәнин еффектив кәсикләринин тапылмасы δ_l фазаларынын һесабланмасына кәтирилир. δ_l - фазалары һесабламаг исә о гәдәр дә асан мәсәлә дејилдир. Фазалары һесабламаг үчүн әввәлчә зәррәчијин верилмиш саһәдәки һәрәкәтини тәсвир едән (R_{nl} үчүн) тәнлији һәлл едиб, һәллин бөјүк мәсафәләрдә ($r\to\infty$-да) асимптотик шәкли тапылмалыдыр. Сонра алынан нәтичәни $R_l(r)$-ин (55.6) ифадәси илә мүгајисә едәрәк δ_l фазалары тапылыр. Беләликлә, ујғун Шрединкер тәнлијинин дәгиг һәлли, бүтүн δ_l фазаларыны тапмаға вә бунунла да сәпилмәнин еффектив кәсикләрини тә'јин етмәјә имкан верир.

Гејд едәк ки, b_l-ин (55.19) илә верилмиш ифадәсини (55.8)-дә јаздыгда далға функсијасы үчүн даһа бир асимптотик ифадә алыныр:

$$\Psi_{r\to\infty} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i(\delta_l + l\pi/2)}P_l(\cos\theta)\frac{\sin(kr + \delta_l - l\pi/2)}{kr}. \qquad (55.25)$$

Бурада, синусу јухарыдакы кими $\dfrac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$ - ифадәси илә әвәз етдикдә Ψ үчүн

$$\Psi_{r\to\infty} = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[\frac{(-1)^l e^{-ikr}}{r} - S_l\frac{e^{ikr}}{r}\right] \qquad (55.26)$$

ифадәси алынар, бурада

$$S_l = e^{2i\delta_l}. \qquad (55.27)$$

(55.26)-да квадрат мө'тәризәдәки биринчи һәдд амплитуду $(-1)^l$ олан мәркәзә дүшән сферик далғаны, икинчи һәдд исә амплитуду S_l олан мәркәздән кәнара јајылан сферик далғаны тәсвир едир. Һәр ики амплитудун модулунун квадраты ваһидә бәрабәрдир. Бу о демәкдир ки, еластик сәпилмәни тәсвир едән далға функсијасы мәркәзә дүшән вә ондан чыхан (сәпилән) сферик далғаларын топланмасындан јаранан дурғун далға шәклинә маликдир.

Дүшән сферик далғанын еһтимал сели сыхлығы

$$\vec{j}_g = \frac{\hbar}{2\mu c}|(-1)^l|^2\left\{\frac{e^{ikr}}{r}\nabla_r\left(\frac{e^{-ikr}}{r}\right) - \frac{e^{-ikr}}{r}\nabla_r\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)\right\} = \frac{\hbar k}{\mu r^2}\vec{e}_r$$

(55.28)

бурада $\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}$. Сәпилән сферик далғанын еһтимал сели сыхлығы исә

$$\vec{j}_c = |S_l|^2 \frac{\hbar k}{\mu r^2}\vec{e}_r. \quad (55.29)$$

Сәпилән далғанын амплитуду $|S_l|^2 = 1$ олдуғундан (55.28) вә (55.29) векторлары јалныз истигамәтчә фәргләнир. Бурадан чыхар ки, истәнилән сәтһдән вә ја истәнилән радиуслу күрәдән кечән еһтимал сели сыфра бәрабәрдир. Бу, она ујғундур ки, еластик сәпилмәдә мәркәзә дүшән зәррәчикләрин сајы, мәркәздән сәпилән зәррәчикләрин сајына бәрабәрдир, јә'ни еластик сәпилмәдә зәррәчикләр сајынын сахланма гануну өдәнилир.

§ 56. ГЕЈРИ-ЕЛАСТИК СӘПИЛМӘ

Тоггушмада иштирак едән зәррәчикләрин дахили һалы дәјишән сәпилмәјә гејри-еластик сәпилмә дејилир. Белә сәпилмә просесләринә атомларын вә нүвәләрин һәјәчанланмасы, атомларын ионлашмасы, нүвәләрин парчаланмасы, зәррәчикләрин башга нөв зәррәчикләрә чеврилмәси, јени зәррәчикләрин јаранмасы вә ја тоггушан зәррәчикләрин удулмасы вә и.а. кими просесләр аиддир.

Садаланан просесләр тоггушан зәррәчикләрин дахили һалы дәјишмәјән просес дә ола биләр. Онда белә просесдә иштирак едән зәррәчик еластик сәпилмиш һесаб олунур.

Зәррәчикләрин гејри-еластик тоггушмасы заманы зәррәчикләрдән һәр бири бахылан анда јалныз бир нөв просесдә иштирак едә биләр. Бу просес мүәјјән јох, садаланан просесләрдән һәр һансы бири ола биләр. Бири баш верирсә, дикәри гадаған олунан вә бир-бирини инкар едән просесләрдән һәр һансы биринин (фәрги јохдур һансынын) мүшаһидә олунма еһтималы һәр нөв просесин ајрылыгда мүшаһидә олунма еһтималлары чәминә бәрабәр олар.

Бу бахымдан тоггушан зәррәчикләрин асимптотик далға функсијасы бу просесләрин һәр биринә аид олан һәдләрин чәми шәклиндә јазылар. Биз еластик сәпилмәјә аид олан һәддин тәһлили илә башлајаг.

Бундан әввәлки параграфда көстәрдик ки, еластик сәпилмәни тәсвир едән далға функсијасы сәпичи мәркәзә дүшән вә мәркәздән чыхан (сәпилән) сферик далғаларын чәмидир (бах (55.26)):

$$\Psi = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\left[(-1)^l\frac{e^{-ikr}}{r} - S_l\frac{e^{ikr}}{r}\right]. \quad (56.1)$$

Бахылан еластик просесдән башга, дикәр просесләр дә баш вердијиндән S_l артыг (55.27) илә тә'јин олунмур. Бурада о, модулу ваһиддән кичик һәр һансы комплекс кәмијјәт олур вә еластик сәпилән зәррәчикләр сели (сајы), дүшән зәррәчикләр селинә бәрабәр јох (бах (55.28) вә (55.29)), ондан кичик олур.

$A(\theta)$ сәпилмә амплитудунун (55.21) ифадәсини алдығымыз јолу бурада да тәкрар етсәк, онун үчүн

$$A(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta) \quad (56.2)$$

ифадәси алынар. Бу ифадә (55.21)-дән онунла фәргләнир ки, бурада $e^{2i\delta_l}$ вуруғу әвәзиндә модулу ваһиддән кичик олан S_l дурур.

$A(\theta)$-нын бу ифадәсини $d\sigma$-нын (53.20) ифадәсиндә јеринә јазанда

$$d\sigma = \frac{1}{4k^2}\sum_{l,l'}(2l+1)(2l'+1)(S_l-1)(S_{l'}-1)P_lP_{l'}d\Omega$$

алыныр. Бу ифадәни (55.10) әсасән бучаглара көрә интегралласаг,

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|S_l-1|^2 = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_l|^2. \quad (56.3)$$

Бурадан еластик сәпилмәнин парсиал еффектив кәсији

$$\sigma_{l_{el}} = \frac{\pi}{k^2}(2l+1)|1-S_l|^2. \quad (56.4)$$

Гејри-еластик сәпилмәнин еффектив кәсијини тапмаг үчүн сәпичи мәркәзи гапајан вә R радиусу хејли бөјүк олан сферадан кечән зәррәчикләр селини һесаблајаг. Бу сел, јәгин ки, (56.1) функсијасы илә тә'јин олунар:

$$dN = jdS = jR^2d\Omega = \frac{\hbar}{2\mu c}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^+}{\partial r} - \Psi^+\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)R^2d\Omega. \quad (56.5)$$

Әввәлләрдә олдуғу кими $\frac{1}{r}$-дән кичик вә $\frac{1}{r^n}$ $(n>1)$ илә мүтәнасиб һәдләри нәзәрә алмасаг, (56.1)-дән $\frac{\partial\Psi}{\partial r}$ үчүн ашағыдакы ифадә алынар:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial r}=-\frac{i}{2kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[(-1)^l e^{-ikr}+S_l e^{ikr}\right]P_l(\cos\theta)\,. \qquad (56.6)$$

(56.1), (56.6) вә (55.10)-а әсасән

$$N=-\frac{\hbar}{4\mu k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2)\frac{4\pi}{2l+1}=-\frac{\pi\hbar}{\mu k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2)\,. \qquad (56.7)$$

Бурада $|S_l|<1$ олдуғундан сел мәнфи олур, јә'ни бә'зи зәррәчикләр гејри-еластик сәпилмәјә мә'руз галдығындан еластик сәпилән зәррәчикләр сели сәпичи мәркәзә дүшән зәррәчикләр селиндән кичикдир.

(56.6) ифадәси күрәдән кечән еластик сәпилән вә дүшән зәррәчикләрин селләр фәргини көстәрдијиндән, гејри-еластик сәпилмиш зәррәчикләр сели, јәгин ки, (56.7) илә верилмиш селин мүсбәт ишарә илә көтүрүлмүш гијмәтинә бәрабәр олар:

$$N_{\text{г.ел}}=\frac{\pi\hbar}{\mu k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2)\,. \qquad (56.8)$$

Бу сели дүшән зәррәчикләрин еһтимал сели сыхлығына, јә'ни $\upsilon=\frac{p}{\mu}=\frac{\hbar k}{\mu}$ -јә бөлсәк, гејри-еластик сәпилмәнин там еффектив кәсијини аларыг:

$$\sigma_{\text{г.ел}}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2)\,. \qquad (56.9)$$

Парсиал еффектив кәсик исә

$$\sigma_{\text{г.ел}}=\frac{\pi}{k^2}(2l+1)(1-|S_l|^2). \qquad (56.10)$$

$S_l=1$ оланда гејри-еластик сәпилмәнин парсиал еффектив кәсији сыфра бәрабәр олур ($\sigma_{\text{г.ел}}=0$), демәли $S_l=1$ һалында олан зәррәчикләр гејри-еластик сәпилмәјә мә'руз галмыр. $S_l=0$ һалы зәррәчикләрин там удулмасына ујғун кәлир (сәпилән зәррәчик јохдур). Бу һалда (56.4) вә (56.10)-дан

$$\sigma_{l_{\text{г.ел}}}=\sigma_{l_{\text{ел}}}=\frac{\pi}{k^2}(2l+1)\,. \qquad (56.11)$$

(56.4) вә (56.10)-дан көрүнүр ки, онлардан бири сыфырдан фәрглидирсә, дикәри дә сыфырдан фәрглидир. Бу о демәкдир ки, гејри-еластик сәпилмә баш вердикдә, еластик сәпилмә дә баш верир.

§ 57. ФОТОЕФФЕКТ

Бағлы зәррәчијин, онун рабитә енержисиндән бөјүк енержијә малик олан фотону удма просесинә фотоеффект дејилир. Мәсәлән, атомун стасионар сәвијјәләрин бириндә олан електрон фотону удараг, кәсилмәз енержи спектри областына (сәрбәст һала) кечә биләр. Белә електрон фотоелектрон адланыр. Бу просес атомун фотон васитәсилә ионлашмасы да адлана биләр. Фотоеффекти $\hbar\,\omega$ енержиси атомун ионизасија енержисиндән бөјүк вә бәрабәр олан фотонлар јарадыр. Беләликлә:

$$\hbar\,\omega\geq I \qquad (57.1)$$

шәрти фотоеффектин јарана билмәси шәртидир.

Атомда електронун рабитә енержиси бөјүк олдугча, фотонун удулмасы заманы импулсун галыг һиссәсинин (електронун алдығы импулсдан әлавә) нүвәјә верилмәси просеси даһа асан баш верир. Она көрә дә фотоеффектин јаранмасы еһтималы K -тәбәгәсиндә олан електронлар үчүн максимум гијмәтә малик олур. Бу параграфда бу һалын тәһлили илә кифајәтләнәчәјик.

Квант кечидләри нәзәријјәсиндә кечидин ваһид заманда баш вермә еһтималы үчүн (47.16) ифадәсини алмышдыг:

$$W_{nm}=\frac{2\pi}{h^2}\left|V^o_{nm}\right|^2\delta(\omega-\omega_{mn})\,. \qquad (47.16)$$

Бурада

$$V^o_{nm}=-\frac{e}{mc}\int\Psi^{o+}_n(\vec r)(A(\vec r)\vec p)\Psi^o_m(\vec r)(d\vec r) \qquad (57.2)$$

кечид матрисасы, Ψ^o_n – атом-системинин сон, Ψ^o_m исә башланғыч һалынын далға функсијалары, $\vec A(\vec r)$ – фотонун (50.54) илә верилмиш далға функсијасы операторудур. Бурада, мәсәлән, $\hbar\,\vec k$ импулсуна вә $\vec a^o$ полјарлашма истигамәтинә малик фотонун удулдуғуну гәбул етсәк, (50.54)-дән

$$\vec A(\vec r)=\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}}\vec a^o e^{i\vec k\vec r}C_{kl}\,. \qquad (57.3)$$

$\Psi_m^o - K$ тәбәгәсиндә олан електронун $\Psi_{1s}(r,\theta,\varphi)$, Ψ_n исә сәрбәст һалда олан електронун $\Psi_2\,(r)$ һал функсијаларыдыр.

Атомун Кулон саһәсинин тә'сири нәзәрә алынмазса, фотоелектронун далға функсијасыны мүстәви далға шәклиндә, K-тәбәгәсиндәки електронун далға функсијасы кими исә, дикәр електронларын K-електронуна екранлајычы тә'сири кичик олдуғундан, нүвәнин Z-еффектив јүкү дахил олан һидрокенәбәнзәр атомун далға функсијасы көтүрүлә биләр:

$$\Psi_m^o = \Psi_{1s} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}}\, e^{-\frac{Zr}{a}}, \quad \Psi_n^o = \Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}, \tag{57.4}$$

бурада Ψ_2 – δ-функсијаја нормалашдырылмышдыр.

$1s$ һалындан сәрбәст һала кечән електронун импулсунун $\vec{p}$ илә $\vec{p}+d\vec{p}$ интервалында гијмәт алма еһтималыны тапмаг үчүн (47.16) ифадәсини бу интервалдакы квант һалларынын сајына вурмаг лазымдыр. Ψ_2-функсијасы δ-функсијаја нормаландығындан $\vec{p}$ илә $\vec{p}+d\vec{p}$ интервалындакы квант һалларынын сајы $(d\vec{p}) = p^2 dp d\Omega$ олар*. Онда

$$dW_{2,1s} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{2,1s}^o\right|^2 \delta(E_2 - E_{1s} - \hbar\omega)\, p^2 dp d\Omega, \tag{57.5}$$

бурада $d\Omega$ – дахилиндә фотоелектронун импулсунун истигамәти јерләшмиш елементар чисим бучағы, $\hbar\omega$ – дүшән фотонун енержиси, $E_2 = \dfrac{p^2}{2m}$ – фотоелектронун енержиси, E_{1s} – атомун $1s$ стасионар сәвијјәсинин енержиси, $\omega_{mn} = \omega_{2,1s} = \dfrac{E_2 - E_{1s}}{\hbar}$ – кечид тезлијидир.

δ-функсијанын хассәсиндән фотоеффектдә енержинин сахланма гануну

$$E_2 = \frac{p^2}{2m} = E_{1s} + \hbar\omega \tag{57.6}$$

---

* Ψ_2 -функсијасы $\Psi_2 = \dfrac{1}{\sqrt{V}} e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$ кими һәчмә нормаланмыш олсајды, $\vec{p}$ илә $\vec{p}+d\vec{p}$ интервалдакы квант һалларынын сајыны тапмаг вә ја сәрбәст електронун импулсу үзрә интеграл алмаг үчүн

$$\frac{1}{V}\sum_{\vec{p}} \to \frac{1}{(2\pi)^3}\int (d\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int p^2 dp d\Omega$$

кечидиндән истифадә етмәк лазымдыр.

алыныр. K-тәбәгәсиндән ионлашма енержиси

$$E_{1s} = -I = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \tag{57.6'}$$

олдуғундан, енержинин сахланма гануну

$$\frac{p^2}{2m} = -I + \hbar\omega \text{ вә ја } \frac{p^2}{2m} = \frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} + \hbar\omega \tag{57.6''}$$

кими јазыла биләр.

Фотоелектронун $E_2 = \dfrac{p^2}{2m}$ енержиси үзрә δ-функсија васитәсилә интеграл алаг. (57.6)-дан

$$dE_2 = \frac{1}{m} p dp \text{ вә ја } m dE_2 = p dp$$

олдуғундан, (57.5)-дә E_2 үзрә интеграл алсаг:

$$dW_{2,1s} = \frac{2\pi}{\hbar} m \left|V_{2,1s}^o\right|^2 p d\Omega. \tag{57.5'}$$

Инди дә $V_{2,1s}$ матриса елементинин һесабланмасына кечәк. Алынан нәтичәләр, јәгин ки, ағыр атомларын K-тәбәгәсиндән баш верән фотоеффект үчүн доғру олар. Буна көрә дә һесабламалары Z-еффектив јүкүн ихтијары гијмәти үчүн апараг. Ағыр атомларда фотоеффект јарадан фотонлар үчүн (рентген шуалары) $kr \ll 1$ шәрти өдәнилмәдијиндән $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ вуруғуну сыраја ајырмаг доғру олмаз.

(57.4)-дән Ψ_2 вә Ψ_{1s} функсијаларыны өз ифадәләри илә (57.5′) -дә әвәз етсәк,

$$V_{2,1s}^o = -\frac{e}{2\pi\hbar m}\sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 \omega L^3}}\,(\vec{a}^o\vec{J})C_{k\lambda} \tag{57.7}$$

алынар. Бурада

$$\vec{J} = \int e^{-i\vec{q}\vec{r}}\, \hat{\vec{p}}\, e^{-\frac{Zr}{a}}(d\vec{r}) \tag{57.8}$$

вә

$$\vec{q} = \frac{\vec{p}}{\hbar} - \vec{k}$$

нүвәјә верилән импулсун далға әдәдидир. $\vec{J}$ -дә һиссә-һиссә интеграл алаг. $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\vec{r}}$ олдуғундан

$$\upsilon = e^{-i\vec{q}\vec{r}}\ ,\ du = \frac{\partial}{\partial \vec{r}}(e^{-\frac{Zr}{a}})(d\vec{r}),$$

$$d\vec{\upsilon} = -i\vec{q}e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad u = e^{-\frac{Zr}{a}}$$

әвәзләриндә

$$\vec{J} = \vec{q}\int e^{-i\vec{q}\vec{r}}\cdot e^{-\frac{Zr}{a}}(d\vec{r})$$

олар. Бу интегралы ачмаг үчүн полјар оху $\vec{q}$ үзрә јөнәлдиб, сферик координат системинә кечәк. Әввәлчә бучаглара көрә интеграл алаг:

$$\int e^{-\frac{Zr}{a}} e^{-iqr\cos\theta}\sin\theta d\theta d\varphi r^2 dr = \frac{2\pi}{iq}\int_0^\infty\left\{e^{(iq-\frac{Z}{a})r} - e^{-(iq+\frac{Z}{a})r}\right\}rdr\ .$$

Ахырынчы интегралы һиссә-һиссә ачсаг,

$$\int e^{-\frac{Zr}{a}} e^{i\vec{q}\vec{r}}(d\vec{r}) = \frac{8\pi a^3}{Z^3\left(1+\frac{q^2a^2}{Z^2}\right)^2}$$

алынар. Онда

$$\vec{J} = \vec{q}\frac{8\pi a^3}{Z^3\left[1+\left(\frac{qa}{Z}\right)^2\right]^2}\ . \qquad (57.9)$$

$\vec{J}$-нин бу гијмәтини (57.7)-дә јазыб, шүаланма саһәсинин $\vec{k}\vec{a}^o = 0$ енинәлик шәртини нәзәрә алсаг, кечид матрисасы

$$V^o_{2,1s} = -\frac{4e}{\hbar m}\left(\frac{a^3}{\pi Z^3\omega L^3}\right)^{\frac{1}{2}}(\vec{a}^o\vec{p})\frac{1}{\left[1+\left(\frac{aq}{Z}\right)^2\right]^2}C_{k\lambda} \qquad (57.10)$$

$V^o_{2,1s}$-и (57.5′)-дә јазсаг, фотоеффектин баш вермә еһтималы

$$dW_{2,1s} = \frac{2^5 pa^3 d\Omega}{\hbar^3 Z^3 L^3 m\omega}(\vec{a}^o\vec{p})^+(\vec{a}^o\vec{p})\frac{1}{\left[1+\left(\frac{aq}{Z}\right)^2\right]^4}C^*_{k\lambda}C_{k\lambda}\ . \quad (57.11)$$

(57.6) вә (57.11) бәрабәрликләриндән көрүнүр ки, фотоеффектин классик нәзәријјәдәки чәтинликләри квант нәзәријјәсиндә там һәлл олунур. Доғрудан да, фотоелектронун сүр'әти фотонун јалныз тезлијиндән асылыдыр, енержиси $\hbar\omega < I$ олан фотонлар фотоеффект јарада билмир. О, $\hbar\omega = I$ кими гырмызы сәрһәддә маликдир вә нәһајәт, фотоелектронларын сајы дүшән шүаланманын $\left|\vec{A}\right|^2$ интенсивлији илә мүтәнасибдир. Бурадан көрүнүр ки, фотоеффектин еһтималы һадисә баш верән фәзанын L^3 һәчминдән асылыдыр. Белә һалларда һәмишә һадисәнин еһтималындан онун еффектив кәсијинә кечирләр. Еффектив кәсик (σ илә ишарә олунур) һадисәнин еһтималынын дүшән зәррәчијин (бахылан һалда фотонун) еһтимал сели сыхлығы j-ја олан нисбәтинә бәрабәрдир:

$$d\sigma = \frac{dW}{j}\ . \qquad (57.12)$$

j-нын (17.12) илә верилмиш ифадәсиндә Ψ әвәзиндә $\vec{A} = \vec{a}e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}}$ фотонун далға функсијасыны јазсаг,

$$j = \frac{c}{L^3} \qquad (57.13)$$

алынар (електрон үчүн $j = \frac{\upsilon}{L^3}$).

(57.11) вә (57.13)-дән

$$d\sigma = \frac{dW}{c}L^3\ . \qquad (57.14)$$

Дикәр тәрәфдән процесдә јеканә бир фотон удулдуғундан C^*_{kl} доғулма, $C_{k\lambda}$ удулма операторларынын (50.70) јердәјишмә мүнасибәтинә дахил олан $C_{k\lambda}C^+_{k\lambda}$ вә $C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}$ операторларынын

$$N_{k\lambda} + 1 = \langle \dot{N}_{k\lambda} + 1\left|C_{k\lambda}C^+_{k\lambda}\right|N_{k\lambda}\rangle \text{ вә } N_{k\lambda} = \langle N_{k\lambda} - 1\left|C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}\right|N_{k\lambda}\rangle$$

матриса елементләринин ифадәләриндән бизим һалда

$$\langle 0\left|C_{k\lambda}C^+_{k\lambda}\right|1\rangle = 0,\ \langle 0\left|C^+_{k\lambda}C_{k\lambda}\right|1\rangle = 1 \qquad (57.15)$$

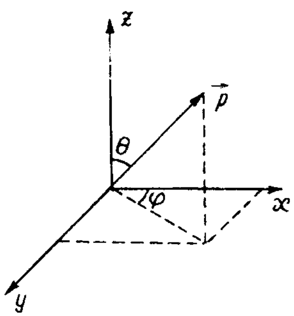
олур. Беләликлә, просес L^3 һәчминдә ваһид фотона нормаланыр.

dW-нин јеринә онун (57.11) илә верилмиш ифадәсини јазыб, (57.15) нәзәрә алсаг, диференсиал еффектив кәсик үчүн

$$d\sigma = \frac{2^5 pd\Omega}{\hbar\omega Z^3}\alpha^4 r_o^2\frac{c^3}{(mc^2)^2}(\vec{a}^o\vec{p})^+(\vec{a}^o\vec{p})\cdot\frac{1}{\left[1+\left(\frac{qa}{Z}\right)^2\right]^4} \qquad (57.16)$$

ифадәси алынар, бурада $r_o = \frac{e^2}{mc^2} \approx 10^{-13}\,см$ – електронун классик радиусудур. $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ – инчә гурулуш сабитидир.

Фотоелектронун импулсунун кифајәт гәдәр бөјүк, јә'ни $\frac{p^2}{2m} \approx \hbar\omega >> I$ шәртини өдәјән гијмәтиндә (57.16) ифадәсини хејли садәләшдирмәк олар.



Шәкил 29.

z-охуну фотонун $\hbar\vec{k}$ импулсу үзрә јөнәлдәк, онда $\vec{a}^o$ полјарлашма вектору, јәгин ки, x (вә ја y) оху үзрә јөнәләр (шәкил 29):

$$\vec{a}^o\vec{p} = p_{a_o} = p_x = p\sin\theta\cos\varphi, \quad (57.17)$$

$$(\vec{a}^o\vec{p})^2 = p^2\sin^2\theta\cos^2\varphi,$$

вә

$$q^2 = \left(\frac{\vec{p}}{\hbar} - \vec{k}\right)^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} + k^2 - \frac{2pk}{\hbar}\cos\theta.$$

q^2-нын бу ифадәсини $1+\frac{q^2a^2}{Z^2}$-да јазыб, $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$1+\frac{a^2q^2}{Z^2} = \frac{a^2}{Z^2}\left(q^2+\frac{Z^2}{a^2}\right) = \frac{a^2}{Z^2}\left(\frac{m^2e^4Z^2}{\hbar^4}+\frac{p^2}{\hbar^2}+k^2-\frac{2pk}{\hbar}\cos\theta\right) = \quad (57.18)$$

$$= \frac{a^2}{\hbar^2Z^2}\left(\frac{m^2Z^2e^4}{\hbar^2}+p^2-2pk\hbar\cos\theta+\hbar^2k^2\right).$$

(57.6″) енержинин сахланма ганунундан вә I-нин (57.6′) ифадәсиндән

$$p^2+\frac{m^2Z^2e^4}{\hbar^2} = 2m\hbar ck$$

олдуғундан

$$1+\frac{q^2a^2}{Z^2} = \frac{a^2}{\hbar Z^2}k(2mc-2p\cos\theta+\hbar k) \quad (57.19)$$

олар. Фотонун енержисинин електронун мәхсуси енержисиндән кифајәт гәдәр кичик олдуғуну гәбул етсәк, јә'ни $mc^2 >> \hbar ck$ вә ја $mc >> \hbar k$, (57.19)-да ахырынчы һәдди нәзәрә алмамаг олар:

$$1+\frac{q^2a^2}{Z^2} = \frac{2m\hbar\omega}{\hbar^2Z^2}a^2(1-\beta\cos\theta), \quad (57.20)$$

бурада $\beta = \frac{p}{mc} = \frac{\upsilon}{c}$-дир. I рабитә енержисинин дә фотоелектронун енержисиндән хејли кичик олдуғу фәрзијјәси әсасында (57.6)-дан $p \approx \sqrt{2m\hbar\omega}$ алынар. (57.17) вә (57.20) мүнасибәтләриндән, гејри-релјативистик һалда ($\upsilon << c$) (57.16) еффектив кәсији

$$d\sigma = 4\sqrt{2}Z^5\alpha^4r_o^2\left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2}\frac{\sin^2\theta\cos^2\varphi}{(1-\beta\cos\theta)^4}d\Omega, \quad (57.21)$$

нәһајәт $\frac{1}{(1-\beta\cos\theta)^4} = (1-\beta\cos\theta)^{-4} \approx 1+4\beta\cos\theta$ јахынлашмасы үчүн

$$d\sigma = 4\sqrt{2}\alpha^4Z^5r_o^2\left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2}\sin^2\theta\cos^2\varphi(1+4\beta\cos\theta)d\Omega. \quad (57.22)$$

(57.21) вә ја (57.22) ифадәси фотоелектронун бучаглара көрә пајланма ганунуну верир. Шүаланманын кичик тезликләриндә, јә'ни $\frac{p}{mc} = \sqrt{\frac{2m\hbar\omega}{m^2c^2}} = \frac{\upsilon}{c} << 1$-дә еффектив кәсијин (електронун чыхыш еһтималынын) максимум гијмәти бучагларын $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\varphi=0$ гијмәтинә ујғун кәлир. Бу һалда әксәр електронлар фотонун дүшмә истигамәтинә перпендикулјар, фотонун полјарлашма истигамәтинә паралел јајылыр. Дүшән фотонун тезлији артдыгча (57.21) вә ја (57.22) ифадәсиндә $(1-\beta\cos\theta)^{-4}$ вуруғуну сахламаг лазым олдуғуна көрә еффектив кәсијин максимуму θ-нын кичилмә истигамәтиндә јерини дәјишир.

Нәһајәт K-тәбәгәсиндән електронун чыхма һадисәсинин там еффектив кәсијини тапмаг үчүн (57.22)-и θ вә φ бучаглары үзрә интегралламаг вә алынан нәтичәни икијә вурмаг лазымдыр (белә ки K-тәбәгәсиндә ики електрон олур):

$$\sigma = \frac{2^5\sqrt{2}}{3}r_o^2\alpha^4Z^5\left(\frac{mc^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2}. \quad (57.23)$$

Бурадан көрүнүр ки, Z-бөјүдүкчә, јә'ни ағыр атомлар областына кечдикчә, фотоеффектин там еффектив кәсији бөјүјүр, дүшән фотонун тезлији артдыгча исә кичилир.

(57.23) ифадәси $I << \frac{p^2}{2m} << mc^2 >> \hbar\ \omega$ јахынлашмасында доғрудур. σ үчүн бүтүн енержи областында доғру олан ифадә исә јалныз релјативистик квант механикасында (квант електродинамикасында) алына билир.

§ 58. КОМПТОН ЕФФЕКТ

50 вә 57-чи параграфларда биз бир фотонун бурахылыб вә ја удулмасы илә нәтичәләнән просесләри тәдгиг етдик. Белә просесләрин еһтималы (еффектив кәсији) һәјәчанланма нәзәријјәсинин биринчи тәртиби илә тә'јин олунур вә кечид матриса елементи електромагнит саһәсинин $\vec{A}(\vec{r},t)$ далға функсијасынын биринчи дәрәчәси илә мүтәнасиб олур. Квант механикасында ики фотонун иштиракы илә кедән просесләри дә тәдгиг етмәк олар. Белә просесләр ики фотонун удулмасы, ики фотонун бурахылмасы вә ја да биринин удулуб, дикәринин бурахылмасы илә нәтичәләнә биләр. Нүмунә үчүн биз ахырынчы нөв просесин – јә'ни фотонун атом системиндән сәпилмәси просеси үзәриндә дајаначағыг. Бу просес һәјәчанланма нәзәријјәсинин биринчи јахынлашмасында (47.16) һәјәчанланма операторунун јалныз

$$\breve{V} = \frac{e^2}{2mc^2}\breve{A}^2 \tag{58.1}$$

һәдди илә тәсвир олунур. (50.54) ифадәси әсасында $\breve{A}$ -ны ашағыдакы кими јазаг:

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A}_1(\vec{r},t) + \vec{A}_2^+(\vec{r},t), \tag{58.2}$$

бурада

$$\vec{A}_1 = \sum_{\vec{k}\lambda} \frac{\vec{a}^{\lambda}}{\sqrt{2\omega L^3}} e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} C_{k\lambda}, \tag{58.3}$$

$$\vec{A}_2^+ = \sum_{k'\lambda'} \frac{\vec{a}^{+\lambda'}}{\sqrt{2\omega' L^3}} e^{+i\omega' t - i\vec{k}'\vec{r}} C^+_{k'\lambda'}.$$

$C_{k\lambda}$ – фотонуну удулма, $C^+_{k\lambda}$ – бурахылма операторудур. (58.2)-ә әсасән $\breve{V}$ операторуну

$$\breve{V} = \frac{e^2}{2mc^2}(\vec{A}_1\vec{A}_1 + \vec{A}_1\vec{A}_2^+ + \vec{A}_2^+\vec{A}_1 + \vec{A}_2^+\vec{A}_2^+) \tag{58.4}$$

кими јазмаг олар. Бурада биринчи һәдд ики фотонун удулмасы, дөрдүнчү һәдд – ики фотонун бурахылмасы, икинчи вә үчүнчү һәдләр исә фотонлардан биринин удулуб, дикәринин бурахылмасы просесләрини тәсвир едир.

Квант нәзәријјәсиндә фотонларын атом-системиндән сәпилмәси просеси ики ардычыл просесин нәтичәси кими бахылыр: шүаланманын тә'сири алтында олан атом-системи әввәл дүшән фотону удур, сонра сәпилән фотону бурахыр вә ја әксинә, әввәл сәпилән фотону бурахыр, сонра исә дүшән фотону удур. Она көрә дә сәпилмә просеси үчүн $\breve{V}$

$$\breve{V} = \frac{e^2}{2mc^2}(\vec{A}_1\vec{A}_2^+ + \vec{A}_2^+ A_1) \tag{58.5}$$

шәклиндә олур.

Гаршылыглы тә'сирдән әввәл (системин башланғыч һалында) електронун енержисини E_1, импулсуну $\vec{p}_1$, фотонун енержисини $\hbar\omega_1$, импулсу $\hbar\,\vec{k}_1$, гаршылыглы тә'сирдән сонра исә сәпилән (сон һалда олан) зәррәчикләрин–електронун енержисини E_2, импулсуну $\vec{p}_2$, фотонун енержисини $\hbar\omega_2$, импулсуну $\hbar\,\vec{k}_2$ кими ишарә едәк. Башланғыч һалда олан зәррәчикләрин енержи вә импулсу габагчадан верилмиш олур, јә'ни онларын гијмәти фиксә едилир. Гаршылыглы тә'сир просеси идарә олуна билмәдијиндән сон һалда олан зәррәчикләрин енержи вә импулсунун гијмәти һагда габагчадан мүәјјән фикир сөјләмәк мүмкүн олмур. Она көрә дә сәпиләндән сонра зәррәчијин импулсунун (енержи импулсдан асылыдыр) $(0,\infty)$ интервалында гијмәт алма еһтималы һесабланыр, башга сөзлә, сәпилән зәррәчикләрин бир-бириндән асылы олмајан динамик характеристикалары (импулсу, полјарлашмасы) үзрә чәм апарылыр. Дедикләримиздән чыхыр ки, удулан фотон үчүн

$$\vec{A}_1 = \sum_{\lambda_1}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_1 L^3}}\vec{a}^{o\lambda_1} e^{-i\omega_1 t + i\vec{k}_1\vec{r}} C_{k_1\lambda_1}, \tag{58.6}$$

бурахылан фотон үчүн исә

$$\vec{A}_2^+ = \sum_{\lambda_2 \vec{k}_2}\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_2 L^3}}\vec{a}^{o+\lambda_2} e^{i\omega_2 t - i\vec{k}_2\vec{r}} C^+{}_{k_2\lambda_2} \tag{58.7}$$

көтүрүлмәлидир. Бурада λ_1, λ_2 $(=\pm 1)$ – фотонларын полјарлашма истигамәтини көстәрир.

Ишыг адәтән маддәләрдән сәпилир. Лакин шүаланманын λ далға узунлуғу атомун өлчүләриндән кифајәт гәдәр бөјүк олдугда, сәпилмә просесиндә атом бүтөвлүкдә иштирак едир. λ атомун өлчүләри тәртибиндә олдугда исә сәпилмә просесиндә атомун електронлары да иштирак едә биләр. Атомун нүвә илә зәиф бағланмыш електронлары сәпилмәдә иштирак етдикдә дүшән фотон енержисинин бир һиссәсини електрона вериб, ону атомдан гопарараг сәрбәстләшдирир, өзү исә һәрәкәт истигамәтини дәјишәрәк сәпилир. Белә сәпилмәјә фотонун сәрбәст електрондан сәпилмәси кими бахылыр вә **Комптон еффект** адланыр.

Белә сәпилмәдә атом бүтөвлүклә дә иштирак едә биләр. Атом фотондан чох ағыр олдуғу үчүн фотон атомдан еластики сәпилир, јә'ни, сәпилмә заманы фотонун енержиси дәјишмир, јалныз һәрәкәт истигамәтини дәјишир (импулс гијмәтчә сабит галыб, истигамәтчә дәјишилир). Атомун електронларындан сәпилән фотонлар исә енержисинин бир һиссәсини атомун електронуна вердијинә көрә, сәпилән фотонун енержиси дүшән фотонун енержисиндән кичик олур ($\hbar\omega_2 < \hbar\omega_1$). Демәли дүшән ишыг монохроматик олдугда, сәпилән ишығын спектриндә, дүшән ишығын тезлијинә ујғун спектрал хәтдән әлавә узун далғалар тәрәфә јерини дәјишмиш икинчи спектрал хәтт мүшаһидә олунмалы вә атомун Z сыра нөмрәси артдыгча јердәјишмиш хәттин интенсивлији азалмалыдыр, чүнки, бу һалда фотонун атомдан електрон гопармасы просеси чәтинләшир вә атомларын әксәријјәти сәпилмәдә бүтөвлүкдә иштирак едир. Гејд едәк ки, дедикләримиз там мә'насы илә тәчрүбәдә тәсдиг олунур.

Комптон еффектдә, беләликлә електронун башланғыч вә сон һаллары онун сәрбәст һаллары олур. Сәрбәст һалда олан зәррәчијин далға функсијасы исә биринчи јахынлашмада мүстәви далға шәклиндә (атомун Кулон саһәсинин екранлајычы тә'сири кичикдир) көтүрүлә биләр. Електронун башланғыч стасионар һалынын далға функсијасыны Ψ_1, сон стасионар һалынынкы исә Ψ_2 кими ишарә етсәк,

$$\Psi_1(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\vec{P}_1\vec{r} - i\varepsilon_1 t}$$

$$\Psi_2(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_{p_2} e^{i\vec{P}_2\vec{r} + i\varepsilon_2' t} \qquad (58.8)$$

олар, бурада далға функсијалары һәчмә нормаланмыш, електронларын енержиси $\varepsilon_1 = \frac{E_1}{\hbar}$ вә $\varepsilon_2 = \frac{E_2}{\hbar}$, импулслары исә $\vec{P}_1 = \frac{p_1}{\hbar}$ вә $\vec{P}_2 = \frac{p_2}{\hbar}$ кими ишарә олунмушдур. (58.6), (58.5), (58.7) вә (58.8)-ә әсасән V_{21}^o – кечид матриса елементи

$$V_{21}^o = \int \Psi_2^+ \breve{V} \Psi_1 (d\vec{r}) = \frac{e^2}{2mc^2} \int \Psi_2^+ (\vec{A}_1\vec{A}_2^+ + \vec{A}_2^+\vec{A}_1)\Psi_1(d\vec{r}) =$$

$$= \frac{e^2}{2mc^2}\frac{2\cdot 2\pi\hbar c}{L^6} \sum_{P_2 k_2 \lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}} (\vec{a}^{\,o+\lambda_2}\vec{a}^{\,o\lambda_1}) \int e^{i(\vec{P}_1+\vec{k}_1-\vec{P}_2-\vec{k}_2)\vec{r}} (d\vec{r}) C_{k_1\lambda_1} C_{k_2\lambda_2}^+ ,$$

һәрәкәт мәһдуд фәзада баш вердикдә зәррәчијин импулсу дискрет дәјишдијиндән

$$\frac{1}{L^3}\int e^{i(\vec{P}_1+\vec{k}_1-\vec{P}_2-\vec{k}_2)\vec{r}} d\vec{r} = \delta_{\vec{P}_1+\vec{k}_1 \ \ P_2+\vec{k}_2}$$

кими δ-символа бәрабәр олар. P_2 – үзрә чәми δ-символ васитәсилә көтүрсәк,

$$V_{21}^o = \frac{2\pi\hbar e^2}{mcL^3} \sum_{k_2\lambda_2\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}} (\vec{a}^{\,o+\lambda_2}\vec{a}^{\,o\lambda_1}) C_{k_1\lambda_1} C_{k_2\lambda_2}^+ \qquad (58.9)$$

вә

$$\vec{P}_1 + \vec{k}_1 = \vec{P}_2 + \vec{k}_2 \qquad (58.10)$$

импулсун сахланма ганунуну аларыг.

V_{21}^o матриса елементинин гијмәтини (50.27) -дә јазандан сонра $\vec{k}_2'$, λ_1', λ_2' үзрә ортаја чыхан јени чәмләри $C_{k_1\lambda_1}$ вә $C_{k_2\lambda_2}^+$ операторларынын өдәдији (50.65) бәрабәрликләринин көмәјилә көтүрсәк,

$$dW_{21} = \frac{\hbar e^4 (2\pi)^3}{m^2 c^3 L^3} \sum_{\vec{k}_2\lambda_1\lambda_2} \frac{1}{k_1 k_2} \left| \vec{a}^{\,o+\lambda_2} a^{o\lambda_1} \right|^2 \delta(\varepsilon_1 + \omega_1 - \varepsilon_2 - \omega_2) \qquad (58.11)$$

олар. Бурада

$$\frac{1}{L^3}\sum_{k_2} \to \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{k}_2$$

кечидини едәндән сонра dW_{21} еһтималыны дүшән фотонларын еһтимал чәрәјаны сыхлығына (јә'ни $\frac{c}{L^3}$ -јә) бөлмәклә еффектив кәсијә кечәк

$$d\sigma = \frac{\hbar e^4}{m^2 c^3} \sum_{\lambda_1\lambda_2} \int \frac{k_2^2 dk_2 d\Omega}{k_1 k_2} \left| \vec{a}^{\,o+\lambda_2} \vec{a}^{\,o\lambda_1} \right|^2 \delta(\varepsilon_1 + \omega_1 - \varepsilon_2 - \omega_2). \qquad (58.12)$$

Садәлик хатиринә һесабаты башланғыч електронла бағлы ($\vec{p}_1 = 0$) олан координат системиндә апараг.

(58.12)-јә дахил олан δ-функсија енержинин

$$\varepsilon_1+\omega_1=\varepsilon_2+\omega_2$$

вә ја

$$\frac{\hbar^2P_1^2}{2m}+\hbar ck_1=\frac{\hbar^2P_2^2}{2m}+\hbar ck_2 \quad (\omega=ck) \qquad (58.13)$$

сахланма ганунуна кәтирир. $\vec p_1=0$ системиндә импулсун (58.10) вә енержинин (58.13) сахланма ганунлары

$$\vec k_1=\vec P_2+\vec k_2$$

$$\hbar ck_1=\frac{\hbar^2P_2^2}{2m}+\hbar ck_2 \qquad (58.14)$$

шәклинә дүшүр.

k_2 үзрә интегралы δ-функсија васитәсилә көтүрмәк олар. δ-функсија k_2- нин мүрәккәб функсијасы олдуғундан, онун

$$\int f(x)\delta(\varphi(x))dx=\sum_s\frac{\delta(x-x_s)}{|\varphi'(x)|_{x=x_s}}$$

хассәсиндән истифадә етмәк олар, бурада x_s-ләр $\varphi(x)=0$ тәнлијинин көкләридир. Бизим һалымызда

$$\varphi(k_2)=\hbar ck_1-\hbar ck_2-\frac{\hbar^2}{2m}(\vec k_1-\vec k_2)^2$$

олдуғундан

$$\frac{\partial\varphi}{\partial k_2}=\hbar c\left[1+\frac{\hbar}{mc}(k_2-k_1\cos\theta)\right]$$

бәрабәр олар. Онда

$$d\sigma=\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\frac{k_2}{k_1}\left[1+\Lambda(k_2-k_1\cos\theta)\right]^{-1}\sum_{\lambda_1\lambda_2}\left|\vec a^{o+\lambda_2}\vec a^{o\lambda_1}\right|^2 d\Omega \qquad (58.15)$$

олар, бурада $\Lambda=\frac{\hbar}{mc}$ – Комптон далға узунлуғу адланыр.

Инди дә фотонларын полјарлашмалары үзрә чәм көтүрәк. Дүшән зәррәчик (фотон) үчүн мүмкүн олан истигамәтләрдән һәр һансы бири верилмиш гәбул олунур. Сәпилән зәррәчијин полјарлашма истигамәти исә адәтән мә'лум олмур. Она көрә дә, еһтимал нәзәријјәсинин тәләбләринә әсасән, башланғыч һалда олан зәррәчикләрин полјарлашма (вә ја спин) һаллары үзрә орта гијмәт, сон һалда олан зәррәчикләрин полјарлашма истигамәтләри үзрә исә чәм көтүрүлүр.

Бу әмәлијјатлары етмәк үчүн фотонун z оху бојунча ($\vec k \parallel z$) һәрәкәт етдијини, x вә y охлары бојунча исә полјарлашдығыны фәрз едәк. $\vec n,\vec\beta$ вә $[\vec n\vec\beta]$ ортвекторларынын ујғун олараг координат охлары үзрә јөнәлдијини гәбул едәрәк (бах, шәкил 27) даирәви полјарлашмыш (спини һәрәкәти истигамәтиндә вә ја әксинә јөнәлмиш) фотонун $\vec a^{\lambda}$ полјарлашма векторуну

$$\vec a^{\lambda}=\frac{1}{\sqrt2}(\vec\beta+i\lambda[\vec n\vec\beta]) \qquad (58.16)$$

шәклиндә сечмәк олар. Вектор һесабындан истифадә едәрәк асанлыгла көстәрмәк олар ки,

$$\vec a^{\lambda}\vec a^{\lambda}=1, \qquad \sum_\lambda\vec a^{+\lambda}\vec a^{\lambda}=2 \qquad (58.17)$$

$$\sum_\lambda(\vec a^{+\lambda}\vec d)(\vec a^{\lambda}\vec b)=(\vec d\vec b)-(\vec n\vec d)(\vec n\vec b)$$

олар, бурада $\vec d$ вә $\vec b$ – ихтијары векторлардыр. Бу ифадәләрдән истифадә етсәк.

$$\frac12\sum_{\lambda_1\lambda_2}(\vec a_1^{o+\lambda_1}\vec a_2^{o\lambda_2})(\vec a_1^{o\lambda_1}\vec a_2^{+\lambda_1})=\frac12\sum_\lambda\left\{(\vec a_2^{o+\lambda_2}\vec a_2^{o\lambda_2})-(\vec n\vec a_2^{o+\lambda_2})(\vec n a_2^{o\lambda_2})\right\}=$$

$$=\frac12\left\{2-1+(\vec n_1\vec n_2)(\vec n_1\vec n_2)\right\}=\frac12(1+\cos^2\theta), \qquad (58.18)$$

бурада $\vec n_1=\frac{\vec k_1}{|\vec k_1|}$, $\vec n_2=\frac{\vec k_2}{|\vec k_2|}$, θ – сәпилмә бучағыдыр. (58.18)-и (58.15)-дә јеринә јазсаг, сәпилән фотонларын бучаглара көрә пајланмасы үчүн

$$d\sigma=\frac{r_o^2}{2}\frac{k_2}{k_1}\cdot\frac{(1+\cos^2\theta)d\Omega}{1+\Lambda(k_2-k_1\cos\theta)} \qquad (58.19)$$

ифадәси алыныр. Гејри-релјативистик областда тәхминән $k_1\approx k_2\approx k$ һесаб едиб, Λk-нын кифајәт гәдәр кичик кәмијјәт олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$d\sigma\approx\frac{r_o^2}{2}(1+\cos^2\theta)\left[1-\Lambda k(1-\cos\theta)\right]d\Omega \qquad (58.20)$$

алырыг. Бучаглар үзрә интеграл алындыгдан сонра

$$\sigma=\frac{8\pi}{3}r_o^2(1-\Lambda k)=\sigma_T(1-\Lambda k), \qquad (58.21)$$

бурада σ_T – Томсон еффектив кəсији адланыр вə о, классик нəзəријјəдə фотонларын електронлардан сəпилмəси үчүн илк дəфə инкилис алими Томсон тəрəфиндəн алынмышды. (58.21)-дə икинчи һəдд, тəпилəн електронун кифајəт гəдəр кичик сүр'əтиндə σ-ја олан дүзəлишдир. Фотонун енержиси ($\hbar ck$) артдыгча сəпилмəнин еффектив кəсији дүзəлиш һесабына кичилмиш олур.

§ 59. ДИСПЕРСИЈАНЫН КВАНТ НƏЗƏРИЈЈƏСИ

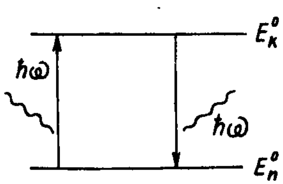
Атомар системин електромагнит саһəси илə гаршылыглы тə'сири мүхтəлиф физики һадисəлəрин баш вермəсинə кəтирир. Əввəлки параграфларда бу нөв просеслəрдəн шүабурахма, шүаудма, фотоеффект вə Комптон еффект просеслəрини тəһлил етмишдик. Инди дə електромагнит далғаларынын атомар системлəрдəн сəпилмə просеслəриндəн бири олан дисперсија (ишығын мүһитдə сəпилмəси) нəзəријјəси илə таныш олаг.

Дүшəн електромагнит далғасынын λ далға узунлуғу оптик гəфəсин a сабитиндəн хејли бөјүк олдугда ($\lambda >> a$), сəпилмə просеси дифраксија, атомун өлчүлəриндəн бөјүк олдугда ($\lambda >> a_{am}$) дисперсија, атомун өлчүлəри тəртибиндə олдугда ($\lambda \sim a_{am}$) – Комптон сəпилмəси, ондан да хејли кичик ($\lambda << a_{am}$) $-\gamma$- шүаларын сəпилмəси адланыр.

Белəликлə фəрз едəк ки, мүһитлə гаршылыглы тə'сирдə олан електромагнит саһəсинин интенсивлији атомун дахилиндə олан саһəнин интенсивлијиндəн хејли кичик, далға узунлуғу исə $\lambda >> a_{am}$ шəртини өдəјир. Һəјəчанланмамыш атомун истəнилəн ики стасионар һалынын енержилəрини E_n^o вə E_m^o илə ишарə едəк. Онда сəпилмə просеси ашағыдакы кими баша дүшүлүр: Тезлији $\omega_{mn} = \dfrac{E_m^o - E_n^o}{\hbar}$ (кечид тезлији) тəртибиндə олан електромагнит далғасы (ишыг) атомар системин үзəринə дүшдүкдə E_n^o стасионар һалында олан систем (атом) бу шүаны удараг E_m^o стасионар һалына кечир, сонра исə һəмин тезликли шүаны шүаландыраг, јенидəн E_n^o һалына гајыдыр. Бу механизмлə кедəн сəпилмə просеси – *еластик сəпилмə* вə ја *дисперсија адланыр* (шəкил 30).

Сəпилмə просеси илə јанашы мүһит дүшəн шүаларын мүəјјəн бир гисмини уда да билəр. Биз ики просеси биркə тəсвир едəн үмуми дүстуру јазмагла кифајəтлəниб, алынан нəтичəнин анализини, јалныз сəпилмə просесинин баш вердији бахымдан апарачағыг. Мүһитин диелектрик олдуғуну фəрз едəк. Онун сындырма əмсалы Максвел нəзəријјəсиндəн

$$n = \sqrt{\varepsilon} \tag{59.1}$$



Шəкил 30. Ишығын еластики сəпилмəсинə (дисперсијаја) ујғун кечидлəр.

кими тə'јин олунур (магнит нүфузлуғу $\mu = 1$ һесаб олунур), ε– мүһитин диелектрик нүфузлуғудур. Дисперсија нəзəријјəсиндə өјрəнилəн просеслəрдəн бири дə n-ин вə ја ε-нун дүшəн шүанын тезлијиндəн асылылығыны тапмагдан ибарəтдир. Буну ишығын диелектрик мүһитдə сəпилмəсинин там квант нəзəријјəсини вермəклə дə етмəк олар. Лакин, ишығын атомар системлəрдəн сəпилмəси просеси, онун удулма вə бурахылма просеслəриндəн фəргли олараг (биринчи тəртиб еффектлəр) икинчи тəртиб еффектдир. Онун еһтималыны һесабламаг үчүн һəјəчанланма нəзəријјəсинин икинчи јахынлашмасындан истифадə етмəк лазымдыр. Бу, кифајəт гəдəр бөјүк һəчмли һесабламалара кəтирир. Арашдырмалар көстəрир ки, ејни нəтичəлəрə һəјəчанланма нəзəријјəсинин биринчи јахынлашмасы васитəсилə дə кəлмəк олар. Биз бу икинчи јолла кедəчəјик.

Диелектрик мүһитин $\vec{D}$ индуксија вектору електромагнит саһəсинин $\vec{\mathcal{E}}$ интенсивлик вектору илə

$$\vec{D} = \varepsilon\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}} + 4\pi\vec{P} \tag{59.2}$$

кими тə'јин олунур, бурада $\vec{P}$ – мүһитин пољарлашма векторудур (ваһид һəчмин електрик моменти). Өз нөвбəсиндə о, $\vec{\mathcal{E}}$ илə мүтəнасибдир:

$$\vec{P} = \alpha\vec{\mathcal{E}}. \tag{59.3}$$

α – мүһитин пољарлашма əмсалы адланыр. Мүһитин електрик пољарлашмасы ајры-ајры атомларын пољарлашмасы илə тə'јин олундуғундан атомун харичи саһəнин тə'сири нəтичəсиндə јаранан електрик моменти дə $\vec{\mathcal{E}}$ илə мүтəнасиб олар:

$$\vec{d} = \beta\vec{\mathcal{E}}. \tag{59.4}$$

β – атомун пољарлашма əмсалы адланыр. Ваһид һəчмдəки атомларын електрик векторларынын һамысынын ејни бир истигамəтдə јөнəлдијини гəбул етсəк,

$$\alpha = \beta N \tag{59.5}$$

олар. N –ваһид һəчмдəки атомларын сајыдыр. (59.1)–(59.5) мүнасибəтлəриндəн

$$\varepsilon = n^2 = 1 + 4\pi\alpha = 1 + 4\pi N\beta \tag{59.6}$$

алыныр. Белəликлə, мəсəлə β-нын харичи саһəнин ω-тезлијиндəн асылылығынын һесабланмасына кəтирилир.

Классик нәзәријјәјә көрә атомда оптик електрон $\vec{F} = -k\vec{r}$ квазиеластик гүввәнин тә'сири алтында һәрәкәт едир. Беләә атом замана көрә ω тезлији илә периодик дәјишән харичи електромагнит саһәсинә дүшдүкдә, онун оптик електрону һәмин ω тезлији илә рәгси һәрәкәт едәр (фырланма һәрәкәтинин һәр һансы мүстәвијә пројексијасы рәгси һәрәкәт олар).

Белә електронун Нјутон һәрәкәт тәнлији

$$m\ddot{\vec{r}} = -k\vec{r} - e\vec{\mathcal{E}} \qquad (59.7)$$

олар. Бурада һәрәкәт гејри-релјативистик ($v<<c$) олдуғундан магнит саһәсинин v^2/c^2 тәртибли тә'сир гүввәси нәзәрә алынмамышдыр.

Електромагнит саһәсинин $\vec{\mathcal{E}}$ интенсивлик вектору замана көрә периодик дәјишдијиндән ($\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_o e^{-i\omega t}$) електронун да радиус-вектору замана көрә $\vec{r} = \vec{r}_o e^{-i\omega t}$ гануну илә дәјишәр. Онда (59.7) тәнлији

$$(\omega_o^2 - \omega^2)\vec{r} = \frac{e}{m}\vec{\mathcal{E}}_o \qquad (59.8)$$

шәклинә дүшәр, $\omega_o = \sqrt{\frac{k}{m}}$ — електронун мәхсуси тезлији адланыр. Бурадан $\vec{r}$-и тапыб, атомун $\vec{d} = -e\vec{r}$ електрик дипол моментинин ифадәсиндә јеринә јазсаг,

$$\vec{d} = \frac{e^2}{m}\cdot\frac{1}{\omega_o^2 - \omega^2}\vec{\mathcal{E}}_o = \beta\vec{\mathcal{E}}_o$$

олар. Беләликлә, атомун полјарлашма әмсалы үчүн

$$\beta = \frac{e^2}{m}\cdot\frac{1}{\omega_o^2 - \omega^2} \qquad (59.9)$$

ифадәси алыныр.

Атомда мәхсуси тезликләри $\omega_o, \omega_1, \omega_2, \ldots, \omega_k, \ldots$ олан електронлар варса, онун полјарлашма әмсалы

$$\beta = \frac{e^2}{m}\sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2} \qquad (59.10)$$

олар. Бурада f_k – мәхсуси тезлији ω_k олан електронларын сајыдыр.

(59.10) дүстуру β-нын, јә'ни (59.6)-ја әсасән мүһитин n сындырма әмсалынын, електромагнит саһәсинин ω тезлијиндән асылылыг характерини дүзкүн верирсә дә, тәчрүбәдә f_k үчүн ваһиддән кичик гијмәт

алыныр. Классик нәзәријјәнин бу чәтинлији квант нәзәријјәсиндә һәлл олунмуш вә дисперсија һадисәсиндә тәчрүбәдә мүшаһидә олунмуш бүтүн фактлар өз изаһыны тапмышды.

Инди дә дисперсијанын квант нәзәријјәсинин шәрһинә кечәк.Фәрз едәк ки, тезлији ω олан монохроматик ишыг диелектрик мүһитин атомларындан сәпилир. Ишыг далғасынын дәјишән саһәсинин тә'сири алтында олан һәр бир атомда әлавә $\vec{d}$ електрик моменти јараныр. Дәјишән електромагнит саһәси илә атом арасындакы гаршылыглы тә'сир оператору (47.16) илә верилир:

$$\breve{V}(t) = -\frac{e}{mc}\vec{A}\breve{\vec{p}},$$

бурада $\vec{A}(\vec{r},t)$ – саһәнин вектор потенсиалы, $\breve{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ – импулс операторудур. Просес сәпилмә просеси олдуғу үчүн атома һәм дүшән вә һәм дә сәпилән далға тә'сир етдијиндән, һәр икисинин тезлији вә амплитуду бәрабәр гәбул олунур, јә'ни

$$A(\vec{r},t) = \vec{a}e^{-i\omega t + ik\vec{r}} + \vec{a}e^{i\omega t - ik\vec{r}}$$

кими көтүрүлүр. Максвел нәзәријјәсиндән $V(t)$-ни билаваситә $\vec{\mathcal{E}}$ интенсивлик вектору илә дә ифадә етмәк олар:

$$\breve{V}(t) = \frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\breve{\vec{p}})(e^{-i\omega t + ik\vec{r}} - e^{i\omega t - ik\vec{r}}) \qquad (59.11)$$

(Ишыг далғасы үчүн $\vec{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t}$ олдуғундан).

Системин

$$\breve{H} = \breve{H}_o + \breve{V}(t) \qquad (59.12)$$

Һамилтон оператору замандан асылы олдуғундан, Шрединкер тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = (\breve{H}_o + \breve{V})\Psi(\vec{r},t). \qquad (59.13)$$

Бурада H_o – харичи саһә олмадыгда (јә'ни һәјәчанланмамыш) системин Һамилтон операторудур. Бахылан анда мүһитин бүтүн һәјәчанланмамыш атомларынын һәр һансы E_n^o һалында олдуғуну гәбул етсәк, о һалын $\Psi_n^o(\vec{r},t)$ далға функсијасы

$$\breve{H}_o\Psi_n^o(\vec{r},t) = E_n^o\Psi_n^o(\vec{r},t) \qquad (59.14)$$

тәнлијини өдәјәр.

Мәгсәдимиз харичи һәјәчанланма дахил едилдикдә квант системин E_n^o стасионар һалынын далға функсијасынын нечә дәјишдијини тә'јин етмәкдән ибарәтдир. Гаршылыглы тә'сир оператору $V(t)$-нин E_n^o-а вердији әлавә кифајәт гәдәр кичик олдуғундан (59.13) тәнлијини һәјәчанланма методу васитәсилә һәлл етмәк олар. Онун һәллини

$$\Psi_n(\vec{r},t)=\Psi_n^o(\vec{r},t)+\Psi_n^{(1)}(\vec{r},t) \tag{59.15}$$

кими ахтарыла биләр. Буну (59.13) јазыб, $\Psi_n^o(\vec{r},t)$ үчүн (59.14) тәнлијинин өдәдијини вә $\check{V}(t)\Psi_n^{(1)}$ һәддинин икинчи тәртиб кичик кәмијјәт олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_o)\Psi_n^{(1)}=\check{V}(t)\Psi_n^o \tag{59.16}$$

аларыг. Јухарыда дедикләримизә әсасән, бахылан һалда шүанын λ далға узунлуғунун атомар системин a өлчүләриндән хејли бөјүк (јә'ни $e^{ikr}\approx 1-$ дипол јахынлашмасы) олдуғуну гәбул едәк. Бу јахынлашмада (59.11)-дән $V(t)$-нин ифадәсини (59.16)-да јазсаг,

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\check{H}_o)\Psi_n^{(1)}=\frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\check{\vec{p}})(e^{-i(\omega_n+\omega)t}-e^{-i(\omega_n-\omega)t})\Psi_n^o(\vec{r}), \tag{59.17}$$

бурада $\Psi_n^o(r,t)=\Psi_n^o(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n^o t}=\Psi_n^o e^{-i\omega_n t}$ олдуғу нәзәрә алынмышдыр ($\omega_n=\frac{E_n^o}{\hbar}$).

(59.17) тәнлијинин сағ вә сол тәрәфләринин замана көрә дәјишмә характеринин ејнилији тәләбиндән (59.17)-нин һәллини

$$\Psi_n^{(1)}=u_n(\vec{r})e^{-i(\omega_n+\omega)t}+\upsilon_n(r)e^{-i(\omega_n-\omega)t} \tag{59.18}$$

шәклиндә ахтараг. (59.18)-и (59.17)-дә јазыб, ејни експоненсиал вуруглу һәдләрин бәрабәрлијиндән

$$\begin{gathered}\left[\hbar(\omega_n+\omega)-\check{H}_o\right]u_n(\vec{r})=\frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\check{\vec{p}})\Psi_n^o(\vec{r})\\ \left[\hbar(\omega_n-\omega)-\check{H}_o\right]u_n(\vec{r})=-\frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\check{\vec{p}})\Psi_n^o(\vec{r})\end{gathered} \tag{59.19}$$

тәнликләри алыныр. Системин истәнилән функсијасы $\check{H}_o$ операторунун там систем тәшкил едән Ψ_n^o мәхсуси функсијалары илә ифадә едилә биләр:

$$u_n(\vec{r})=\sum_k A_{nk}\Psi_k^o(\vec{r}), \tag{59.20}$$

$$\upsilon_n(\vec{r})=\sum_k B_{nk}\Psi_k^o(\vec{r}).$$

Бунлары (59.19)-да јазыб, (59.14)-ү нәзәрә алсаг,

$$\begin{gathered}\sum_k\hbar\left[(\omega_n+\omega)-\omega_k\right]A_{nk}\Psi_k^o=\frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\check{\vec{p}})\Psi_n^o,\\ \sum_k\hbar\left[(\omega_n-\omega)-\omega_k\right]B_{nk}\Psi_k^o=-\frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\check{\vec{p}})\Psi_n^o\end{gathered} \tag{59.21}$$

алынар. Бу тәнликләри сол тәрәфдән $\Psi_{k'}^{o*}(\vec{r})$-ә вуруб, бүтүн фәза үзрә интеграллајаг. $\int\Psi_{k'}^{o*}\check{\vec{p}}\Psi_k^o(d\vec{r})=\vec{p}_{k'k}$ вә $\int\Psi_{k'}^{o*}\Psi_k^o(d\vec{r})=\delta_{k'k}$ көтүрүб, $\delta_{k'k}$ – символу васитәсилә чәми алсаг,

$$\begin{gathered}\hbar(\omega_{nk}+\omega)A_{nk}=\frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{p}_{kn}),\\ \hbar(\omega_{nk}-\omega)B_{nk}=-\frac{ie}{m\omega}(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{p}_{kn}^*).\end{gathered} \tag{59.22}$$

Бурадан A_{nk} вә B_{nk} үчүн

$$A_{nk}=\frac{ie(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{p}_{nk})}{\hbar\omega m(\omega_{nk}+\omega)},\qquad B_{nk}=-\frac{ie(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{p}_{kn}^*)}{\hbar m\omega(\omega_{nk}-\omega)} \tag{59.23}$$

ифадәләри алыныр. Импулс операторунун

$$p_{kn}=im\omega_{kn}\vec{r}_{kn},$$

електрик дипол моментинин $\vec{d}=-e\vec{r}$ ифадәләриндән истифадә едиб, $\omega_{kn}=-\omega_{nk}$ көтүрсәк,

$$A_{nk}=-\frac{\omega_{nk}}{\hbar\omega(\omega_{nk}+\omega)}(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{d}_{kn}), \tag{59.24}$$

$$B_{nk} = -\frac{\omega_{nk}}{\hbar\omega(\omega_{nk}-\omega)}(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{d}_{kn})$$

олар. A_{nk} вә B_{nk}-нын бу гијмәтләрини (59.20)дә јазыб, $u_n(r)$ вә $\upsilon_n(r)$ үчүн алынмыш ифадәләри (59.18)-дә нәзәрә алсаг, харичи һәјәчанланманын тә'сири алтында олан квант системинин $\Psi_n(\vec{r},t)$ функсијасы үчүн (59.15)-дән

$$\Psi_n(\vec{r},t) = \Big\{ \Psi_n^o(\vec{r}) - \sum_k \frac{\omega_{kn}}{\hbar\omega(\omega_{nk}+\omega)}(\vec{\mathcal{E}}\vec{d}_{kn})e^{-i\omega t} -$$

$$-\sum_k \frac{\omega_{nk}}{\hbar\omega(\omega_{nk}-\omega)}(\vec{\mathcal{E}}\vec{d}_{kn})e^{i\omega t} \Big\} e^{-i\omega_n t} \qquad (59.25)$$

ифадәси алыныр.

Јәгин ки, дәгиг резонанс үчүн $\Psi_n(\vec{r},t)$-нин (59.25) ифадәсиндән истифадә етмәк олмаз, чүнки $\omega_{nk} = \pm\omega$ һалында A_{nk} вә B_{nk} әмсалларындан бири сонсуз олур вә далға функсијасынын сонлулуг шәрти позулур.

Инди дә харичи саһәнин тә'сири нәтичәсиндә атомун $\Psi_n^o(\vec{r},t)$ һалында јаранан әлавә електрик дипол моментинин биринчи јахынлашмада гијмәтини һесаблајаг. Саһәнин тә'сириндән сонра Ψ_n^o функсијасы (59.25) илә верилмиш $\Psi_n(\vec{r},t)$-јә чеврилир.

$\Psi_n(\vec{r},t)$ – һалында атомун дипол моменти

$$\vec{d}_{nn} = \int \Psi_n^*(\vec{r},t)\vec{\hat{d}}\,\Psi_n(\vec{r},t)(d\vec{r})$$

кими тә'јин олунур. $\Psi_n^*(r,t)$ вә $\Psi_n(\vec{r},t)$ функсијаларыны бурада (59.25)-дән өз ифадәләри илә әвәз едәндән сонра саһәнин $\vec{\mathcal{E}}$ интенсивлик векторунун биринчи дәрәчәси илә мүтәнасиб һәдләрлә кифајәтләнәк, онда

$$\vec{d}_{nn}(t) = \vec{d}_{nn}^{\,o} - \frac{e^{-i\omega t}}{2\hbar}\sum_k \left\{ \frac{(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{d}_{kn}^{\,*})\vec{d}_{kn}}{\omega_{nk}+\omega}\cdot\frac{\omega_{kn}}{\omega} + \frac{(\vec{\mathcal{E}}_o\vec{d}_{kn})\vec{d}_{kn}^{\,*}}{\omega_{nk}-\omega}\cdot\frac{\omega_{nk}}{\omega} \right\} + к.г,$$

бурада $\vec{d}_{nn}^{\,o}$ – харичи саһәсиз атомун малик олдуғу сабит електрик дипол моментидир. Бу сабити сыфыр гәбул едиб, јә'ни ону $\vec{d}_{nn}$-нин өлчү башланғычы көтүрүб, дүшән вә сәпилән ишығын мүһитә көстәрдији тә'сирин ејни интенсивлијә малик олдуғу гәбул едилдикдә, јаранмыш $\vec{d}_{nn}(t)$ моментин компонентләри үчүн

$$d_{nn}^{j}(t) = -\frac{1}{\hbar}\sum_k \left\{ \frac{d_{kn}^{*i}d_{kn}^{j}}{\omega_{nk}+\omega}\cdot\frac{\omega_{kn}}{\omega} + \frac{d_{kn}^{i}d_{kn}^{*j}}{\omega_{nk}-\omega}\cdot\frac{\omega_{nk}}{\omega} \right\} \mathcal{E}_o^{i} e^{-i\omega t} \qquad (59.26)$$

ифадәсини алырыг. Бурада $i, j = 1,2,3$-дүр. Буну

$$d_{nn}^{j}(t) = \beta_{ji}\mathcal{E}_i \qquad (59.26')$$

кими јазсаг, (59.4)-ә әсасән,

$$\beta_{ij} = \beta_{ji} = -\frac{1}{\hbar}\sum_k \left\{ \frac{d_{kn}^{*j}d_{kn}^{i}}{\omega_{nk}+\omega}\cdot\frac{\omega_{kn}}{\omega} + \frac{d_{kn}^{i}d_{kn}^{*j}}{\omega_{nk}-\omega}\cdot\frac{\omega_{nk}}{\omega} \right\} \qquad (59.27)$$

бахылан мүһитин атомунун пoлјарлашма әмсалы олур. (59.5)-ин јазылдығы јахынлашмада мүһитин полјарлашма әмсалы

$$\alpha_{ij} = N\beta_{ij} \qquad (59.28)$$

олар. (59.27) вә (59.28)-дән көрүнүр ки, бу ики әмсал

$$\|\beta_{ij}\| = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} \end{pmatrix} \qquad (59.29)$$

кими икинчи ранг симметрик тензордур.

Дипол моменти компонентләринин $d_{kn}^{i} = d_{nk}^{*i}$ хассәси вә бир-бирилә коммутасија етмәси әсасында (59.27) ифадәсини садәләшдирәк. Матрисаларын һасили гајдасына мүрачиәт етсәк,

$$\sum_k d_{kn}^{i}d_{kn}^{*j} = \sum_k d_{kn}^{i}d_{nk}^{j} = \sum d_{nk}^{j}d_{kn}^{i} = (d^i d^j)_{nn}$$

вә

$$\sum_k \frac{d_{kn}^{i}d_{nk}^{j}}{\hbar\omega} - \sum_k \frac{d_{nk}^{j}d_{kn}^{i}}{\hbar\omega} = 0$$

олар. Бу ахырынчы һәдди (59.27)-јә әлавә едиб, (59.27)-нин биринчи һәддиндә $\omega_{kn} = -\omega_{nk}$ әвәзини апарсаг,

$$\beta_{ij} = \frac{1}{\hbar}\sum_k \Big(\frac{d_{nk}^{i}d_{kn}^{j}}{\omega_{nk}+\omega}\cdot\frac{\omega_{nk}}{\omega} - \frac{d_{nk}^{i}d_{kn}^{j}}{\omega}\Big) - \frac{1}{\hbar}\sum_k \Big(\frac{d_{nk}^{j}d_{kn}^{i}}{\omega_{nk}-\omega}\cdot\frac{\omega_{nk}}{\omega} - \frac{d_{nk}^{i}d_{kn}^{j}}{\omega}\Big).$$

Һәр ики мө'тәризәни үмуми мәхрәчә кәтирдикдә

$$\beta_{ij} = -\frac{1}{\hbar}\sum_k \Big(\frac{d_{nk}^{i}d_{kn}^{j}}{\omega_{nk}+\omega} + \frac{d_{nk}^{i}d_{kn}^{j}}{\omega_{nk}-\omega}\Big)$$

вә ја

$$\beta_{ij} = \sum_k \frac{2\omega_{kn} d^i_{nk} d^j_{kn}}{\hbar(\omega^2_{nk} - \omega^2)} \qquad (59.28')$$

олур. Бурадан көрүнүр ки, $d^i_{nk} = d^i_{kn}$ шәрти өдәнилдикдә β_{ij} –тензору ермит тензор олур, јә'ни онун үчүн

$$\beta_{ij} = \beta^+_{ji} \qquad (59.29')$$

бәрабәрлији өдәнилир.

Атомун (59.28) полјарлашма әмсалыны онун (59.10) классик ифадәсинә охшар јазаг:

$$\beta_{ij} = \frac{e^2}{m}\sum_k \frac{f^{ij}_{kn}}{\omega^2_{nk} - \omega^2}, \qquad (59.30)$$

бурада f^{ij} – тензору

$$f^{ij}_{kn} = \frac{2\omega_{kn} m d^i_{nk} d^j_{kn}}{\hbar e^2} \qquad (59.31)$$

алыныр вә f^{ij}_{kn} *оссилјатор гүввәси* адланыр.

Алынан нәтичәләри классик нәзәријјәдәки нәтичәләрлә мүгајисә етмәк үчүн мүһитин изотроп олдуғуну фәрз едәк. Белә мүһитдә јаранан моментин истигамәти ишыг саһәсинин $\vec{\mathcal{E}}$ интенсивлик векторунун истигамәти үзәринә дүшүр, јә'ни $i \neq j$ оланда $\beta_{ij}=0$, $i=j$ оланда исә $\beta_{ii}=\beta_{xx}= =\beta_{yy}=\beta_{zz}=\beta$ олур. Башга сөзлә, β_{ij} – тензору скалјара чеврилир.

Беләликлә изотроп мүһит үчүн

$$\beta = \frac{e^2}{m}\sum_k \frac{f_{kn}}{\omega^2_{nk} - \omega^2} \qquad (59.32)$$

вә оссилјатор гүввәси

$$f_{kn} = \frac{2m\omega_{kn}|d_{kn}|^2}{\hbar e^2} \qquad (59.33)$$

олур, бурада $d_{kn} = -e\int \Psi^{o*}_k x \Psi^o_n (d\vec{r})$.

Квант нәзәријјәсиндә атомун полјарлашма әмсалы үчүн алынмыш (59.32) ифадәсинин, формача онун (59.10) классик ифадәси үзәринә дүшмәси онларын һеч дә ејни маһијјәтә малик олмасы демәк дејилдир. Доғрудан да, (59.32)-дә чәм електронларын сајы үзрә јох, атомун һәјәјәчанланмыш һаллары үзрә апарылыр. Електронларын мәхсуси тезлијин әвәзиндә (59.32)-дә атомун стасионар һаллары арасында баш верән квант

кечидләрин ω_{kn} тезликләри дурур. Нәһајәт, f_{kn} оссилјатор гүввәсинә $\omega_{kn} = \frac{E^o_k - E^o_n}{\hbar}$ кечид тезлији дахил олдуғундан E^o_k-нын E^o_n-дән бөјүк вә ја кичик олмасындан асылы олараг f_{kn}, классик нәзәријјәдә һәмишә мүсбәт олан f_k -дан фәргли олараг, һәм мүсбәт, һәм дә мәнфи гијмәт ала биләр.

Атомун әсас һалындан (E^o_n) онун (E^o_k) һәјәчанланмыш һалларына олан кечидләр ($E_к>E_n$) үчүн $f_{nk}>0$, һәр һансы һәјәчанланмыш E_n һалындан $E_к$ -ја олан кечидләр ($E_n>E_к$) үчүн исә $f_{kn}<0$ олур. О, тәчрүбәјә ујғун олараг, нәинки ваһиддән кичик галыр, һәтта бүтүн k һаллары үзрә чәми ваһидә бәрабәр олур. Доғрудан да, (59.33) ифадәсиндән f_{kn} -ни

$$f_{kn} = \frac{m\omega_{kn}}{\hbar}(x^*_{kn}x_{kn} + x^*_{kn}x_{kn}) \qquad (59.34)$$

кими јазаг вә бурада $p_{kn} = im\omega_{kn}x_{kn}$ мүнасибәтиндән (59.34)-үн биринчи һәддиндә x^*_{kn}-и, икинчи һәддиндә исә x_{kn}-и p_{kn} илә әвәз едиб, операторларын ермитлијини нәзәрә аланда

$$f_{kn} = \frac{1}{i\hbar}(x_{nk}p_{kn} - p_{nk}x_{kn})$$

олар. Бу ифадәдә k-һаллар үзрә чәм көтүрәндән сонра $\breve{p}_x x - x\breve{p}_x = -i\hbar$ јердәјишмә мүнасибәтиндән

$$\sum_k f_{kn} = \frac{1}{i\hbar}\sum_k (x_{nk}p_{kn} - p_{nk}x_{kn}) = \frac{1}{i\hbar}(xp_x - px)_{nn} = 1\delta_{nn} = 1$$

олур.

Јухарыда дедикләримиздән башга, f_{kn} оссилјатор гүввәси спонтан кечидләрин A_{kn} еһтималы илә мүтәнасибдир:

$$f_{kn} = \frac{3mc^3}{2e^2\omega^2_{kn}}A_{kn}$$

вә спонтан дипол шүаланмасынын интенсивлијини тә'јин едир.

Атомун полјарлашма әмсалы мә'лум олдугда маддәнин полјарлашма әмсалыны һесабламаг олар:

$$\alpha = N\beta = \frac{Ne^2}{m}\sum_k \frac{f_{kn}}{\omega^2_{nk} - \omega^2}.$$

Бу ифадә харичи саһә олмадыгда бүтүн атомларын Ψ_n^o стасионар һалында олдуғу маддә үчүн доғрудур. Атом јалныз Ψ_n^o һалында јох, истәнилән башга һалда да ола биләрсә, онда јухарыдакы ифадәни атомун һәмин һалда олма еһтималы W_n-ә дә вурмаг лазымдыр. Јәгин ки, W_n еһтималы $\sum\limits_n W_n=1$ шәртини өдәјир, белә ки бурада чәм атомун ола биләчәк мүмкүн һалдары үзрә кедир. Беләликлә α үчүн даһа үмуми ифадә алынмыш олур:

$$\alpha = \frac{Ne^2}{m}\sum_n\sum_k \frac{f_{kn}}{\omega_{nk}^2-\omega^2} W_n . \qquad (59.35)$$

α-нын бу ифадәсини (59.6)-да јеринә јазсаг, мүһитин сындырма әмсалы (вә ја ε диелектрик нүфузлуғу) үчүн

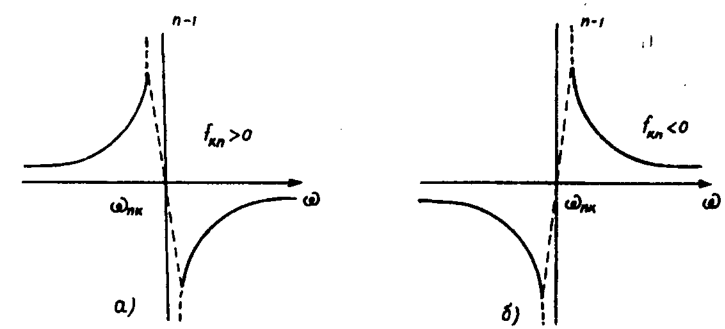
$$\varepsilon = n^2 = 1+\frac{4\pi Ne^2}{m}\sum_n\sum_k \; W_n \; \frac{f_{kn}}{\omega_{kn}^2-\omega^2} \qquad (59.36)$$

ифадәсини аларыг. Мүһитин сындырма әмсалы адәтән ваһидә јахын кәмијјәт олдуғундан $n^2-1\approx 2(n-1)$ көтүрмәк олар. Онда

$$n = 1+2\pi N\frac{e^2}{m}\sum_k\sum_n \; W_n \; \frac{f_{kn}}{\omega_{kn}^2-\omega^2} . \qquad (59.37)$$

Мүһитин сындырма әмсалынын сәпилән ишығын ω тезлијиндән асылылығы ишығын дисперсија гануну адланыр. f_{kn} – оссилјатор гүввәси бөјүк олдугда n-ин тезликдән асылылығыны көстәрән икинчи һәдд әсас рол ојнајыр. Атомлар әсас һалда олдугда $\omega_{kn}>0$ олдуғундан $f_{kn}>0$ олур вә ω-нын $\omega<\omega_{nk}$ вә $\omega>\omega_{nk}$ областларда ω тезлији артдыгда мүһитин сындырма әмсалы да артыр (шәкил 31,а). Бу *мүсбәт дисперсија* адланыр вә о, классик нәзәријјәнин нәтичәсини, демәк олар ки, тәкрар едир.

Атомлар $E_n>E_k$ шәртини өдәјән һәјәчанланмыш һалда оларса, $\omega_{kn}=\dfrac{E_k-E_n}{\hbar}<0$ олдуғундан оссилјатор гүввәси мәнфи олур: $f_{kn}<0$, ω-нын $\omega<\omega_{nk}$ вә $\omega>\omega_{nk}$ областларында ω артдыгча мүһитин n сындырма әмсалы азалыр (шәкил 31,б) вә белә дисперсија *мәнфи дисперсија* адланыр. Бу тәмиз квант еффектидир вә онун классик аналогу јохдур. Мәнфи дисперсија 1930-чу илдә Ланденбург тәрәфиндән тәчрүби олараг мүшаһидә олунмушдур. Мәнфи дисперсија даһа чох һәјәчанланмыш сәвијјәләрдән нисбәтән зәиф һәјәчанланмыш сәвијјәләрә кечидләр илә әлагәдар олдуғундан, иддиа етмәк олар ки бу һал јухары сәвијјәләрин ашағылара нисбәтән долма дәрәчәсинин бөјүк олмасына ујғундур. Демәли, мәнфи дисперсијалы системләрдән лазерләрин гурашдырылмасында истифадә едилә биләр.



Шәкил 31. Мүсбәт (а) вә мәнфи (б) дисперсија әјриләри.

Гејд едәк ки, ω_{nk} вә ја ω_{kn} кечид тезликләри јахынлығында дисперсија әјриләринин кәсилмәси, дүшән ишығын амплитудунун сөнмәси (ишығын мүһит тәрәфиндән удулмасы) һадисәсинин, јә'ни радиасија сүртүнмә гүввәсинин нәзәрә алынмамасы нәтичәсидир. Бу һадисә нәзәрә алынмыш оларса, (59.37) дүстуру

$$n = 1+2\pi N\sum_k \frac{f_{kn}}{\omega_{nk}^2-\omega^2-i\eta\omega} \qquad (59.38)$$

шәклинә дүшүр, бурада η–сөнмәни (удулманы) характеризә едән сабитдир вә дисперсија әјриләри гырыг хәтлә чәкилмиш һиссәләри илә тамамланыр.

III hиссə

РЕЛЈАТИВИСТИК КВАНТ МЕХАНИКАСЫ

VIII ФƏСИЛ

ДИРАК НƏЗƏРИЈЈƏСИ

§60. ШРЕДИНКЕР НƏЗƏРИЈЈƏСИНИН ЧƏТИНЛИКЛƏРИ

а) Əввəлки фəсиллəрдə тəhлил олунан бүтүн физики hадисəлəрин əсасында Шрединкер тəнлији дурурду. §17-дə көстəрмишдик ки, Шрединкер тəнлији енержи илə импулс арасындакы

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \tag{60.1}$$

гејри-релјативистик мүнасибəтдəн ујғунлуг принсипи васитəсилə алыныр. Доғрудан да, (60.1) мүнасибəтиндə

$$E \to \breve{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \ \vec{p} \to \breve{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} \tag{60.2}$$

əвəзлəрини апарсаг, (17.5) Шрединкер тəнлијини аларыг.

Лакин Шрединкер тəнлији хүсуси нисбилик нəзəријјəсинин тəлəблəрини өдəмир, о Лоренс чеврилмəлəринə көрə инвариант дејилдир, тəнлијə замана көрə төрəмə биринчи тəртибдəн, координатлара көрə төрəмəлəр исə икинчи тəртибдəн дахил олур. Демəли, Шрединкер нəзəријјəси јалныз $\upsilon<<c$ hалында физики hадисəлəрин тəсвири үчүн тəтбиг олуна билəр.

б) Електронун мəркəзи саhəдəки həрəкəтинин Шрединкер нəзəријјəси əсасында §89 апарылан тəдгигат көстəрди ки, бироптик електронлу атомларын енержи сəвијјəлəри мүрəккəб гурулуша маликдир. Чырлашмыш həр бир E_{nl} сəвијјəси $2l+1$ сајда енержи сəвијјəлəри топлусундан ибарəтдир. Харичи електрик вə магнит саhəлəриндə бу чырлашма ја там вə ја да гисмəн арадан көтүрүлүр (бах §76–78). Харичи саhəсиз, мəсəлəн, $2p\to1s$ кечидиндə бир спектр хəтти əвəзиндə бир-биринə чох јахын јерлəшмиш ики спектр хəтти (дублет) мүшаhидə олунур: Буна спектрин инчə гурулушу дејилир вə башга кечидлəрə ујғун спектр хəтлəри дə белə инчə гурулуша маликдир.

в) § 41-дə орбитал həрəкəт мигдары моменти илə она ујғун магнит моментинин z оху үзрə проjексијалары арасында

$$M_z = -\frac{e}{2\mu c}L_z \tag{60.3}$$

мүнасибəти алынмышды. Мəркəзи саhəдəки həрəкəт үчүн $L_z = m\hbar$ олдуғуну нəзəрə алсаг,

$$M_z = -\frac{e\hbar}{2\mu c}m \tag{60.4}$$

алынар, m– магнит квант əдəдидир.

Бу мүнасибəти јохламаг үчүн Штерн вə Герлах атомлары s сəвијјəсиндə олан бир валентли елементлəрин (hидрокен, литиум, күмүш) атом дəстəлəрини кəскин гејри-бирчинсли (кəскин дəјишəн) магнит саhəсиндəн кечирмишди. s сəвијјəсиндə l=0, m=0 олдуғундан атом бу сəвијјəдə орбитал механики моментə вə ујғун магнит моментинə малик олмур. Она көрə дə белə атом дəстəсинə магнит саhəси hеч бир тə'сир кəстəрмəмəли иди. Лакин тəчрүбəнин мүəллифлəри дəстəнин həрəкəт истигамəтинə нəзəрəн симметрик ики дəстəјə ајрылдығыны мүшаhидə етдилəр. Атомар дəстəнин белə ики дəстəјə ајрылмасы кəстəрирди ки, атом s hалында магнит моментинə (ујғун механики моментə) маликдир вə онун верилмиш истигамəтдəки проjексијасы јалныз ики гијмəт ала билəр. Ејни заманда тəчрүбəдə мүəјјəн олунмушду ки, магнит моментинин мүтлəг гијмəти Бор магнитонуна бəрабəрдир: $M_Б = -\dfrac{e\hbar}{2\mu c}$.

г) Нəhајəт Шрединкер нəзəријјəси əсасында алынмыш

$$\frac{M_z}{L_z} = -\frac{e}{2\mu c} \tag{60.5}$$

нисбəтинин доғрулуғуну јохламаг үчүн апарылан Ејнштејн—Де-Гааз тəчрүбəси үзəриндə дајанаг.

Кварс сапдан асылмыш вə оху əтрафында фырлана билəн ферромагнит силиндрик чубуг сəтhи боју јөнəлмиш магнит саhəсинə салынмагла магнитлəшдирилир. Сонра магнит саhəсини əкс истигамəтдə јөнəлтмəклə магнитлəшмəнин истигамəти дəјишдирилир.

Бу заман чубуғун магнит моменти дəјишдијиндəн онунла мүтəнасиб олан механики момент дə дəјишəчəк вə чубуг өз оху əтрафында мүəјјəн бучаг гəдəр дөнəчəкдир. Дөнмə бучағына көрə $\vec{L}$ механики момент тə'јин едилмиш вə белəликлə $\dfrac{M_z}{L_z}$ нисбəти тапылмышды. Тəчрүбəдə бу нисбəт үчүн $-\dfrac{e}{2\mu c}$ əвəзинə, $-\dfrac{e}{\mu c}$ гијмəти алынмышды.

Бир оптик електронлу атомларын спектриндә спектр хәтләринин дублет гурулуша малик олмасыны вә јухарыда тәсвир олунмуш ики тәчрүбәнин нәтичәләрини изаһ етмәк үчүн *Уленбек* вә *Гаудсмит* фәрз етдиләр ки, електрон, орбитал механики вә магнит моментләри илә јанашы мәхсуси механики вә она ујғун магнит моментинә малик олмалыдыр. Електронун бу мәхсуси механики моменти *спин* $\vec{s}$ вә она ујғун магнит моменти $\vec{M}_s$ исә *спин магнит моменти* адланыр. Јухарыдакы тәчрүбәләрдән алыныр ки, онларын нисбәти

$$\frac{M_z^s}{s_z} = -\frac{e}{\mu c} \tag{60.6}$$

олмалыдыр.

Штерн–Герлах тәчрүбәсиндә s һалында олан електронун магнит моментинин Бор магнитонуна малик олмасы вә Ејнштејн–де-Гааз тәчрүбәсиндә магнит моментин ујғун механики моментә нисбәтинин $-\frac{e}{\mu c}$-јә бәрабәрлији фактындан *Уленбек* вә *Гаудсмит* белә бир нәтичәјә кәлдиләр ки, електронун спини $s = \frac{\hbar}{2}$-јә вә онун z оху үзрә проjексијасы $s_z = \pm\frac{\hbar}{2}$-јә бәрабәр олмалыдыр. Беләликлә, електронун спининин сечилмиш истигамәтдәки (белә истигамәт харичи магнит саһәсинин истигамәти ола биләр) $s_z = m_s\hbar$ проjексијасыны характеризә едән m_s магнит квант әдәди там јох, $m_s = \pm\frac{1}{2}$ кими јалныз ики јарым там гијмәт алыр.

Гејд едәк ки, адәтән там гијмәт алан квант әдәдләри системин мүмкүн олан һалларынын тәк сајда (мәсәлән, l=0, m=0– бир һал, l=1, m= –1,0,1 - үч һал вә и.а.), јарым там гијмәт алан квант әдәдләри – чүт сајда олдуғуну көстәрир (мәсәлән, $s=\frac{1}{2}$, $m_s=-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}$ – ики һал, $s=\frac{3}{2}$, $m_s=-\frac{3}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2}$ – дөрд һал вә и.а.).

Електронун спинә малик олмасы факты маддәнин магнит хассәләрини вә кимјәви елементләрин спектриндәки инчә гурулушу изаһ етмәјә имкан верди.

§ 61. ПАУЛИ ТӘНЛИЈИ

Електронун спинини вә ја мәхсуси магнит моментини илк дәфә нәзәријјәјә дахил едән *Паули* олмушду. Бунун үчүн Паули харичи електромагнит саһәсиндәки һәрәкәт үчүн јазылмыш *Шрединкер* тәнлијинин Һамилтон операторуна спин магнит моментинин харичи магнит саһәси илә гаршылыглы тә'сири характеризә едән һәдд әлавә етмишди. Онда јени Һамилтон оператору

$$\breve{H} = \breve{H}_o - (\vec{M}_s\vec{H}) \tag{61.1}$$

бурада

$$\breve{H}_o = \frac{1}{2\mu}(\breve{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + V(r) - e\varphi. \tag{61.1'}$$

$\vec{M}_s$ – спин магнит моменти, $\vec{A}$ вә φ – ујғун олараг харичи саһәнин вектор вә скаларjар потенсиалларыдыр.

Бундан әввәлки, §-да кәтирилән тәчрүби фактлардан чыхыр ки, спин илә она ујғун магнит моменти арасындакы әлагә (60.6)-ә әсасән

$$\vec{M}_s = -\frac{e}{\mu c}\vec{s} \tag{61.2}$$

шәклиндә олмалыдыр. Онда $\vec{M}_s$-ин магнит саһәси илә гаршылыглы тә'сир енержиси

$$U_s \doteq -\vec{M}_s\vec{H} = \frac{e}{\mu c}\vec{s}\vec{H} \tag{61.3}$$

олар, μ– зәррәчијин күтләсидир.

Буну (61.1)-дә јазандан сонра алынан квант механики тәнлик *Паули* тәнлији адланыр. Онун үмуми шәкли

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\breve{H}_o + \frac{e}{\mu c}\vec{s}\vec{H})\Psi \tag{61.4}$$

Системин стасионар һаллары үчүн $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = E\Psi$ олдуғундан

$$E\Psi = (\breve{H}_o + \frac{e}{\mu c}\vec{s}\vec{H})\Psi \tag{61.5}$$

олар.

Јухарыда көрдүк ки, електрон енержинин вә импулсун мүәјјән гијмәтиндә спинин проjексијасынын ишарәси илә фәргләнән ики мүхтәлиф һалда ола биләр. Демәли, онун һалыны тә'јин едән далға функсијасы електронун ағырлыг мәркәзинин x,y,z координатларындан башга спин дәјишәни s_z-дән дә асылы олмалыдыр: $\Psi(x,y,z,s_z,t)$.

Спин дәјишәни $s_z=+\frac{\hbar}{2}$ вә $-\frac{\hbar}{2}$ кими ики дискрет гијмәт алдығындан Паули, електронун һалыны $\Psi_1=\Psi(x,y,z,s_z=\frac{\hbar}{2},t)$ вә $\Psi_2=\Psi(x,y,z,s_z=-\frac{\hbar}{2},t)$ кими ики далға функсијасы илә тәсвир етмәји тәклиф етмишди. Далға функсијалардан Ψ_1 спинин z охунун мүсбәт истигамәтиндә, Ψ_2 исә онун әксинә јөнәлдији һаллары тәсвир етдијиндән, бу функсијалар ики тәнликдән ибарәт системин һәлли олмалыдыр:

$$a_{11}\Psi_1+a_{12}\Psi_2=0, \qquad (61.6)$$
$$a_{21}\Psi_1+a_{22}\Psi_2=0.$$

Бу систем матриса шәклиндә бир тәнлик кими јазыла биләр:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}=0.$$

Буна көрә (61.5) Паули тәнлијинә дахил олан Ψ-далға функсијасыны

$$\Psi=\begin{pmatrix}\Psi_1 & 0\\ \Psi_2 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} \qquad (61.7)$$

кими икинчи тәртиб бир сүтунлу матриса шәклиндә сечмишди. Онда һәр һансы матрисаја (оператора) ујғун ермит гошма матрисаны тапмаг гајдасына әсасән Ψ-јә ермит гошма далға функсијасы бир сәтирли матриса шәклиндә олар:

$$\Psi^+=\begin{pmatrix}\Psi_1^* & \Psi_2^*\\ 0 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Psi_1^* & \Psi_2^*\end{pmatrix}. \qquad (61.8)$$

Бу заман зәррәчијин спинин пројексијасы илә фәргләнән ики һалдан һәр һансы бириндә олма еһтимал сыхлығы, матрисаларын вурулма гајдасына көрә

$$\Psi^+\Psi=\begin{pmatrix}\Psi_1^* & \Psi_2^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}=\Psi_1^*\Psi_1+\Psi_2^*\Psi_2 \qquad (61.9)$$

олар, јә'ни електронун бу һаллардан бириндә олма еһтимал сыхлығы, еһтималларын топланмасы теореминә ујғун олараг, онларын һәр бириндә ајрылыгда олма еһтимал сыхлыглары чәминә бәрабәрдир.

Инди дә спинин нәзәри тәсвир едилмәси гајдасынын изаһына кечәк. Квант механикасынын үмуми принсипләринә көрә електронун спин хас-

сәләрини тәсвир едән оператор хәтти, *өзүнәгошма* (ермит) оператор олмалыдыр. Ону $\breve{s}$ илә ишарә едәк. $\breve{s}$ оператору мәхсуси механики момент (спин) оператору олдуғундан онун $\breve{s}_x,\breve{s}_y,\breve{s}_z$ компонентләри $\breve{\vec{L}}$ орбитал механики момент операторунун $\breve{L}_x,\breve{L}_y,\breve{L}_z$ компонентләринин өдәдији (13.14) мүнасибәтләри илә көрүнүшчә ејни олан мүнасибәтләри өдәмәлидир.

$$\breve{s}_x\breve{s}_y-\breve{s}_y s_x=i\hbar\breve{s}_z,$$
$$\breve{s}_y\breve{s}_z-\breve{s}_z s_y=i\hbar\breve{s}_x,$$
$$\breve{s}_z\breve{s}_x-\breve{s}_x s_z=i\hbar\breve{s}_y,$$

вә ја

$$\breve{s}_i\breve{s}_k-\breve{s}_k s_i=\sum_l i\hbar\varepsilon_{ikl}\breve{s}_l. \qquad (61.10)$$

Спинин ихтијары истигамәтдәки пројексијасынын ики мүхтәлиф гијмәтинә ујғун олараг $\breve{s}_i(i=1,2,3)$ спин операторлары ики сәтр-сүтунлу матрисаларла ифадә олунур, чүнки, јалныз ики сәтр-сүтунлу матрисалар диагонал шәклә кәтирилдикдә ики диагонал һәддә, јә'ни ики мәхсуси гијмәтә малик олур. Пројексијаларын мүтләг гијмәтинин $\frac{\hbar}{2}$-јә бәрабәр олдуғуну нәзәрә алсаг, $\breve{\vec{s}}$ вә $\breve{s}_i$ операторлары*

$$\breve{\vec{s}}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}',\ \breve{s}_x=\frac{\hbar}{2}\sigma'_x,\ \breve{s}_y=\frac{\hbar}{2}\sigma'_y,\ \breve{s}_z=\frac{\hbar}{2}\sigma'_z \qquad (61.11)$$

кими сечилир. Бурада $\sigma'_x,\sigma'_y,\sigma'_z$ – ики сәтр-сүтунлу өзүнә гошма матрисалар олмалыдыр. Бу матрисалар *Паули* вә ја *спин матрисалары* адланыр.

(61.11) ифадәләрини (61.10)-да јазсаг, σ'_i матрисалары

$$\sigma'_x\sigma'_y-\sigma'_y\sigma'_x=2i\sigma'_z, \qquad (61.12)$$
$$\sigma'_y\sigma'_z-\sigma'_z\sigma'_y=2i\sigma'_x,$$
$$\sigma'_z\sigma'_x-\sigma'_x\sigma'_z=2i\sigma'_y$$

вә ја

$$\sigma'_i\sigma'_k-\sigma'_k\sigma'_i=2i\hbar\sum_l\breve{\varepsilon}_{ikl}\sigma'_l$$

* Дөрд сәтр-сүтунлу σ_i– Дирак матрисаларындан (бах §64) фәргли олараг Паули матрисаларыны штрих илә ишарә едирик.

мүнасибәтләрини өдәјәр. σ'_i матрисаларын мәхсуси гијмәтләри ± 1 олдуғундан онларын квадраты олан σ'^2_x, σ'^2_y вә σ'^2_z-ин мәхсуси гијмәти $+1$ олар. Онда σ'_z-ин диагонал матриса олма тәсвириндә

$$\sigma'_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma'_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma'_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{61.13}$$

кими сечилир. σ'_i матрисаларынын аналитик ифадәсиндән көрүнүр ки, σ'_i матрисалары ермит (өзүнәгошма) матрисалардыр. $\sigma'^+_i = \sigma'_i$ Дикәр тәрәфдән онлар үчүн

$$\sigma'^2_x = \sigma'^2_y = \sigma'^2_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I' \tag{61.14}$$

вә (61.12) мүнасибәтләри өдәнилир. Бурада $I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ —ваһид матрисадыр, о, матриса һесабында ади һесабда ваһидин ојнадығы ролу ојнајыр. Она көрә дә I' матриса әксәр һалларда ади ваһид кими јазылыр. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, σ'_i матрисалары (61.12) вә (61.14) мүнасибәтләрилә јанашы

$$\begin{aligned} \sigma'_x\sigma'_y &= -\sigma'_y\sigma'_x = i\sigma'_z \\ \sigma'_y\sigma'_z &= -\sigma'_z\sigma'_y = i\sigma'_x \\ \sigma'_z\sigma'_x &= -\sigma'_x\sigma'_z = i\sigma'_y \end{aligned} \tag{61.15}$$

мүнасибәтләрини дә өдәјир. (61.14) вә (61.15) бәрабәрликләринә әсасән көстәрмәк олар ки, σ'_i матрисалары үчүн

$$\sigma'_i\sigma'_k + \sigma'_k\sigma'_i = 2\delta_{ik} \tag{61.16}$$

мүнасибәти өдәнилир вә спин операторунун квадраты

$$\breve{s}^2 = \breve{s}^2_x + \breve{s}^2_y + \breve{s}^2_z = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma'^2_x + \sigma'^2_y + \sigma'^2_z) = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} I' \tag{61.17}$$

олур.

(61.11)-дән $\breve{s}$ операторунун ифадәсини (61.4)-дә јазсаг, Паули тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\breve{H}_o + \frac{e\hbar}{2\mu c}(\vec{\sigma}'\vec{H}))\Psi \tag{61.18}$$

шәклинә дүшүр. Бу тәнлијә ермит гошма тәнлик

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^+}{\partial t} = \breve{H}_o\Psi^+ + \frac{e\hbar}{2\mu c}\Psi^+(\vec{\sigma}\vec{H}) \tag{61.19}$$

олар, бурада $\breve{H}^+_o = \breve{H}_o$ вә $\vec{\sigma}^+ = \vec{\sigma}$ олдуғу нәзәрә алынмышдыр. (61.18) тәнлијини солдан Ψ^+-ја, (61.19) тәнлијини исә сағдан Ψ-јә вуруб, тәнликләри бир-бириндән чыхсаг,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = \Psi^+\breve{H}_o\Psi - (\breve{H}_o\Psi^+)\cdot\Psi$$

вә ја

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = \frac{\hbar^2}{2\mu}\vec{\nabla}(\Psi^+\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^+) - \frac{i\hbar e}{\mu c}\vec{\nabla}\vec{A}\cdot\Psi^+\Psi$$

аларыг. Бу тәнлик кәсилмәзлик тәнлијидир, еһтимал сыхлығы

$$\rho = \Psi^+\Psi = \Psi^*_1\Psi_1 + \Psi^*_2\Psi_2,$$

еһтимал чәрәјаны сыхлығы исә

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2\mu}\left[(\vec{\nabla}\Psi^+)\Psi - \Psi^+\vec{\nabla}\Psi\right] - \frac{e}{\mu c}\vec{A}\Psi^+\Psi \tag{61.20}$$

вә ја

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2\mu}\left[(\vec{\nabla}\Psi^*_1)\Psi_1 - \Psi^*_1\vec{\nabla}\Psi_1 + (\vec{\nabla}\Psi^*_2)\Psi_2 - \Psi^*_2\vec{\nabla}\Psi_2\right] - \\ -\frac{e}{\mu c}\vec{A}(\Psi^*_1\Psi_1 + \Psi^*_2\Psi_2) \tag{61.21}$$

олур.

Харичи саһә олмадыгда Ψ_1 вә Ψ_2 функсијалары јалныз о вахт фәргләнәр ки, спин илә електронун ағырлыг мәркәзинин һәрәкәти арасында мүәјјән бир рабитә олсун. Белә рабитә һәмишә вар вә о, спин магнит моменти илә електронун һәрәкәти заманы јаранан чәрәјанын магнит саһәси арасында мејдана чыхыр. Билдијимиз кими, електронун атомун дахилиндәки һәрәкәти гапалы чәрәјан јарадыр, гапалы чәрәјан исә магнит моментинә еквивалентдир.

Бурада орбитал һәрәкәтә ујғун магнит моменти спин магнит моменти илә гаршылыглы тә'сирдә олур. Бу гаршылыглы тә'сир *спин-орбитал гаршылыглы тә'сир* адланыр вә о, спектр хәтләринин мултиплет (хүсуси һалда дублет) гурулуша малик олмасына кәтирир. Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда Ψ_1 вә Ψ_2 функсијалары бир-биринә бәрабәр олур. Лакин белә һалда да електронун (вә ја истәнилән спинә малик башга зәррәчијин) спинә малик олдуғуну нәзәрә алмаг үчүн $\Psi(x,y,z,s_z,t)$ функсијасыны јалныз координатлардан вә јалныз спин дәјишәниндән асылы функсијаларын һасили шәклиндә көтүрүрләр:

$$\Psi(x,y,z,s_z,t)=\Psi(x,y,z,t)S_\alpha(s_z). \tag{61.22}$$

Бурада $S_\alpha(s_z)$ – спин функсијасы адланыр. α индекси спинин пројексијасынын алдығы гијмәтләрә ујғун ики гијмәт алыр: $\alpha=\frac{1}{2}$, $\alpha=-\frac{1}{2}$.

$S_{1/2}(s_z)$–функсијасы спинин мүсбәт пројексијаја малик һалын, $S_{-1/2}$-функсијасы исә мәнфи пројексијаја малик һалын функсијаларыдыр. Беләликлә, спин функсијалары

$$S_{1/2}(s_z=\frac{\hbar}{2})=1,\quad S_{1/2}(s_z=-\frac{\hbar}{2})=0 \tag{61.23}$$
$$S_{-1/2}(s_z=\frac{\hbar}{2})=0,\quad S_{-1/2}(s_z=-\frac{\hbar}{2})=1$$

кими сечилир.

Спин функсијалары ади функсијалар кими ортонормаланма шәртини өдәмәлидир.

$$\sum_{s_z}S^+_\alpha(s_z)S_\beta(s_z)=\delta_{\alpha\beta}\,. \tag{61.24}$$

(61.23) вә (61.24) бәрабәрликләриндән алыныр ки, спин функсијаларыны матриса шәклиндә јазмаг олар:

$$S_{1/2}(s_z)=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\quad S_{-1/2}(s_z)=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix},$$
$$S^+_{1/2}(s_z)=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\quad S^+_{-1/2}(s_z)=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}. \tag{61.25}$$

Инди дә I' вә σ'_i матрисаларынын (61.13) вә (61.14) ифадәләриндән истифадә едәрәк (61.4) тәнлијини матриса шәклиндә јазаг:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\Psi_1\\\Psi_2\end{pmatrix}=\left\{\breve{H}_o\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\frac{e\hbar}{2\mu c}\left[\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}H_x+\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}H_y+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}H_z\right]\right\}\begin{pmatrix}\Psi_1\\\Psi_2\end{pmatrix}. \tag{61.26}$$

Матрисаларын вурулмасы, топланмасы вә бир-биринә бәрабәрлији гајдаларындан истифадә етсәк, (61.26) тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}=\breve{H}_o\Psi_1+\frac{e\hbar}{2\mu c}\left[\left(H_x-iH_y\right)\Psi_2+H_z\Psi_1\right],$$
$$i\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}=\breve{H}_o\Psi_2+\frac{e\hbar}{2\mu c}\left[\left(H_x+iH_y\right)\Psi_1-H_z\Psi_2\right] \tag{61.27}$$

тәнликләр системинә чеврилир.

Бир хүсуси һала бахаг. Фәрз едәк ки, електрон z оху бојунча јөнәлмиш бирчинс магнит саһәсиндә һәрәкәт едир.

Бу һалда үмуми Һамилтон оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан системин һаллары стасионар һаллар олур вә тәнликләр стасионар һалларын тәнликләринә чеврилир.

Магнит саһәси z оху бојунча јөнәлдикдә $H_x=H_y=0,\ H_z=H$ олар вә (61.27) тәнликләр системи

$$E\Psi_1=\breve{H}_o\Psi_1+\frac{e\hbar}{2\mu c}H\Psi_1, \tag{61.28}$$
$$E\Psi_2=\breve{H}_o\Psi_2-\frac{e\hbar}{2\mu c}H\Psi_2$$

шәклинә дүшүр. Бу һалда системин һалларынын гарышмасы арадан чыхыр. Биринчи тәнлик спини z оху бојунча, икинчи тәнлик исә спини z охунун әксинә јөнәлмиш електронун һәрәкәтини тәсвир едир. (61.28)-дән көрүнүр ки, системи

$$E\Psi=\breve{H}_o\Psi+\frac{e\hbar}{2\mu c}H\sigma'_z\Psi \tag{61.29}$$

вә ја (61.1)-ә әсасән

$$E\Psi=\{\ \frac{1}{2\mu}(\breve{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})^2+V(r)-e\varphi+\frac{e\hbar}{2\mu c}H\sigma'_z\Psi \tag{61.30}$$

кими бир тәнлик шәклиндә јазмаг олар.

Шрединкер нәзәријјәсиндә тәсадүф олунан чәтинликләрин һамысыны Паули тәнлији васитәсилә һәлл етмәк мүмкүн олмур. О, гејри-релјативистик тәнлик олараг галыр. Спинин дахил едилмәси јалныз спектр хәтләринин инчә гурулушуну гисмән изаһ едә билир вә спинин тәбиәти һаггында һеч бир мә'лумат вермир. Спин тәнлијә сәбәби мә'лум олмајан бир варлыг кими дахил едилир.

Сонракы тәдгигатлар көстәрди ки, спектр хәтләринин инчә гурулушу гисмән зәррәчијин спинә малик олмасы вә гисмән дә онун күтләсинин сүр'әтдән асылылығы (релјативистик еффект) нәтичәсидир.

§ 62. КЛЕЈН–ГОРДОН–ФОК ТӘНЛИЈИ

Зәррәчијин күтләсинин сүр'әтдән асылылығыны нәзәрә алан релјативистик инвариант тәнлијин үзәриндә дајанаг.

Хүсуси нисбилик нәзәријјәсиндә күтләнин сүр'әтдән асылылығы үчүн

$$m = \frac{m_o}{\sqrt{1-\dfrac{\upsilon^2}{c^2}}} \tag{62.1}$$

ифадәси алыныр. Буну квадрата јүксәлдиб, һәр тәрәфи c^2-на вурандан сонра енержи үчүн $E=mc^2$ ифадәсиндән истифадә етсәк, релјативистик областда ($\upsilon\sim c$) енержи илә импулс арасында

$$E^2 = m_o^2c^4 + c^2p^2 \tag{62.2}$$

ифадәси алыныр. (62.2)-дә (60.2) мүнасибәтләриндән истифадә етсәк,

$$(\hat{E}^2 - m_o^2c^4 - c^2\hat{p}^2)\Psi = 0$$

вә ја

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} + \hbar^2c^2\nabla^2\Psi - m_o^2c^4\Psi = 0 \tag{62.3}$$

тәнлијини аларыг. Зәррәчијин сәрбәст һәрәкәтини тәсвир едән бу тәнлик Клејн–Гордон–Фок тәнлији адланыр (о, Шрединкер тәрәфиндән дә јазылмышды).

Харичи електромагнит саһәси олдуғу һалда, Шрединкер нәзәријјәсиндә олдуғу кими, (60.2) мүнасибәтләри әвәзиндә

$$\begin{aligned} \hat{E} &\rightarrow \hat{E} - e\varphi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi, \\ \hat{\vec{p}} &\rightarrow \hat{\vec{P}} = \hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A} = -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A} \end{aligned} \tag{62.4}$$

көтүрүлүр, бурада $A(\vec{r},t)$ вә $\varphi(\vec{r},t)$ – електромагнит саһәсинин вектор вә скалјар потенсиалларыдыр. Бу һалда (62.3) тәнлији

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi)^2\Psi = c^2(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{e}{c}\vec{A})^2\Psi + m_o^2c^4\Psi \tag{62.5}$$

шәклинә дүшүр.

Мүасир физиканын әсас тәләбләриндән бири физики ганунларын бүтүн инерсиал, јә'ни бири дикәринә нисбәтән сабит сүр'әтлә һәрәкәт едән координат системләриндә ејни бир шәклә малик олмасы тәләбидир. Бир инерсиал системдән дикәринә кечид Лоренс чеврилмәләри васитәсилә ичра олундуғундан, бурадан чыхыр ки, фундаментал (әсас) физики ганунлар *Лоренс*-инвариант олмалыдыр. Лоренс чеврилмәләри дөрдөлчүлү фәзанын ејни бир нөгтәсинин ики инерсиал системдә тә'јин едилмиш $x^\mu(x_0=ct,\ x_1=x,\ x_2=y,\ x_3=z)$ вә $x'^\mu(x'_o,\ x'_1,\ x'_2,\ x'_3)$ координатларыны әлагәләндирир. Белә фәзанын ики нөгтәси арасындакы мәсафәнин (интервалын) квадраты

$$s^2 = c^2(t - t')^2 - (x_1 - x'_1)^2 - (x_2 - x'_2)^2 - (x_3 - x'_3)^2. \tag{62.6}$$

Лоренс чеврилмәләри заманы сабит—инвариант галыр $(x^\mu)^2=0$, $\mu=0,1,2,3$; $s^2=c^2t^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$ кими јазылыр).

Лоренс чеврилмәләри заманы x^μ кими чеврилән истәнилән дөрд кәмијјәт чохлуғу дөрдөлчүлү вектор адланыр. Мәсәлән, електродинамикада електромагнит саһәсинин $\vec{A}$-вектор вә φ скалјар потенсиаллары $A_\mu(i\varphi, A_i)$ дөрдөлчүлү вектор тәшкил едир. Доғрудан да, електродинамикадан мә'лумдур ки, A_μ-нүн вә x^μ-нүн Лоренс-чеврилмә ганунлары ејнидир. Еләчә дә хүсуси нисбилик нәзәријјәсиндә тәчрид едилмиш системин E енержиси вә $\vec{p}$ импулсу дөрдөлчүлү вектордур: $p^\mu(p_o = \dfrac{E}{c},\ p_1, p_2, p_3)$. Белә системә сәрбәст һәрәкәт едән зәррәчик мисал ола биләр. Онун үчүн $\dfrac{E^2}{c^2} - p_i^2$ әсас инвариантдыр:

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_o^2c^2, \tag{62.7}$$

бурада m_o – зәррәчијин сүкунәт күтләсидир.

Үчөлчүлү фәзада олдуғу кими, бурада да дөрдөлчүлү a^μ вә b^μ векторларынын скалјар һасилини дахил едә биләрик. (62.6) ифадәсинә әсасән бу һасили

$$a^\mu b^\mu = a_o b_o - \vec{a}\vec{b} \tag{62.8}$$

кими тә'јин етмәк олар. Бу һасил Лоренс чеврилмәләринә көрә инвариантдыр*.

* Дөрдөлчүлү фәзада x_μ координат векторунун компонентләри $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$, $x_4=ict$ кими дә сечилир. Бу һалда интервал $s^2=x^2+y^2+z^2-c^2t^2$ кими тә'јин олунур. x_μ вә ја x^μ векторларынын сечилмәси әмәлијјатына фәзанын метрикасынын сечилмәси дејилир. Метриканын бунлардан һәр һансы бири шәклиндә сечилмәси физики һадисәләрин тәсвиринә һеч бир дәјишиклик кәтирмир. Һәр ики һалда алынан нәтичәләр ејни олур. $s^2=g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ интервалына замана охшар, $s^2=x_\mu x_\mu$ интервалына исә фәзаја охшар интервал дејилир (ахырынчы ифадәдә $x_\mu(x_i, x_4=ict)$ нәзәрдә тутулур).

Лакин (62.8)-ә мәнфи ишарәси дахил олдуғундан $a^{\mu}(a_o,a_i)$ векторундан башга јени нөв $a_{\mu}(a_o,-a_i)$ дөрдөлчүлү векторун дахил едилмәси әлверишлидир. Бу һалда ики дөрдөлчүлү векторун скалјар һасили

$$a_{\mu}b^{\mu}=a^{\mu}b_{\mu}=g_{\mu\nu}a^{\mu}b^{\nu}=g^{\mu\nu}a_{\mu}b_{\nu}=ab=a_ob_o-\vec{a}\vec{b} \qquad (62.9)$$

јазылыр, бурада $g_{\mu\nu}=g^{\mu\nu}$ ($g_{oo}=1$, $g_{11}=g_{22}=g_{33}=-1$, $g_{\mu\nu}=0$, $\mu\neq\nu$ олдугда) икинчи ранг метрик тензор адланыр. (62.9)-да тәкрар олунан индекс үзрә чәмин апарылмасы нәзәрдә тутулур. a^{μ} – вектору *контравариант*, a_{μ} – вектору исә *ковариант вектор* адланыр. $x_{\mu}=(x_1,x_2,x_3,x_4=ict)$ метрикасында белә ики мүхтәлиф векторларын дахил едилмәсинә еһтијач галмыр.

Мисал олараг (62.7) ифадәсинин сол тәрәфи вә $\frac{E}{c}t-\vec{p}\vec{r}$ ифадәләри ики дөрдөлчүлү векторун скалјар һасили шәклиндә јазыла биләр:

$$p_{\mu}p^{\mu}=\frac{E^2}{c^2}-\vec{p}^{\,2},$$

$$p_{\mu}x^{\mu}=\frac{E}{c}t-\vec{p}\vec{r}\,. \qquad (62.9')$$

(62.3) тәнлијинә заман вә координатлара көрә көтүрүлән төрәмәләр ејни тәртибдән дахил олдуғуна көрә, асанлыгла көстәрмәк олар ки, о Лоренс-инвариантдыр. (62.5) тәнлијинә кәлдикдә, електродинамикадан мә'лумдур ки, бир инерсиал һесабат системиндән дикәр инерсиал һесабат системинә кечдикдә $(\frac{E}{c},\vec{p})$ вә $(\varphi,\vec{A})$ кәмијјәтләри үчүн чеврилмә гануну ејни олдуғундан (62.5) тәнлији дә Лоренс чеврилмәләринә көрә инвариант олур.

Ујғунлуг принсипинә көрә иддиа етмәк олар ки, ***Клејн–Гордон–Фок*** тәнлијинин Һамилтон оператору (62.2) вә (62.4) мүнасибәтләриндән

$$\breve{H}=e\varphi+\sqrt{(\breve{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A})^2+m_o^2c^4} \qquad (62.10)$$

олар. Гејри-релјативистик һалда бу ифадә Шрединкер тәнлијинин Һамилтон операторуна кечир, демәли $\upsilon<<c$ вә ја $c\to\infty$-да (62.5) тәнлијиндән ујғун Шрединкер тәнлији алынмалыдыр.

$$\Psi(\vec{r},t)=e^{-\frac{i}{\hbar}m_oc^2t}\,\Phi(\vec{r},t) \qquad (62.11)$$

унитар чеврилмәси васитәсилә буну көстәрмәк олар. (62.11)-и (62.5) тәнлијиндә јазыб, заман вә координатлара көрә төрәмәләри һесабласаг,

$$2i\hbar m_oc^2\frac{\partial\Phi}{\partial t}-\hbar^2\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}-2e\varphi(m_oc^2\Phi+i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t})+e^2\varphi^2\Phi=c^2(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2\Phi$$

алынар. Ишыг сүр'әти кифајәт гәдәр бөјүк кәмијјәт олдуғундан бу тәнликдә c^2 илә мүтәнасиб олан һәдләрә нисбәтән башга һәдләри нәзәрә алмамаг олар. Галан һәдләри $2mc^2$ бөлсәк,

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t}=\frac{1}{2m}(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A})^2\Phi+e\varphi\Phi$$

Шрединкер тәнлијини алмыш олуруг.

(62.5) тәнлији релјативистик-инвариант тәнлик олдуғундан Лоренс чеврилмәләри заманы Ψ-далға функсијасы әввәлкиндән јалныз бир сабитлә фәргләнәр. Шрединкер нәзәријјәсиндә олдуғу кими, бурада да Ψ нормаланма шәртини өдәмәлидир. Бу бахымдан һәмин сабит +1 көтүрүлә биләр (–1 көтүрүлә билмәз, чүнки Лоренс чеврилмәләри кәсилмәз чеврилмәләрдир). Дикәр тәрәфдән, координатларын инверсијасы (күзкү әкси) чеврилмәсиндә, јә'ни Ψ-јә инверсија оператору илә тә'сир етдикдә функсија +1 вә ја –1-ә вурулар. Башга сөзлә, (62.5) тәнлијинә дахил олан Ψ-функсијасы ја скалјар (ишарәси дәјишилмәдикдә) вә ја псевдоскалјар (ишарәси дәјишилдикдә) ола биләр.

(62.5) тәнлији дә квант механики системин замана көрә инкишафыны (еволјусијасыны) характеризә едир. Системин һалы x,y,z,t дәјишәнләриндән асылы Ψ-далға функсијасы илә тәсвир олунур, спини характеризә едән дәјишән исә дахил олмур. Демәли, бахылан тәнлик јалныз спинә малик олмајан зәррәчикләрин һәрәкәтини тәсвир едә биләр. Спинә малик зәррәчикләрин һәрәкәтини тәсвир етмәк үчүн исә (62.5) тәнлији, јәгин ки, мүәјјән дәјишикликләрә уғрамалыдыр.

(62.5) тәнлијини өдәјән Ψ-функсијасынын маһијјәтини ајдынлашдырмаг үчүн

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\mathrm{div}\,\vec{j}=0 \qquad (62.12)$$

кәсилмәзлик тәнлијини өдәјән ρ еһтимал сыхлығынын вә $\vec{j}$ еһтимал сыхлығы чәрәјанынын ифадәләрини тапаг. Бу иши електромагнит саһәси олмадығы һал үчүн көрәк.

(62.3) тәнлијини сол тәрәфдән Ψ^{+}-ја, Ψ^{+} үчүн јазылмыш тәнлији сағдан Ψ-јә вуруб тәрәф-тәрәфә чыхаг:

$$\frac{1}{c^2}(\Psi^{+}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}-\Psi\frac{\partial^2\Psi^{+}}{\partial t^2})=\Psi^{+}\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^{+}$$

буну

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\Psi\frac{\partial\Psi^+}{\partial t})=\vec\nabla(\Psi^+\vec\nabla\Psi-\Psi\vec\nabla\Psi^+) \qquad (62.13)$$

шәклинә салмаг олар. (62.13)-ү $\frac{i\hbar}{2m}$ вуруғуна вуруб, еһтимал сыхлығы вә еһтимал сыхлығы чәрәјаныны ујғун олараг

$$\rho=\frac{i\hbar}{2mc^2}(\Psi^+\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\Psi\frac{\partial\Psi^+}{\partial t}), \qquad (62.14)$$

$$\vec j=\frac{\hbar}{2mi}(\Psi^+\vec\nabla\Psi-\Psi\vec\nabla\Psi^+) \qquad (62.15)$$

шәкилдә тә'јин етсәк, (62.13) бәрабәрлији (62.12) кәсилмәзлик тәнлијинә чевриләр.

Билдијимиз кими еһтимал сыхлығы һәмишә мүсбәт кәмијјәт олмалыдыр. Лакин ρ-нун (62.14) илә верилмиш ифадәси һәмишә мүсбәт кәмијјәт олмаја да биләр. Доғрудан да К-Г-Ф тәнлији замана көрә икинчи тәртиб тәнлик олдуғундан, далға функсијасынын замана көрә дәјишмәсини тә'јин етмәк үчүн башланғыч анда Ψ-нин јалныз өзү јох, онун замана көрә биринчи тәртиб төрәмәси $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$-дә верилмәлидир. Башланғыч анда Ψ вә $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ ихтијари сечилә билдијиндән (62.14) ифадәси илә тә'јин олунан ρ мүсбәт, мәнфи вә сыфыр ола биләр. Буна көрә дә ρ-ја зәррәчијин координатларынын ваһид интервалда пајланма еһтималы кими бахмаг олмаз. Илк вахтларда бу, К-Г-Ф нәзәријјәсинин чәтинликләриндән бири сајылырды.

Гејд едәк ки, релјативистик нәзәријјәдә, јә'ни бөјүк енержиләр областында, зәррәчикләрин сајы сахланмаја да биләр. $N\rho=\rho_N$ - э зәррәчикләр сајынын сыхлығы кими бахмаг олмаз. Енержинин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә ($MeB\approx10^6$ eB областында) зәррәчик-антизәррәчик чүтүнүн јаранмасы вә ја анниһилјасијасы баш верир. Даһа бөјүк енержи ($\Gamma eB=10^9$ eB) областында исә чүтүн анниһилјасијасы мүхтәлиф зәррәчикләрдән ибарәт шырнаг јарадыр. Лакин бүтүн белә һадисәләрдә електрик јүкүнүн јекун гијмәти сахланыр. Она көрә дә ρ вә ја ρ_N әвәзиндә електрик јүкүнүн $\rho_e=e\rho$ сыхлығындан данышмаг олар, белә ки, бир тәрәфдән о, (62.12) тәнлији шәклиндә јүкүн сахланмасына кәтирир, дикәр тәрәфдән исә ρ_e електрик јүкүнүн ишарәсиндән асылы олараг мәнфи вә мүсбәт гијмәт ала биләр.

Дедикләримиздән чыхыр ки,

$$\rho_e=\frac{i\hbar e}{2mc^2}(\Psi^+\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\Psi\frac{\partial\Psi^+}{\partial t}), \qquad (62.16)$$

$$\vec j_e=\frac{e\hbar}{2mi}(\Psi^+\vec\nabla\Psi-\Psi\vec\nabla\Psi^+) \qquad (62.17)$$

ифадәләринә ујғун олараг, јүкүн вә електрик чәрәјаны шиддәтинин сыхлыглары кими бахмаг олар. Чәрәјан шиддәти сыхлығынын ифадәси онун (17.12) гејри-релјативистик нәзәријјәдә алынан ифадәси үзәринә дүшүр, јүкүн сыхлығы исә јалныз $\upsilon<<c$ шәртиндә өзүнүн Шрединкер нәзәријјәсиндәки гијмәтини алыр. Доғрудан да, (62.16) ифадәсиндә (61.2)-дән $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=E\Psi$ көтүрүб алынан

$$\rho_e=\frac{eE}{mc^2}\Psi^+\Psi \qquad (62.18)$$

ифадәсиндә $E=mc^2$ әвәзини етсәк, ρ_e үчүн ади $\rho_e=e\Psi^+\Psi$ ифадәсини аларыг.

Инди дә К-Г-Ф тәнлијини сәрбәст зәррәчик үчүн һәлл едәк. (62.3) тәнлијинин һәллини

$$\Psi(\vec r,t)=e^{\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(\vec r)$$

шәклиндә ахтараг, онда (62.3)-дән

$$\nabla^2\Psi(\vec r)+k^2\Psi(\vec r)=0 \qquad (62.19)$$

алынар, бурада

$$k^2=\frac{E^2-m_o^2c^4}{\hbar^2c^2}.$$

(62.19) тәнлијинә ујғун характеристик тәнлијинин хассәсинә әсасән онун һәлли

$$\Psi(\vec r)=Ce^{i\vec k\vec r}=Ce^{\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r},$$

бурада $\vec k=\frac{\vec p}{\hbar}$ –далға әдәди векторудур. Бу һәлли (62.19)-да јазсаг, зәррәчијин енержи вә импулсу арасында

$$E^2=c^2p^2+m_o^2c^4$$

мүнасибәти алыныр. Бурадан

$$E=\pm\sqrt{c^2p^2+m_o^2c^4}=\pm\varepsilon=\lambda\varepsilon. \qquad (62.20)$$

Беләликлә, (62.3) тәнлији енержинин вә импулсун мүәјјән гијмәтиндә ики һәллә маликдир:

$$\Psi_{\lambda}(\vec{r},t)=Ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-\lambda\varepsilon t)}. \tag{62.21}$$

Ψ-нин (62.21) илә верилмиш гијмәтини (62.14)-дә јеринә јазсаг,

$$\rho_e^{\lambda}=\frac{\lambda e\varepsilon}{mc^2}\Psi^{+}\Psi \tag{62.22}$$

олар. Бурадан чыхыр ки, $\Psi_{\lambda=+1}$ һәлли енержинин $E=\sqrt{c^2p^2+m_o^2c^4}>0$ һалына ујғун мүәјјән $\vec{p}$ импулслу e јүкүнә малик зәррәчијин сәрбәст һәрәкәтини тәсвир едирсә, $\Psi_{\lambda=-1}$ һәлли исә һәмин $\vec{p}$ импулслу, лакин әкс ишарәли електрик јүкүнә малик зәррәчијин сәрбәст һәрәкәтини тәсвир едәр. Гејд едәк ки, икинчи һәлләр ејни заманда сәрбәст һәрәкәтин там енержисинин мәнфи ишарәли гијмәтинә ујғундур. Демәли, (62.3) тәнлији $E=-\sqrt{c^2p^2+m_o^2c^4}<0$ кими мәнфи там енержили һәлләрә дә маликдир. E-нин мәнфи гијмәти $E=mc^2$ бәрабәрлијиндән мәнфи күтләнин варлығына ујғундур. Мәнфи күтлә анлајышы исә баша дүшүлмүр. Бу факт К-Г-Ф тәнлијинин икинчи чәтинлији һесаб олунурду.

Беләликлә, релјативистик нәзәријјә К-Г-Ф тәнлијинин тәһлилиндә електрик јүкүнүн мүтләг гијмәтиндә бир јох, ики зәррәчикли тәсвирә кәтирмиш олур, јә'ни јүксәк енержиләрдә бир зәррәчикли тәсвири сахламаг мүмкүн дејилдир. Бу нәзәријјәдә ортаја чыхан һәр ики чәтинлик Дирак нәзәријјәсиндә даһа әтрафлы мүзакирә олуначагдыр. Гејд едәк ки, Дирак нәзәријјәсини дә бир зәррәчикли нәзәријјә һесаб етмәк олмаз. *Клејн–Гордон–Фок* тәнлијинин тәтбигинә мисал олараг спинсиз електронун атомдакы һәрәкәтинә бахаг.

§ 63. СПИНИ СЫФЫР ОЛАН ЕЛЕКТРОНУН НҮВӘ САҺӘСИНДӘКИ ҺӘРӘКӘТИ

Һидрокенәбәнзәр атомлар мисалында *Клејн–Гордон–Фок* тәнлијинин һәллинә бахаг. Нөгтәви нүвәнин сферик симметрик саһәси $\vec{A}=0$, $\varphi=-\frac{Ze}{r}$ потенсиаллары илә тәсвир олундуғундан К–Г–Ф. тәнлијинин Һамилтон оператору

$$\breve{H}=c\sqrt{p^2+m_o^2c^2}-\frac{Ze^2}{r} \tag{63.1}$$

замандан асылы олмур. Системин стасионар һаллары үчүн (62.5)-дән

$$\left[(E+\frac{Ze^2}{r})^2+\hbar^2c^2\vec{\nabla}^2-m_o^2c^4\right]\Psi=0 \tag{63.2}$$

тәнлији алыныр. Бу тәнликдә дәјишәнләрә ајырма әмәлијјатыны §39 да олдуғу кими апараг.

Сферик координат системиндә

$$\nabla^2=\nabla_r^2+\frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\varphi}^2$$

олдуғундан, (63.2) тәнлијинин һәллини

$$\Psi=\frac{1}{r}u_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{63.3}$$

кими ахтармаг олар. Онда

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2Y_{l,m}(\theta,\varphi)=-l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

бәрабәрлијини нәзәрә алсаг, һәрәкәт мигдары моментинин мүәјјән гијмәтинә ујғун радиал тәнлик

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2Z\alpha E}{\hbar cr}-\frac{l(l+1)-\alpha^2Z^2}{r^2}-\frac{m_o^2c^4-E^2}{\hbar^2c^2}\right]u_l(r)=0 \tag{63.4}$$

шәклини алар, бурада $\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}$ — инчә гурулуш сабитидир.

Ахырынчы тәнлији һәлл етмәк үчүн §39-да тәтбиг олунан методдан истифадә едәк. Бунун үчүн (63.4) тәнлијиндә

$$\rho=\beta r,\quad \beta=\frac{\alpha E}{\hbar c},\quad \varepsilon=\frac{E^2-m_o^2c^4}{\hbar^2c^2} \tag{63.5}$$

әвәзләрини дахил етмәклә адсыз кәмијјәтләрә кечәк. Алынан

$$(\frac{d^2}{d\rho^2}+\varepsilon+\frac{2Z}{\rho}-\frac{l(l+1)-\alpha^2Z^2}{\rho^2})u_l(\rho)=0 \tag{63.6}$$

тәнлији (40.17) Шрединкер тәнлијинин демәк олар ки, үзәринә дүшүр. Бу охшарлығы даһа да күчләндирмәк үчүн

$$l'(l'+1)=l(l+1)-\alpha^2Z^2 \tag{63.7}$$

әвәзини көтүрәк. Онда (40.17) илә (63.6) арасында там охшарлыг алыныр:

$$(\frac{d^2}{d\rho^2}+\varepsilon+\frac{2Z}{\rho}-\frac{l'(l'+1)}{\rho^2})u_{l'}(\rho)=0. \tag{63.8}$$

(63.8) тәнлијинин ρ дәјишәниндән асылылығы тамамилә (40.17)-дә олдуғу кимидир. Лакин тәнликләрә дахил олан сабитләр бир-бириндән фәргләнир. Јәгин ки, бу фәрг (63.8)-ин һәлли характерини дәјишә билмәз. (63.8) тәнлијинә дахил олан вә ρ^2 илә тәрс мүтәнасиб, релјативистик чазибә потенсиал енержиси ролуну ојнајан әлавә $\frac{\alpha^2 Z^2}{\rho^2}$ һәддинә кәлдикдә исә о, бә'зи һалларда тәнлијин һәлли характеринә мүәјјән тә'сир көстәрә билэр.

(63.8) илә (40.17)-нин мүгајисәси көстәрир ки, (63.8)-ин һәлли там мә'насилә (40.17)-нин һәлли јолу илә апарыла билэр. (63.8) тәнлијинин һәллинин $\rho\to\infty$-да сонлу галмасы үчүн $u_{l'}(\rho)$ функсијасы $e^{-\gamma\rho}$ вуруғу илә мүтәнасиб олмалыдыр:

$$u_{l'}(\rho) = e^{-\gamma\rho} f_{l'}(\rho), \qquad \gamma = \sqrt{-\varepsilon}. \qquad (63.9)$$

$f_{l'}(\rho)$ функсијасы исә көрүнүшчә (40.19) тәнлијинин үзәринә дүшән тәнлији өдәјир. $f_l(\rho)$-нун $\rho\to 0$-да сонлу галмасы үчүн исә о,

$$f_{l'}(\rho) = \rho^{l'+1}\sum_k a_k \rho^k \qquad (63.10)$$

шәклиндә ахтарылыр. Јәгин ки, $\rho^{l'+1}$ вуруғу бурада далға функсијасынын $\rho\to 0$-да сонлу галмасыны тә'мин етмәлидир. l' исә (63.7) тәнлијини өдәјир. (63.7) -нин сағ тәрәфи сабит кәмијјәт олдуғундан онун һәлли $l'^2 + l' + a = 0$ квадрат тәнлијинин һәлли кими ахтарыла билэр:

$$l'_\pm = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - Z^2\alpha^2}\,. \qquad (63.11)$$

Гејри-релјативистик һалда, јә'ни $\alpha^2 Z^2 \to 0$-да l' үчүн (63.7)-дән $l'_+ = l$, $l'_- = -l-1$ кими ики һәлл алыныр. (63.10)-да $f_{l'}(\rho)$ функсијасынын бу һалда сонлу галмасы үчүн, Шрединкер нәзәријјәсиндә олдуғу кими, l' үчүн $l' = l'_+ = l$ һәллини сахламаг лазымдыр. l' үчүн l'_+ көкүнүн көтүрүлмәси тәләби о гәдәр дә инандырычы дејилдир, чүнки $\alpha Z < \frac{1}{2}$-дә (63.11)-дәки l'_+ вә l'_- көкләринин һәр икиси l-ин бүтүн гијмәтләриндә һәгиги кәмијјәтләрдир вә $l=0$-да $l'_+ < 0$ галыр. Бу заман $u_l(\rho)$ функсијасы $\rho\to 0$ да сонлу галмыр. $Z\alpha > \frac{1}{2}$ олдугда исә $l=0$-да l'_+ көкү комплекс кәмијјәт олур вә $u_l(\rho)$ функсијасынын кәсилмәз рәгсләринә кәтирир. Бу

һалда електронун енержи спектри кәсилмәз олур вә електронун нүвә үзәринә "дүшмәси" еһтималы јараныр. Демәли белә көкү көтүрмәк һәгигәтә ујғун нәтичәјә кәтирмир. Бурадан көрүнүр ки, $\alpha Z\neq 0$ олдугда далға функсијасынын һәр јердә сонлу галдығыны тәләб етмәк мүмкүн дејилдир. Лакин онун квадратик интегралланан олмасыны, јә'ни нормаланма шәртинин өдәдијини тәләб етмәк лазымдыр. Бу ахырынчы тәләб исә јалныз l'_+ көкү үчүн өдәнилир.

(63.10)-а дахил олан сыранын сонлу галмасы тәләби исә сонсуз сыранын сонлу сајда һәдләрдән ибарәт сыраја, јә'ни чохһәдлијә (полинома) чеврилмәсинә кәтирир. Сыранын һәр һансы n_r һәддән сонра кәлән һәдләрин сыфра бәрабәр олмасы үчүн, (40.24) охшар олараг,

$$2\gamma(n_r + l' + 1) - 2Z = 0 \qquad (63.12)$$

шәрти өдәнилмәлидир. Бурада $n_r + l' + 1$ чәмини n' илә ишарә етсәк, l'-ин l' көкүндә

$$n' = n_r + l'_+ + 1 = n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{(l+\frac{1}{2})^2 - \alpha^2 Z^2} \qquad (63.13)$$

олар. $(n'-l'-1)$ әдәдинин мәнфи әдәд олмасы тәләбиндән (63.10)-дакы сыра $F(-(n'-l'-1),\ 2l'+2,\rho)$ чырлашмыш һиперһәндәси функсијаја бәрабәр олар. Беләликлә, $u_{l'}(\rho)$ функсијасы

$$u_{l'}(\rho) = \rho^{l'+1}F(-(n'-l'-1),\ 2l'+2,\rho)$$

вә бурадан системин радиал функсијасы үчүн

$$R_{l'}(\rho) = \rho^{l'} e^{-\gamma\rho} F(-(n'-l'-1),\ 2l'+2,\ \rho) \qquad (63.14)$$

ифадәси алыныр.

(63.9), (63.12) вә (63.13) ифадәләриндән

$$\gamma = \frac{Z}{n'} \ \text{вә ја}\ \gamma^2 = \frac{Z^2}{n'^2} = -\varepsilon\,. \qquad (63.15)$$

(63.5) бәрабәрликләриндә ε-нун мәхрәчиндәки β-ны онун ифадәси илә әвәз етсәк, системин там енержиси

$$E = \frac{m_0 c^2}{(1+\frac{\alpha^2 Z^2}{n'^2})^{\frac{1}{2}}}\,. \qquad 63.16)$$

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ инчә гурулуш сабитинин гијмәти кичик олдуғуна көрә, чох ағыр атомлар мүстәсна олмаг шәртилә, бүтүн атомлар үчүн αZ һасили ваhиддән кичик галачаг. (63.16)-да n'-и онун (63.13)-дәки гијмәти илә әвәз едәндән сонра алынан ифадәни αZ-ин үстләринә көрә сыраја ајырсаг,

$$E_{nl} = m_o c^2 \left\{ 1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \ldots \right\} \quad (63.17)$$

алынар, бурада $n = n_r + l + 1$ –баш квант әдәдидир.

(63.17)-дә ки биринчи һәдд зәррәчијин сүкунәт енержисини, икинчи һәдд

$$-\frac{m_o c^2 \alpha^2 Z^2}{2n^2} = -\frac{m_o Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2} = E_n^o .$$

m_o күтләли зәррәчијин $\upsilon << c$ гејри-релјативистик јахынлашамада Кулон саһәсиндәки һәрәкәтинин енержиси (бах (40.26), үчүнчү һәдд

$$E'_{nl} = -\frac{m_o c^2 Z^4 \alpha^4}{2n^4}\left[\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] = -\frac{E_n^o Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2 n^2}\left[\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}} \right] \quad (63.18)$$

исә енержијә релјативистик әлавәдир.

E_n-ин n-дән башга l квант әдәдиндән дә асылылығы көстәрир ки, релјативистик еффектләрин нәзәрә алынмасы атомун енержи сәвијјәләринин гејри-релјативистик нәзәријјәдә олан (§39 бах) l-ә көрә чырлашманы арадан көтүрүр. Башга сөзлә атомун n-ин мүәјјән гијмәтинә ујғун E_{nl} енержи сәвијјәси $l=0,1,...,n-1$, јә'ни n сајда бир-биринә чох јахын јерләшмиш мүхтәлиф сәвијјәләрә парчаланыр.

Алынан нәзәри нәтичәләри тәчрүбә илә мүгајисә етмәк үчүн һидрокенин Балмер серијасында ($n=2$) спектрал хәттин мүшаһидә олунан парчаланмасыны (дублетин ики јахын хәтти арасындакы мәсафәни) (63.17)-дән алынан гијмәтилә мүгајисә едәк. (63.17)-дән ($n=2$ дә $l=0,1$ олдуғундан) бу парчаланма үчүн

$$\Delta\omega = \frac{E_{21} - E_{20}}{\hbar} = \frac{8}{3}\frac{m_o e^4 \alpha^2}{\hbar^3 16} \quad (63.19)$$

алыныр. Тәчрүбәдән $\Delta\omega$ үчүн алынан гијмәт исә (63.19) илә верилән гијмәтдән үч дәфә кичикдир. Бу ујғунсузлуг көстәрир ки, атомун спектриндә мүшаһидә олунан инчә гурулуш, јалныз зәррәчијин күтләсинин сүр'әтдән асылылығы (релјативистик еффект) илә тә'јин олунмур. Бундан башга, §75-дә көрәчәјимиз кими, електронун спинә малик олмасы факты да спектрин инчә гурулушунун јаранмасына сәбәб олур.

Јухарыда гејд етдик ки, К–Г–Ф. тәнлијинә дахил олан Ψ-далға функсијасы ја скалјар вә ја да псевдоскалјар кәмијјәтдир, јә'ни тәнлик јалныз

спини сыфыр олан зәррәчикләрин (π, K вә δ-мезонлар групу) хассәләрини тәсвир едә биләр. Електронун спини исә 1/2-дир вә о, спини јарым там олан зәррәчикләрә, јәгин ки, тәтбиг олуна билмәз. Белә зәррәчикләр үчүн чох еһтимал ки, башга тәнлик јазылмалыдыр.

Гејд едәк ки, К–Г–Ф. тәнлији спини ваһид олан зәррәчикләрин тәсвири үчүн дә тәтбиг олуна билир. Мәсәлән, фотонун һәрәкәтини тәсвир етмәк үчүн К–Г–Ф тәнлијиндә $m_o=0$ көтүрүлмәли, вә $\Psi(\vec{r},t)$ функсијасы електромагнит саһәсинин $\vec{A}(\vec{r},t)$ вектор потенсиалы илә әвәз олунмалыдыр.

§ 64. ДИРАК ТӘНЛИЈИ

Гејри-релјативистик (Шрединкер) вә о вахтын релјативистик (К–Г–Ф) квант механикасы илә тәчрүби нәтичәләр арасындакы ујғунсузлуглары арадан көтүрмәк вә еһтимал сыхлығынын мәнфи ишарәјә малик олмасы илә әлагәдар чәтинликләри һәлл етмәк мәгсәдилә Дирак, $\frac{\partial}{\partial t}$-јә вә бурадан да $\vec{\nabla}$ операторуна көрә хәтти релјативистик инвариант тәнлик тапмаг мәсәләсини гаршыја гојду.

Дирак дүшүнүрдү ки, a^2+b^2 квадратик ифадәни $(a+ib)(a-ib)$ кими хәтти вуруглара ајырдыгда ади фәзанын ваһидиндән әлавә комплекс фәзанын $i=\sqrt{-1}$ ваһидини дахил етмәли олуругса, мүхтәлиф ријази фәзаларын ваһидләриндән истифадә етмәклә, истәнилән квадратик ифадәни, о чүмләдән $\breve{E}^2 - c^2\breve{p}^2 - m_o^2 c^4$-ү хәтти вуругларын һасили шәклиндә јазмаг олар. Беләликлә, Дирак (62.3) тәнлијини

$$(E - c\alpha_1\breve{p}_1 - c\alpha_2\breve{p}_2 - c\alpha_3\breve{p}_3 - \alpha_4 m_o c^2)(E + c\alpha_1\breve{p}_1 + c\alpha_2\breve{p}_2 + \\ + c\alpha_3\breve{p}_3 + \alpha_4 m_o c^2)\Psi = 0 \quad (64.1)$$

кими ики хәтти операторун һасили илә тә'јин олунан тәнлик шәклиндә јазмағы тәклиф етди. Бурада α_1, α_2, α_3, α_4 –заман вә координатлардан асылы олмајан ихтијари ријази фәзаларын ваһидләридир. (64.1)-дә биринчи мө'тәризәни $\breve{M}$, икинчини $\breve{N}$ илә ишарә етсәк, ону

$$\breve{M}\breve{N}\Psi = 0 \text{ вә ја } \breve{N}\breve{M}\Psi = 0 \quad (64.2)$$

кими јазмаг олар. $\breve{M}$ вә $\breve{N}$ мүхтәлиф операторлар олдуғундан, јәгин ки, биринин мәхсуси функсијалары дикәринин мәхсуси функсијалары үзәринә дүшмүр (белә ки, харичи саһәдәки һәрәкәт һалында онлар коммутасија етмир). Она көрә дә $\breve{M}\Psi = 0$ ($\breve{N}\Psi \neq 0$) вә ја да $\breve{N}\Psi = 0$ ($\breve{M}\Psi \neq 0$) олар. Башга сөзлә,

$$(\hat{E} - c\alpha_i\hat{p}_i - \alpha_4 m_o c^2)\Psi = 0 \qquad (64.3)$$

вә ја

$$(\hat{E} + c\alpha_i\hat{p}_i + \alpha_4 m_o c^2)\Psi = 0 \qquad (64.4)$$

тәнлијини әсас көтүрмәк олар. Бу тәнликләрин һәр икиси, бири дикәриндән асылы олмајараг, **Дирак тәнлији** адланыр. Онларын һәр икиси ејни физики нәтичәләрә кәтирир. Башга сөзлә, бахылан системин һәрәкәт характери һансы тәнлијин әсас тәнлик көтүрүлмәсиндән асылы дејилдир. Мүәллифләрин әксәријјәти (64.3) тәнлијини әсас көтүрүрләр. Бурада биз дә һәмин тәнликлә ишләјәчәјик.

α_i вә α_4 кәмијјәтләринин маһијјәтини баша дүшмәк вә аналитик ифадәләрини тапмаг үчүн (64.3) тәнлијиндән (62.3) тәнлијинә кечәк. Бунун үчүн тә'сир гануну мә'лум олмајан α_i вә α_4 кәмијјәтләринә оператор кими бахмаг шәртилә (64.1)-ә дахил олан операторларын һасилини ачаг:

$$\Big\{ E^2 - \sum_{i=1}^{3}\alpha_i^2\hat{p}_i^2 - \sum_{i\neq k}(\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i)\hat{p}_i\hat{p}_k - \sum_i(\alpha_4\alpha_i + \alpha_i\alpha_4)\hat{p}_i m_o c^2 -$$
$$-\alpha_4^2 m_o^2 c^4 \Big\}\Psi = 0.$$

Бу тәнлијин (62.3) тәнлијинин үзәринә дүшмәси үчүн

$$\begin{aligned} &\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \alpha_4^2 = I \\ &\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 0 \ (i \neq k) \\ &\alpha_i\alpha_4 + \alpha_4\alpha_i = 0 \end{aligned} \qquad (64.5)$$

бәрабәрликләри өдәнилмәлидир. Онлары бир мүнасибәт шәклиндә јазмаг олар:

$$\alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \qquad (64.6)$$

(бурада μ, ν=1,2,3,4 гијмәтләрини алыр). (64.5) вә (64.6)-дан көрүнүр ки, α_i вә α_4 кәмијјәтләри бир-бирилә коммутасија етмир, демәли онлар ади әдәдләр дејил. Бу хассә јалныз операторлара хасдыр.

Буна охшар мүнасибәтләр Дирака гәдәр Паули матрисалары үчүн мә'лум иди. Енержи вә импулсун мүәјјән гијмәтиндә електрон спининин верилмиш ох (мәсәлән, z-оху) үзрә ики мүхтәлиф пројексијаја ујғун һаллары (һидрокенин спектриндә спектр хәтләринин инчә гурулушу) фәргләндирмәк үчүн Паули квант механикасына ики сәтир-сүтунлу матрисалар дахил етмишди (бах §61).

$$\sigma'_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma'_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ \sigma'_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \ I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (64.7)$$

(σ'_z-ин диагонал олдуғу тәсвирдә). Бу матрисалар (64.5)-ә охшар

$$\begin{aligned} &\sigma_x'^2 = \sigma_y'^2 = \sigma_z'^2 = I' \\ &\sigma'_i\sigma'_k + \sigma'_k\sigma'_i = 0 \ (i \neq k) \\ &\sigma'_i\sigma'_k = \sum_l i\tilde{\varepsilon}_{ikl}\sigma'_l \end{aligned} \qquad (64.8)$$

бәрабәрликләрини өдәјир. Буна ујғун Паули тәнлијиндә (бах §61) Ψ-далға функсијасы ики компонентли матриса шәклиндә көтүрүлүр:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}; \ \Psi^+ = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1^* \Psi_2^* \end{pmatrix} \qquad (64.9)$$

(бурада + ишарәси ермит гошманы, * исә комплекс гошманы көстәрир).

(64.5)-ә дахил олан мүнасибәтләрин сајы (64.8)-дәки мүнасибәтләрин сајындан чох олдуғундан α_i, α_4 Дирак матрисалары Паули матрисалары илә ејни ола билмәзди. Мүәјјән олунду ки, (64.5) мүнасибәтләрини өдәјән ән ашағы тәртибли (өлчүлү) матрисалар дөрд сәтир-сүтунлу матрисалар олмалыдыр. Квант механики системин хассәләри тәсвирин сечилмәсиндән асылы олмадығына көрә (64.5) мүнасибәтләрини өдәјән истәнилән тәсвирдә сечилмиш матрисалар әсас көтүрүлә биләр. Дирак, өз матрисаларыны гурмаг үчүн Паули матрисаларындан истифадә етди:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0' & \sigma'_i \\ \sigma'_i & 0 \end{pmatrix}, \ \alpha_4 = \rho_3 = \beta = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}. \qquad (64.10)$$

Буна Паули–Дирак тәсвири дејилир. Мә'лумдур ки, унитар чевирмәләрин көмәји илә бу матрисалары истәнилән башга тәсвирдә дә јазмаг олар. Бу, һеч дә алынан физики нәтичәләрин дәјишмәсинә кәтирмир.

Матрисаларын сечилмәси мәсәләсини ахыра чатдырмаг үчүн гејд едәк ки, Дирак α_i, α_4 матрисалары әвәзиндә һәр бири үч матрисадан ибарәт ики груп матриса сечмишди:

$$\sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma'_i & 0' \\ 0 & \sigma'_i \end{pmatrix}, \ i=1,2,3$$

вә

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0' & I' \\ I' & 0' \end{pmatrix}, \ \rho_2 = \begin{pmatrix} 0' & -iI' \\ iI' & 0' \end{pmatrix}, \ \rho_3 = \begin{pmatrix} I' & 0' \\ 0' & -I' \end{pmatrix}, \qquad (64.11)$$

бурада σ_i' –Паули, $0' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ - сыфыр, $I' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ —vahид матрисалардыр. α_i, α_4 матрисалары илә σ_i, ρ_i матрисалары арасында әлагә

$$\alpha_i = \rho_1\sigma_i, \;\; \alpha_4 = \rho_3 = \beta \tag{64.12}$$

кимидир. Гејд едәк ки, σ_i вә ρ_i матрисалары бир-бирилә коммутасија едир вә ајрылыгда (64.4) охшар мүнасибәтләри өдәјир:

$$\begin{aligned} &\sigma_i\rho_k = \rho_k\sigma_i, \\ &\sigma_i\sigma_k + \sigma_k\sigma_i = 2\delta_{ik}, \\ &\rho_i\rho_k + \rho_k\rho_i = 2\delta_{ik}. \end{aligned} \tag{64.13}$$

Асанлыгла көстәрмәк олар ки, ахырынҹы матрисалар

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_k &= -\sigma_k\sigma_i = i\sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl}\sigma_l \\ \rho_i\rho_k &= -\rho_k\rho_i = i\sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl}\rho_l \end{aligned} \tag{64.14}$$

бурадан да

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_k - \sigma_k\sigma_i &= 2i\sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl}\sigma_l \\ \rho_i\rho_k - \rho_k\rho_i &= 2i\sum_l \tilde{\varepsilon}_{ikl}\rho_l \end{aligned} \tag{64.15}$$

мүнасибәтләрини өдәјир.

(64.3) Дирак тәнлијини мәхсуси гијмәт вә мәхсуси функсијаја ујғун

$$\breve{H}\Psi = E\Psi$$

тәнлији шәклиндә јазыб, (64.3) илә мүгајисә етсәк, Дирак нәзәријјәсиндә

$$\breve{H} = c\alpha_i\breve{p}_i + \rho_3 m_o c^2 = c\bar{\alpha}\bar{\breve{p}} + \rho_3 m_o c^2 \tag{64.16}$$

системин Һамилтон оператору олур.

Дирак матрисаларынын дөрд сәтир-сүтунлу олмасы далға функсијанын да дөрд компонентли сечилмәсинә кәтирир:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 0\,0\,0 \\ \Psi_2 0\,0\,0 \\ \Psi_3 0\,0\,0 \\ \Psi_4 0\,0\,0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}; \quad \Psi^+ = \begin{pmatrix} \Psi_1^*\Psi_2^*\Psi_3^*\Psi_4^* \\ 0\;\;0\;\;0\;\;0 \\ 0\;\;0\;\;0\;\;0 \\ 0\;\;0\;\;0\;\;0 \end{pmatrix} = \left(\Psi_1^*\Psi_2^*\Psi_3^*\Psi_4^*\right). \tag{64.17}$$

Бу функсијалар Дирак *спинору* вә ја *биспинор* адланыр (билдијимиз кими, ики компонентли кәмијјәтә спинор дејилир, мәсәлән, $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$ Паули функсијасы).

Матрисаларын вурулма вә топланма гајдаларына әсасән көстәрмәк олар ки, (64.3) Дирак тәнлији дөрд тәнликдән ибарәт ашағыдакы кими

$$\begin{aligned} &(E - m_o c^2)\Psi_1 - c(\breve{p}_x - i\breve{p}_y)\Psi_4 - c\breve{p}_z\Psi_3 = 0 \\ &(E - m_o c^2)\Psi_2 - c(\breve{p}_x + i\breve{p}_y)\Psi_3 + c\breve{p}_z\Psi_4 = 0 \\ &(E + m_o c^2)\Psi_3 - c(\breve{p}_x - i\breve{p}_y)\Psi_2 - c\breve{p}_z\Psi_1 = 0 \\ &(E + m_o c^2)\Psi_4 - c(\breve{p}_x + i\breve{p}_y)\Psi_1 + c\breve{p}_z\Psi_2 = 0 \end{aligned} \tag{64.18}$$

бирҹинс тәнликләр системинин јығҹам (матриса шәклиндә) шәклидир.

Нәһајәт мүасир физикада Дирак нәзәријјәсиндә истифадә олунан матрисаларла охуҹуну танныш етмәк үчүн Дирак тәнлијини коваријант вә ја дөрдөлчүлү шәкилдә јазаг.

§ 65. ДИРАК ТӘНЛИЈИНИН КОВАРИАНТ ШӘКЛИ

(64.3) Дирак тәнлијиндә $\breve{E}$ енержи вә $\bar{\breve{p}}$ импулс операторларыны ујғун ифадәләр илә әвәз едәк

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\alpha_i\frac{\partial}{\partial x_i} - \rho_3 m_o c^2)\Psi = 0. \tag{65.1}$$

Бунун һәр бир һәддини $\hbar c$-јә бөлүб, биринҹи һәддә i-ни мәхрәҹә кечирәндән сонра тәнлији солдан ρ_3-ә вурсаг

$$(\rho_3\frac{\partial}{\partial(ict)} - i\rho_3\alpha_i\frac{\partial}{\partial x_i} + k_o)\Psi = 0 \tag{65.2}$$

олар.

$$\gamma_4 = \rho_3, \;\; \gamma_i = -i\rho_3\alpha_i = -i\gamma_4\alpha_i \tag{65.3}$$

шәкилдә јени γ_μ (гамма) матрисалар дахил етдикдә (65.2) тәнлији ($x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$, $x_4=ict$ метрикасында)

$$(\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu} + k_o)\Psi = 0 \tag{65.4}$$

шəклини алыр. $\gamma_\mu(\gamma_i,\gamma_4)$ матрисалары, (65.3)-дə көстəрилəн мə'нада, дөрдөлчүлү вектор тəшкил едир. (65.4) тəнлији Дирак тəнлијинин коваријант шəклидир. $\gamma_\mu \frac{\partial}{x_\mu}$ hасили ики ејни тəбиəтли дөрдөлчүлү векторун скалјар hасили олдуғундан, о həмишə скалјар кəмијјəтдир. Белəликлə, Дирак тəнлији релјативистик инвариант тəнликдир, јə'ни о, Лоренс чеврилмəлəри заманы шəклини дəјишмир.

(64.5) вə (64.13) мүнасибəтлəриндəн истифадə едəрəк, асанлыгла көстəрмəк олар ки, γ_μ -матрисалары үчүн дə (64.6) мүнасибəти өдəнилир:

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}. \tag{65.5}$$

Инди дə Ψ^+ ермит-гошма функсијанын өдəдији тəнлији тапаг. Јухарыда көрдүк ки, Шрединкер вə Клејн–Гордон–Фок тəнликлəриндəн фəргли олараг, Дирак тəнлији матриса шəклиндə јазылмыш бирчинс систем тəнликдир. Она көрə дə верилмиш матрисаја (оператора) ујғун ермит-гошма матриса тапмаг үчүн комплекс гошма вə транспозисија (сəтир вə сүтунларын јерини дəјишмəк) əмəлијјатларыны апармаг лазымдыр. Ψ (64.17) илə верилмиш матриса олдуғундан Ψ^+ ермит-гошма функсија үчүн Дирак тəнлији (65.1)-дəн

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^+}{\partial t} - i\hbar c\frac{\partial\Psi^+}{\partial x_i}\alpha_i - \Psi^+ m_o c^2\rho_3$$

вə ја (65.2)-дəн

$$-\frac{\partial}{\partial(ict)}(\rho_3\Psi)^+ + \frac{\partial}{\partial x_i}(-i\rho_3\alpha_i\Psi)^+ + k_o\Psi^+ = 0 \tag{65.6}$$

шəклиндə јазылыр. Ермит-гошма матрисаларын тапылмасы гајдасындан истифадə етсəк,

$$(\rho_3\Psi)^+ = \Psi^+\rho_3,\ (-i\rho_3\alpha_i\Psi)^+ = \Psi^+(-i\rho_3\alpha_i)^+ = \Psi^+\gamma_i^+$$

олар. Асанлыгла көстəрмəк олар ки, $\alpha_i, \rho_i, \sigma_i$ вə онларын төрəмəси олан γ_μ матрисалары да ермит-гошма (өзүнə-гошма) матрисалардыр:

$$\gamma_4^+ = \rho_3^+ = \rho_3 = \gamma_4,\ \gamma_i = (-i\rho_3\alpha_i)^+ = i\alpha_i^+\rho_3 = -i\rho_3\alpha_i = \gamma_i.$$

Бунлары (65.6)-да нəзəрə алсаг,

$$\frac{\partial\Psi^+}{\partial x_4}\gamma_4^+ - \frac{\partial\Psi^+}{\partial x_i}\gamma_i - k_o\Psi^+ = 0.$$

Бу тəнлији коваријант шəклə салмаг үчүн икинчи həддин ишарəсини дəјишмəк лазымдыр. Бу мəгсəдлə ону сағдан γ_4 вураг, (65.5)-дəн $\gamma_i\gamma_4 = -\gamma_4\gamma_i$ олдуғуну нəзəрə алыб

$$\overline{\Psi} = \Psi^+\gamma_4 \tag{65.7}$$

əвəзини дахил етсəк, јухарыдакы тəнлик

$$\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x_\mu}\gamma_\mu - k_o\overline{\Psi} = 0 \tag{65.8}$$

коваријант шəкилдə јазыла билəр.

§ 66. КƏСИЛМƏЗЛИК ТƏНЛИЈИ. ЕҺТИМАЛ СЫХЛЫҒЫ ВƏ ЕҺТИМАЛ ЧƏРƏЈАНЫ СЫХЛЫҒЫ

Јухарыда дедиклəримизə əсасəн (64.3) вə она гошма (65.1) тəнликлəрини

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} + i\hbar c\alpha_i\frac{\partial\Psi}{\partial x_i} - \rho_3 m_o c^2\Psi = 0,$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^+}{\partial t} - i\hbar c\frac{\partial\Psi^+}{\partial x_i}\alpha_i - m_o c^2\Psi^+\rho_3 = 0$$

шəклиндə јазаг. Бурада биринчи тəнлији солдан Ψ^+-ја, икинчи тəнлији исə сағдан Ψ-јə вуруб, биринчидəн икинчини чыханда ρ_3 илə мүтəнасиб həдлəр ихтисар олунар. Нəтичəни $i\hbar$-ə бөлəндəн сонра

$$\Psi^+\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^+}{\partial t}\Psi + c\Psi^+\alpha_i\frac{\partial\Psi}{\partial t} + c\frac{\partial\Psi^+}{\partial t}\alpha_i\Psi = 0$$

алынар. α_i матрисалары заман вə координатлардан асылы дејил, онда

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(c\Psi^+\alpha_i\Psi) = 0$$

олар. Бурада

$$\rho = \Psi^+\Psi,\ j_i = c\Psi^+\alpha_i\Psi \tag{66.1}$$

əвəзлəрини гəбул етдикдə

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial j_i}{\partial x_i} = 0 \text{ вə ја } \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{j} = 0 \tag{66.2}$$

кәсилмәзлик тәнлијинә кәлирик. Беләликлә, ρ—еhтимал сыхлығы, $\vec{j}$ исә еhтимал чәрәјаны сыхлығыдыр. (66.1)-дән көрүнүр ки, Дирак нәзәријјәсиндә (Шрединкердә олдуғу кими) ρ hәмишә мүсбәт кәмијјәтдир. Дирак буну өзүнә мәгсәд гојмуш вә она наил олмушду. Лакин адәтән кәсилмәзлик тәнлијинә електрик јүкүнүн (вә ја башга тәбиәтли јүкүн) сахланмасы бахымындан јанашылса, јүкүн сыхлығыны ифадә едән

$$\rho_e = e\rho = e\Psi^+\Psi \tag{66.3}$$

кәмијјәти јүкүн ишарәсиндән асылы олараг, мәнфи вә мүсбәт ола биләр вә јүкүн сахланма гануну

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \mathrm{div}\,\vec{j}_e = 0 \tag{66.4}$$

шәклиндә јазылар, бурада

$$\vec{j}_e = ec\Psi^+\vec{\alpha}\Psi \tag{66.5}$$

електрик чәрәјаны сыхлығыдыр. (66.2) кәсилмәзлик тәнлији (66.4) мә'нада баша дүшүлсә, ρ_e вә $\vec{j}_e$-дә "e" индексини јазмамаг да олар.

(66.1) вә (64.17)-дән матрисаларын hасили гајдасына әсасән

$$\rho = \frac{\rho_e}{e} = \Psi^+\Psi = \left(\Psi_1^*\Psi_2^*\Psi_3^*\Psi_4^*\right)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\\ \Psi_3\\ \Psi_4\end{pmatrix} =$$

$$= \Psi_1^+\Psi_1 + \Psi_2^+\Psi_2 + \Psi_3^+\Psi_3 + \Psi_4^+\Psi_4$$

бир елементдән ибарәт матриса, јә'ни ади функсијадыр, беләчә дә j_i-нин ифадәсини јазмаг олар, мәсәлән

$$j_1 = \frac{j_{1e}}{ec} = \Psi^+\alpha_1\Psi = \left(\Psi_1^*\Psi_2^*\Psi_3^*\Psi_4^*\right)\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\\ \Psi_3\\ \Psi_4\end{pmatrix} =$$

$$= \Psi_1^*\Psi_4 + \Psi_2^*\Psi_3 + \Psi_3^*\Psi_2 + \Psi_4^*\Psi_1$$

Кәсилмәзлик тәнлији коваријант шәкилдә даhа ајдын мә'на кәсб едир. (65.3) вә (65.7)-дән

$$\rho = e\Psi^+\Psi = e\Psi^+\gamma_4\gamma_4\Psi = e\overline{\Psi}\gamma_4\Psi$$

$$j_i = ec\Psi^+\alpha_i\Psi = ec\grave{\imath}\Psi^+\gamma_4\gamma_i\Psi = \grave{\imath}ec\overline{\Psi}\gamma_i\Psi$$

Бунлары (66.4)-дә јазыб, hәр ики hәдди ic-јә бөлсәк,

$$\frac{\partial}{\partial(\grave{\imath}ct)}\overline{\Psi}\gamma_4\Psi + \frac{\partial}{\partial x_i}\overline{\Psi}\gamma_i\Psi = 0$$

алынар.

$$j_4 = e\overline{\Psi}\gamma_4\Psi,\quad j_i = e\overline{\Psi}\gamma_i\Psi \tag{66.6}$$

кими $j_\mu(j_i, j_4)$ дөрдөлчүлү кәмијјәт дахил едәндә кәсилмәзлик тәнлији коваријант шәкилдә

$$\frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu} = 0 \tag{66.7}$$

олур. (66.7) тәнлијинин Лоренс чеврилмәләринә көрә инвариант галмасы үчүн $j_\mu = e\overline{\Psi}\gamma_\mu\Psi$ кәмијјәти дөрдөлчүлү полјар вектор олмалыдыр. Әксәр hалларда кәмијјәти $\overline{\Psi}\widetilde{L}\Psi$ шәклиндә јазмадан, садәчә дејирләр ки, $\alpha_\mu(-\grave{\imath}\alpha_i, I)$ вә ја $\gamma_\mu(\gamma_i, \gamma_4)$ кәмијјәтләри (матрисалары) дөрдөлчүлү вектор тәшкил едир.

§ 67. ДИРАК НӘЗӘРИЈЈӘСИНДӘ СПИН ПРОБЛЕМИ

Атомар системләрин спектриндә мүшаhидә олунан инчә гурулушу изаh етмәк үчүн атомда електронун орбитал hәрәкәт мигдарындан башга даhа бир моментә–мәхсуси моментә (јә'ни спинә) малик олдуғу фәрзијјәси ирәли сүрүлдү. Бир оптик електронлу атомар системләрин спектриндә спектрал хәттин ики јахын хәтдән ибарәт олдуғуну изаh етмәк үчүн фәрз олунду ки, енержинин, hәрәкәт мигдары моментинин вә онун пројексијалардан биринин мүәјјән гијмәтиндә мәхсуси момент (спин) верилмиш истигамәтдә јалныз ики пројексијаја маликдир.

Орбитал моментин, мәсәлән, z оху үзрә пројексијасынын $L_z = m\hbar$ (m=0,±1, ±2,..., ±l) бәрабәр олмасына охшар олараг спинин z оху үзрә пројексијасынын да

$$S_z = m_s\hbar$$

олдуғуну гәбул етмәк олар. Лакин, бу hалда m_s јалныз $m_s = \pm\frac{1}{2}$ кими ики гијмәт алмалыдыр.Бу бахымдан Паули квант механикасына мәхсуси гијмәтләр спектри ики гијмәтдән ибарәт олан операторлар вә ја матрисалар дахил етди. О, спин операторуну

$$\vec{S}=\frac{h}{2}\vec{\sigma}' \qquad (67.1)$$

кими сечмәји тәклиф етди, бурада $\vec{\sigma}'(\sigma'_x,\sigma'_y,\sigma'_z)$ ифадәләри (64.7) илә верилмиш Паули матрисаларыдыр.

Дирак нәзәријјәсиндә спин оператору үчүн (67.1) ифадәси сахланыр, Паули матрисалары әвәзиндә исә ифадәләри (64.11) илә верилмиш Дирак матрисалары көтүрүлүр.

Лакин, Дирак нәзәријјәсиндә нә орбитал һәрәкәт мигдары моменти оператору $\hat{\vec{L}}=\left[\vec{r}\hat{\vec{p}}\right]$ вә нә дә спин оператору $\hat{\vec{S}}$ (64.16) илә верилмиш $\hat{H}^D$ Дирак Һамилтон оператору илә коммутасија етмир, јә'ни системин енержиси илә онлар ејни заманда мүәјјән гијмәтә малик олмур. Буну исбат етмәк үчүн $\hat{L}_z$ вә $\hat{S}_z$ операторларынын $\hat{H}^D$ илә коммутасијасыны јохламаг кифајәтдир:

$$(\hat{L}_z\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{L}_z)\Psi=\left\{\hat{L}_z(c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}+\rho_3 m_o c^2)-(c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}+\rho_3 m_o c^2)\hat{L}_z\right\}\Psi$$

$\hat{L}_z$ илә $\hat{p}_z$-ин коммутасија етдијини (бах (13.13) вә $\rho_3 m_o c^2$ координатлардан асылы олмадығыны нәзәрә алсаг,

$$(\hat{L}_z\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{L}_z)\Psi=c\alpha_1(\hat{L}_z\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{L}_z)+c\alpha_2(\hat{L}_z\hat{p}_y-\hat{p}_y\hat{L}_z)\Psi,$$

(13.13) мүнасибәтләриндән

$$\hat{L}_z\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{L}_z=i\hbar c(\alpha_1\hat{p}_y-\alpha_2\hat{p}_x)\neq 0 \qquad (67.2)$$

алыныр. Ејнилә бунун кими

$$(\hat{S}_z\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{S}_z)\Psi=\frac{\hbar}{2}\left\{\sigma_z(c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}+\rho_3 m_o c^2)-(c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}+\rho_3 m_o c^2)\sigma_z\right\}\Psi$$

σ_i илә ρ_i вә σ_z илә $\alpha_z=\rho_i\sigma_z$ матрисалары коммутасија етдијиндән

$$(\hat{S}_z\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{S}_z)\Psi=\frac{\hbar}{2}c\rho_1\left\{(\sigma_z\sigma_x-\sigma_x\sigma_z)\hat{p}_x+(\sigma_z\sigma_y-\sigma_y\sigma_z)\hat{p}_y\right\}\Psi,$$

(64.14) мүнасибәтләриндән $\sigma_z\sigma_x=-\sigma_x\sigma_z=i\sigma_y$ вә $\sigma_z\sigma_y=-\sigma_y\sigma_z=$ $=-i\sigma_x$ олдуғундан

$$\hat{S}_z\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{S}_z=i\hbar c(\alpha_2\hat{p}_x-\alpha_1\hat{p}_y) \qquad (67.3)$$

алыныр.

(67.2) вә (67.3) мүнасибәтләриндән көрүнүр ки, системин орбитал һәрәкәт мигдары моменти илә спин моментинин чәми олан

$$\hat{\vec{J}}=\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}} \qquad (67.4)$$

там момент операторунун $\hat{J}_z$ (еләчә дә $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$) компоненти $\hat{H}^D$ оператору илә коммутасија едир:

$$(\hat{J}_z\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{J}_z)\Psi=0$$

јә'ни

$$(\hat{\vec{J}}\hat{H}^D-\hat{H}^D\hat{\vec{J}})\Psi=0 \qquad (67.5)$$

олур. Беләликлә $\hat{\vec{J}}$ вә $\hat{H}^D$ операторлары үмуми мәхсуси функсијалара маликдир вә системин енержиси илә онун там моменти ејни заманда мүәјјән гијмәт ала билир.

Јухарыда дедикләримиздән чыхыр ки, Дирак нәзәријјәсиндә спин, Паули тәнлијиндә олдуғу кими, она харичдән әлавә олунмур. Дирак тәнлијинин өзүндә о, өз әксини тапмыш олур.

§ 68. ДИРАК МАТРИСАЛАРЫНЫН ТЕНЗОР ӨЛЧҮСҮ ВӘ ФИЗИКИ МАҺИЈЈӘТИ

Јухарыда гејд етдик ки, $\alpha_\mu(-i\alpha_i, I)$ јахуд $\gamma_\mu(\gamma_i,\gamma_4)$ матрисалар чохлуғу дөрдөлчүлү вектор тәшкил едир. Дирак нәзәријјәсиндә тәсадүф олунан дикәр матрисаларын да тензор өлчүсүнү тә'јин едәк. Бунун үчүн $E=mc^2$ ифадәсини

$$E=\frac{m_o c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}=\frac{m_o c^2(1-\beta^2)}{\sqrt{1-\beta^2}}+\frac{m_o c^2\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

шәкилдә јазаг. $\beta=\dfrac{\upsilon}{c}$ олдуғуну нәзәрә алсаг

$$E=m\upsilon^2+m_o c^2\sqrt{1-\beta^2} \qquad (68.1)$$

олар. Мә'лумдур ки, квант механикасында физики кәмијјәтин орта гијмәти онун классик гијмәти үзәринә дүшүр (Еренфест теоремләри). Дирак нәзәријјәсиндә енержинин орта гијмәти (64.16)-дан

$$\bar{E}=\int\Psi^+\hat{H}\Psi(d\vec{r})=c\int\Psi^+\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}\Psi(d\vec{r})+m_o c^2\int\Psi^+\rho_3\Psi(d\vec{r})$$

вә ја

$$\bar{E}=c\overline{\vec{\alpha}\hat{\vec{p}}}+m_o c^2\bar{\rho}_3\,. \qquad (68.2)$$

(68.1) илә (68.2) -нин мүгајисәсиндән

$$\bar{\vec{\upsilon}} = c\bar{\vec{\alpha}} = c\int \Psi^{+}\vec{\alpha}\Psi(d\vec{r})\,, \text{ jахуд } \bar{\vec{\alpha}} = \frac{\bar{\vec{\upsilon}}}{c} \qquad (68.3)$$

$$\bar{\rho}_3 = \int \Psi^{+}\rho_3\Psi(d\vec{r}) = \sqrt{1-\beta^2}$$

алынар. Демәли, $\vec{\alpha}$ -матрисасы $\dfrac{\vec{\upsilon}}{c}$ физики кәмиjjәтинә уjғун үчөлчүлү вектор оператор, ρ_3 исә бир компонентли $\sqrt{1-\beta^2}$ скалjар кәмиjjәтә уjғун скалjар оператордур. Бурадан чыхыр ки, зәррәчиjин сүкунәт күтләсини дә оператор һесаб етмәк олар. Доғрудан да

$$m_o = m\sqrt{1-\beta^2} = m\rho_3 = \frac{m}{\rho_3}. \quad (\rho_3^2 = 1) \qquad (68.4)$$

Дикәр матрисаларын тензор өлчүсүнү тапмаг мәгсәдилә Дирак тәнлиjини харичи електромагнит саһәсиндәки һәрәкәт үчүн jазаг. Бунун үчүн, Шрединкер нәзәриjjәсиндә олдуғу кими, (64.3) тәнлиjиндә $\breve{E}$ -ни $\breve{E}-e\varphi$, $\breve{\vec{p}}$ -ни исә $\breve{\vec{p}}-\frac{e}{c}\vec{A}$ илә әвәз етмәк лазымдыр, бурада $\varphi(\vec{r},t), \vec{A}(\vec{r},t)$ -електромагнит саһәсинин скалjар вә векториал потенсиалларыдыр. Бу һалда (64.3) тәнлиjи

$$\left\{\breve{E} - e\varphi - c\alpha(\breve{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}) - \rho_3 m_o c^2\right\}\Psi = 0 \qquad (68.5)$$

олар. (68.5)-ә солдан $\breve{E} - e\varphi + c\alpha\breve{\vec{P}} + \rho_3 m_o c^2$ оператору илә тә'сир етсәк (бурада $\breve{\vec{P}} = \breve{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}$ -дыр):

$$(E - e\varphi + c\alpha_i\breve{P}_i + \rho_3 m_o c^2)(E - e\varphi - c\alpha_k P_k - \rho_3 m_o c^2)\Psi = 0\,.$$

Мә'тәризәләри бир-биринә вурандан сонра охшар (еjни) һәдләри ихтисар едиб, Дирак матрисаларын хассәләринә көрә чәми сыфра бәрабәр олан һәдләри атсаг,

$$\{\ (\breve{E} - e\varphi)^2 + c\alpha_i\breve{P}_i(\breve{E} - e\varphi) - (\breve{E} - e\varphi)c\alpha_i\breve{P}_i - c^2\sum_{i,k}\alpha_i\alpha_k\breve{P}_i\breve{P}_k -$$

$$-\rho_3^2 m_o^2 c^4\ \}\Psi = 0 \qquad (68.6)$$

алынар. Асанлыгла көстәрмәк олар ки,

а) $c\sum_i\{\ \alpha_i\breve{P}_i(\breve{E} - e\varphi) - (\breve{E} - e\varphi)\alpha_i\breve{P}_i\ \}\Psi = iec\hbar\alpha_i(-\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_i} - \dfrac{1}{c}\dfrac{\partial A_i}{\partial t}) =$

$$= -iec\hbar\vec{\alpha}(-\text{grad}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t})\Psi = -iec\hbar\vec{\alpha}\vec{\mathcal{E}}$$

б) $(E - e\varphi)^2\Psi = (\breve{E} - e\varphi)(\breve{E} - e\varphi)\Psi = (\breve{E} - e\varphi)^2\Psi - i\hbar e\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}\Psi$

в) $\sum_{i,k}\alpha_i\alpha_k\breve{P}_i\breve{P}_k$ икигат һасилә кәлдикдә исә гејд едәк ки, $\breve{P}_i$ вә $\breve{P}_k$ операторлары коммутасија етмәдијиндән, ону

$$\sum_{i,k}\alpha_i\alpha_k\breve{P}_i\breve{P}_k\Psi = \left\{\sum_i\alpha_i^2\breve{P}_i^2 + \sum_{i\neq k}(\alpha_i\alpha_k\breve{P}_i\breve{P}_k + \alpha_k\alpha_i\breve{P}_k\breve{P}_i)\right\}\Psi$$

кими jазмаг лазымдыр. (64.6)-дан $\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = 1$, $\alpha_i\alpha_k = -\alpha_k\alpha_i (i\neq k)$ олдуғундан

$$\sum_{i,k}\alpha_i\alpha_k\breve{P}_i\breve{P}_k\Psi = \{\ \sum_i\breve{P}_i^2 + \sum_{i\neq k}\alpha_i\alpha_k(\breve{P}_i\breve{P}_k - \breve{P}_k\breve{P}_i)\ \}\Psi =$$

$$= \left\{\sum_i\breve{P}_i^2 + \frac{ie\hbar}{c}\sum_{i\neq k}\alpha_i\alpha_k F_{ik}\right\}\Psi$$

алынар.Бурада

$$F_{ik} = \frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k}$$

електромагнит саһәсинин антисимметрик тензорудур. $\alpha_i, \rho_i, \sigma_i$ матрисаларын хассәләриндән

$$\alpha_i\alpha_k = \rho_1\sigma_i\rho_1\sigma_k = \sigma_i\sigma_k = i\sum_l\tilde{\varepsilon}_{ikl}\sigma_l$$

вә

$$F_{12} = H_z,\ F_{23} = H_x,\ F_{31} = H_y$$

олдуғуну нәзәрә алсаг ($\vec{H}$ – магнит саһәсинин интенсивлик вектору)

$$c^2\sum_{i,k}\alpha_i\alpha_k\breve{P}_i\breve{P}_k\Psi = \sum_i c^2\breve{P}_i^2\Psi - ec\hbar\vec{\sigma}\vec{H}\Psi$$

олар.

а), б), в)- дә алынан ифадәләри (68.6)-да јазсаг, тәнлик

$$\{\ (\breve{E}-e\varphi)^2-c^2\bar{\bar{P}}^2-m_o^2c^4-\grave{\imath}e\hbar c\vec{\alpha}\vec{\mathcal{E}}+ec\hbar\vec{\sigma}\vec{H}\ \}\Psi=0 \qquad (68.7)$$

шәклә дүшәр. Сонунҹу ики һәддин физики маһијјәтини ајдынлашдырмаг үчүн алчаг енержи областына кечәк. Електрик ($\vec{\mathcal{E}}$) вә магнит ($\vec{H}$) саһәләрини бирҹинс саһә фәрз етсәк, системин там енержиси

$$\breve{E}\to E=\frac{m_oc^2}{\sqrt{1-\beta^2}}=m_oc^2(1-\beta^2)^{-1}=m_o^2c^2+E(p)$$

кими јазыла биләр. *E(p)* там енержинин јалныз импулсла (сүр'әтлә) мүтәнасиб олан һиссәсидир. Бу јахынлашмада

$$(E-e\varphi)^2-m_o^2c^4=(E(p)-e\varphi+m_oc^2)(E(p)-e\varphi-m_oc^2)\approx 2m_oc^2(E(p)-e\varphi)$$

олар. Буну (68.7) -дә јеринә јазыб, бүтүн һәдләри $2m_oc^2$-на бөләк:

$$\{\ E(p)-e\varphi-\frac{1}{2m_o}\bar{P}^2-\grave{\imath}\frac{e\hbar}{2m_oc}\vec{\alpha}\vec{\mathcal{E}}+\frac{e\hbar}{2m_oc}\vec{\sigma}\vec{H}\ \}\Psi=0 \qquad (68.8)$$

(68.4) ифадәсини вә $\rho_3\vec{\alpha}=\rho_3\rho_1\vec{\sigma}=\grave{\imath}\rho_2\vec{\sigma}$ бәрабәрлијини нәзәрә алсаг, (68.8) тәнлији

$$\{\ E(p)-e\varphi-\frac{1}{2m}\bar{P}^2+\frac{e\hbar}{2mc}\rho_2\vec{\sigma}\vec{\mathcal{E}}+\frac{e\hbar}{2mc}\rho_3\vec{\sigma}\vec{H}\ \}\Psi=0. \qquad (68.9)$$

Алынан тәнлији ујғун Шрединкер тәнлији илә мүгајисә етдикдә көрүрүк ки, бурада ахырынҹы ики һәдд әлавә алынмыш олур. Онлар, јәгин ки, квант механики системин харичи електрик вә магнит саһәләри илә гаршылыглы тә'сирин нәтиҹәси олараг ортаја чыхыр. Електродинамика курсундан мә'лумдур ки, $\vec{d}$ електрик вә $\vec{\mu}$ магнит моментләринә малик олан системләр електромагнит саһәси илә гаршылыглы тә'сирдә олур вә бу тә'сирин енержиси ујғун олараг $-\vec{d}\vec{\mathcal{E}}$ вә $-\vec{\mu}\vec{H}$ бәрабәрдир. Беләликлә (68.9) тәнлијиндән бир нәтиҹә олараг чыхыр ки, һәр бир електрик јүкүнә малик олан квант механики систем

$$\vec{d}=\frac{e\hbar}{2mc}\rho_2\vec{\sigma} \quad вә \quad \vec{\mu}=\frac{e\hbar}{2mc}\rho_3\vec{\sigma} \qquad (68.10)$$

ифадәләри илә тә'јин олунан електрик вә магнит моментләринә малик олмалыдыр.

Дикәр тәрәфдән билирик ки *($\mathcal{E}_x,\mathcal{E}_y,\mathcal{E}_z$)* вә *($H_x,H_y,H_z$)* чохлуғу икинчи ранг антисимметрик тензор *(F_{ik})* тәшкил едир. Енержи скалјар кәмијјәт олдуғундан

$$\rho_2\sigma_i \quad вә \quad \rho_3\sigma_i \qquad (68.11)$$

алты кәмијјәт чохлуғу да (68.3) мә'нада икинчи ранг антисимметрик тензор тәшкил етмәлидир. Бу антисимметрик тензор

$$\sigma_{\mu\nu}=\frac{1}{2\grave{\imath}}(\gamma_\mu\gamma_\nu-\gamma_\nu\gamma_\mu) \qquad (68.12)$$

ифадәси илә тә'јин олунур. γ_μ - матрисанын дикәр матрисаларла әлагәсиндән вә ахырынҹыларын хассәләриндән истифадә едәрәк көстәрмәк олар ки, $\sigma_{\mu\nu}$-нүн алты асылы олмајан компонентләри (68.10)-дакы кәмијјәтләрин үзәринә дүшүр.

Билдијимиз кими $\vec{\mathcal{E}}$ полјар, $\vec{H}=\left[\vec{\nabla}\vec{A}\right]$ исә аксиал (псевдо) вектордур. Күзкү әкси чеврилмәләрдә $\vec{\mathcal{E}}$-нин компонентләри ишарәсини дәјишир, $\vec{H}$-ын компонентләри исә ишарәсини дәјишмир. Дикәр тәрәфдән $\vec{\sigma}$ - вектору координатлардан асылы олмадығына көрә күзкү әкси чеврилмәләриндә онун компонентләри ишарәсини дәјишмир, јә'ни о, псевдовектордур. Демәли, (68.9) тәнлијиндә $\rho_2\vec{\sigma}\vec{\mathcal{E}}$ вә $\rho_3\vec{\sigma}\vec{H}$ һасилләринин скалјар олмасы үчүн ρ_2 псевдоскалјар, ρ_3 исә скалјар (јухарыда көстәрилдији кими) кәмијјәт олмалыдыр.

$\vec{\sigma}$ псевдовектор олдуғундан дөрдөлчүлү $S_\mu(\grave{\imath}\rho_1,\sigma_i)$ дөрдөлчүлү спин оператору да псевдовектордур. Демәли, Дирак нәзәријјәсиндә (68.3) -дә көстәрилән мә'нада он алты мүхтәлиф кәмијјәт вар:

		Компонентләрин сајы
$\bar{\Psi}\Psi=\Psi^{*}\rho_3\Psi$	- скалјар	1
$\bar{\Psi}\gamma_5\Psi=\grave{\imath}\Psi^{*}\rho_2\Psi$	- псевдоскалјар	1
$\bar{\Psi}\gamma_\mu\Psi'=\Psi^{*}(-\grave{\imath}\alpha_i,I)\Psi$	- вектор	4
$\bar{\Psi}\gamma_5\gamma_\mu\Psi=\Psi^{*}(\sigma_i,\grave{\imath}\rho_1)\Psi$	- псевдовектор	4
$\bar{\Psi}\sigma_{\mu\nu}\Psi=\Psi^{*}(\rho_2\sigma_i,\rho_3\sigma_i)\Psi$	- икинчи ранг антисимметрик тензор	6
	Ҹәми	16

Бурада $\gamma_5=\gamma_1\ \gamma_2\ \gamma_3\ \gamma_4$ кими тә'јин олунур.

Беләликлә, Дирак нәзәријјәсинә мүхтәлиф тензор өлчүлү јалныз он алты кәмијјәт дахилдир. σ_i вә ρ_i матрисаларын истәнилән сајда бирбиринә һасили бу он алты кәмијјәтдән биринә кәтирир. Демәли бу кәмијјәтләр чохлуғу груп тәшкил едир.

§ 69. ЗӘРРӘЧИЈИН СӘРБӘСТ ҺӘРӘКӘТИ ҮЧҮН ДИРАК ТӘНЛИЈИНИН ҺӘЛЛИ

Дирак һамилтон оператору (64.16) илә $\hat{\vec p} = -i\hbar\vec\nabla$ импулс оператору коммутасија етдијиндән (64.3) тәнлијинин үмуми һәллини L^3 һәчмли фәзада јајылан вә һәр фәза координатына көрә периоду L олан мүстәви далғаларын, јахуд импулс операторунун мәхсуси функсијаларынын суперпозисијасы шәклиндә ахтармаг олар:

$$\Psi(\vec r,t) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec p} u(\vec p)e^{-\frac{i}{\hbar}Et+\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r} = \sum_{\vec p}\Psi_{\vec p}(\vec r,t), \qquad (69.1)$$

бурада $\vec p\vec r = p_i r_i$, $p_i = \frac{2\pi}{L}n_i$ –импулсун компонентләри, $\Psi_p(\vec r,t)$ импулс операторунун мәхсуси функсијасыдыр, $n_i(n_1,n_2,n_3)$ –там мүсбәт әдәдләрдир.

(69.1)-и (64.3)-дә јеринә јазанда $u(\vec p)$ амплитуду үчүн

$$(E - c\vec\alpha\vec p - \rho_3 m_o c^2)u(\vec p) \qquad (69.2)$$

тәнлији алыныр. (69.2)-нин һәллини Ψ-нин (64.17) ифадәсинә ујғун олараг

$$u(\vec p) = \begin{pmatrix}\varphi_1(\vec p)\\ \varphi_2(\vec p)\\ \chi_1(\vec p)\\ \chi_2(\vec p)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\varphi(\vec p)\\ \chi(\vec p)\end{pmatrix} \qquad (69.3)$$

кими ахтармаг олар, бурада $\varphi(\vec p)$ вә $\chi(\vec p)$

$$\varphi(\vec p) = \begin{pmatrix}\varphi_1(\vec p)\\ \varphi_2(\vec p)\end{pmatrix}, \quad \chi(\vec p) = \begin{pmatrix}\chi_1(\vec p)\\ \chi_2(\vec p)\end{pmatrix} \qquad (69.4)$$

спинор функсијалардыр.

$u(\vec p)$-нин (69.3) шәклинә ујғун олараг, α_i вә ρ_3-үн Паули матрисалары илә верилмиш (64.10) ифадәләриндән истифадә едилдикдә, (69.2) тәнлији ики хәтти тәнлијә парчаланыр:

$$(E - m_oc^2)\varphi(\vec p) - c(\vec\sigma\vec p)\chi(\vec p) = 0,$$

$$-c(\vec\sigma\vec p)\varphi(\vec p) + (E + m_oc^2)\chi(\vec p) = 0 \qquad (69.5)$$

Бу системин гејри-тривиал һәллә малик олмасы үчүн $\varphi(\vec p)$ вә $\chi(\vec p)$ әмсалларындан дүзәлмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр:

$$\begin{vmatrix} E - m_oc^2 & -c(\vec\sigma'\vec p)\\ -c(\vec\sigma'\vec p) & E + m_oc^2\end{vmatrix} = 0$$

јахуд

$$E^2 - m_o^2c^4 - (\vec\sigma\vec p)(\vec\sigma\vec p) = 0 \qquad (69.6)$$

σ_i' –Паули матрисаларынын (64.13) хассәләриндән истифадә едәрәк, көстәрмәк олар ки, ихтијары $\vec a$ вә $\vec b$ векторлары үчүн

$$(\vec\sigma'\vec a)(\vec\sigma'\vec b) = (\vec a\vec b) + i\vec\sigma'[\vec a\vec b] \qquad (69.7)$$

бәрабәрлији өдәнилир*. Бурада $\vec a = \vec b = \vec p$ көтүрсәк,

$$(\vec\sigma\vec p)(\vec\sigma\vec p) = p^2$$

олар. Беләликлә (69.6) бәрабәрлији

$$E^2 - c^2p^2 - m_o^2c^4 = 0 \text{ вә ја } E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m_o^2c^4} = \pm\varepsilon = \lambda\varepsilon \qquad (69.8)$$

олур, бурада $\varepsilon = \sqrt{c^2p^2 + m_o^2c^4}$, $\lambda = \pm 1$-там енержинин ишарәсини көстәрән вуругдур.

Беләликлә, (64.3) Дирак тәнлији там енержинин һәм мүсбәт (E>0), һәм дә мәнфи (E<0) ишарәсинә ујғун һәлләрә маликдир. Башга сөзлә, (64.3)-үн (69.1) үмуми һәлли ики мүхтәлиф груп һәлләрин суперпозисијасы олмалыдыр:

$$\Psi(\vec r,t) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec p,\lambda} u(\lambda,\vec p)e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda\varepsilon t+\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r} = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec p,\lambda=1} u(\vec p)e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t+\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r} +$$

$$+\frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec p,\lambda=-1} u(-\vec p)e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon t+\frac{i}{\hbar}\vec p\vec r}.$$

Бурада чәм $\vec p$ вә јахуд $(-\infty,\infty)$ интервалында p_x, p_y, p_z үзрә кетдијиндән, икинчи чәмдә $\vec p$-ни $-\vec p$ илә әвәз етсәк, чәм дәјишмәз:

$$\Psi(\vec r,t) = \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec p} u(\vec p)e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t-\vec p\vec r)} + \frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec p} u(-\vec p)e^{\frac{i}{\hbar}(\varepsilon t-\vec p\vec r)}$$

---

* Бу бәрабәрлик Диракын σ_i вә α_i матрисалары үчүн дә өдәнилир:

$$(\vec\alpha\vec a)(\vec\alpha\vec b) = (\vec\sigma\vec a)(\vec\sigma\vec b) = (\vec a\vec b) + i\vec\sigma[\vec a\vec b]$$

Бүтүн бу дедикләримиздән чыхыр ки, (64.3)-үн $\lambda=\pm1$ гијмәтләринә ујғун үмуми һәлли

$$\Psi(\vec{r},t)=\frac{1}{L^{3/2}}\sum_{\vec{p},\lambda}u(\lambda,\vec{p})e^{-\frac{i}{\hbar}(\lambda\varepsilon t-\vec{p}\vec{r})}, \qquad (69.9)$$

хүсуси һәлли исә

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r},t)=\frac{1}{L^{3/2}}u(\lambda,\vec{p})e^{-\frac{i}{\hbar}(\lambda\varepsilon t-\vec{p}\vec{r})} \qquad (69.10)$$

олар. Буна охшар олараг, Ψ^{+} үчүн јазылмыш (68.1) тәнлијинин хүсуси һәлли исә

$$\Psi^{+}_{\vec{p}}(\vec{r},t)=\frac{1}{L^{3/2}}u^{+}(\lambda,\vec{p})e^{\frac{i}{\hbar}(\lambda\varepsilon t-\vec{p}\vec{r})}. \qquad (69.11)$$

Бурада $u(\lambda,\vec{p})$ вә $u^{+}(\lambda,\vec{p})$ амплитудлары, (64.17)-јә ујғун олараг,

$$u(\lambda,p)=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix} \text{ вә } u^{+}(\lambda,\vec{p})=(u_1^{*}u_2^{*}u_3^{*}u_4^{*}) \qquad (69.12)$$

кими дөрдөлчүлү матрисалардыр.

(69.9) һәлли (64.3) тәнлијиндә јазыб E-ни онун (69.8) илә верилмиш ифадәси илә (69.2)-дә әвәз етсәк, импулс тәсвириндә јазылмыш вә енержинин ишарәсини фиксә етмәјә имкан верән Дирак тәнлији

$$(\lambda\varepsilon-c\vec{\alpha}\vec{p}-\rho_3 m_o c^2)u(\lambda,\vec{p})=0 \qquad (69.13)$$

олар.

Билдијимиз кими (бах §61) електронун (Ферми зәррәчијин) спинә малик олмасы факты Паули тәнлијинә харичдән дахил едилмишди. Дирак нәзәријјәсиндә исә о, тәнлијин өзүндә өз әксини тапыр. Она көрә дә (69.13) тәнлијинин спинин проjексијасындан асылы һәлләрини тапмаг марағлы олардı.

Бундан әввәлки параграфда көстәрдик ки, (64.16) ифадәси илә верилмиш $\breve{H}^{D}$ Һамилтон оператору һәрәкәт мигдары моменти оператору $\breve{\vec{L}}=\left[\vec{r}\breve{\vec{p}}\right]$ вә спин оператору $\breve{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ илә ајрылыгда коммутасија етмир. Спинин S_z проjексијасы системин там енержиси илә ејни заманда мүәјјән гијмәт ала билмир. Лакин, башга елә бир истигамәт сечмәк олар ки, спинин һәмин истигамәтдәки проjексија $\breve{H}^{D}$ оператору илә коммутасија

етсин. Көстәрмәк олар ки, белә истигамәт зәррәчијин һәрәкәт истигамәти, јә'ни $\vec{p}$ импулс истигамәтидир.

Доғрудан да, $\vec{J}=\breve{\vec{L}}+\breve{\vec{S}}$ – там моментин $\vec{p}$ үзрә проjексијасыны көтүрәк:

$$(\vec{J}\vec{p})=(\vec{L}\vec{p})+(\vec{S}\vec{p})$$

Бу чәмдә орбитал һәрәкәт мигдары моментинин $\vec{p}$ үзрә проjексијасы һәмишә сыфра бәрабәр олдуғундан

$$(\vec{J}\vec{p}^{o})=(\vec{S}\vec{p}^{o})=S_p=\frac{\vec{S}\vec{p}}{|\vec{p}|} \qquad (69.14)$$

алынар, бурада $\vec{p}^{o}=\frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$ –орт вектордур. $\breve{S}_p$ операторунун $\breve{H}^{D}$ илә коммутасија етдијини јохламаг асандыр. Бурадан, $\breve{H}^{D}$-нин (69.11) мәхсуси функсијасы $\frac{\vec{S}\vec{p}}{|\vec{p}|}$ – операторунун да мәхсуси функсијасы олур.

$$\left(\frac{(\vec{S}\vec{p})}{|\vec{p}|}-s\right)\Psi_p(\vec{r},t)=0$$

вә ја

$$((\vec{\sigma}\vec{p})-sp)u(s,\lambda,\vec{p})=0 \qquad (69.15)$$

$\vec{\alpha}=\rho_1\vec{\sigma}$ олдуғундан (69.13) тәнлијиндә (69.15)-и нәзәрә алсаг, $u(s,\lambda,\vec{p})$ амплитуду ашағыдакы хәтти тәнликләр системини өдәјәр.

$$(ks-\vec{\sigma}\vec{k})u(\lambda,s,\vec{k})=0\,, \qquad (69.16)$$

$$(\lambda K-s\rho_1 k-\rho_3 k_o)u(\lambda,s,\vec{k})=0\,, \qquad (69.17)$$

бурада $\varepsilon=\hbar cK$, $K=\sqrt{k^2+k_o^2}$, $\vec{k}=\frac{\vec{p}}{\hbar}$, $k_o=\frac{m_o c}{\hbar}$ әвәзләри гәбул едилмишдир. Ејни гајда илә ермит гошма $u^{+}(s,\lambda,\vec{k})$ амплитудунун өдәдији тәнликләр системи

$$u^{+}(ks-\vec{\sigma}\vec{k})=0\,, \qquad (69.18)$$

$$u^{+}(\lambda K-s\rho_1 k-\rho_3 k_o)=0\,, \qquad (69.19)$$

олар.

σ_i вә ρ_i матрисаларынын (64.11) илә верилмиш ифадәләри вә (69.12)-и нәзәрә алсаг, (69.16) вә (69.17) тәнликләрини ашағыдакы ики систем шәклиндә јазмаг олар:

$$
\begin{aligned}
&(\lambda K - k_o)u_1 - sku_3 = 0 \\
&(\lambda K - k_o)u_2 - sku_4 = 0 \\
&(\lambda K - k_o)u_3 - sku_1 = 0 \\
&(\lambda K - k_o)u_4 - sku_2 = 0
\end{aligned} \qquad (69.20)
$$

вә

$$
\begin{aligned}
&(sk - k_3)u_1 - (k_1 - ik_2)u_2 = 0 \\
&(sk + k_3)u_2 - (k_1 + ik_2)u_1 = 0 \\
&(sk - k_3)u_3 - (k_1 - ik_2)u_4 = 0 \\
&(sk + k_3)u_4 - (k_1 + ik_2)u_3 = 0
\end{aligned} \qquad (69.21)
$$

(69.21) тәнликләр системиндән асанлыгла s мәхсуси гијмәтләр спектрини тапмаг олар. Доғрудан да, (69.21)-дә биринчи вә икинчи (вә ја үчүнчү вә дөрдүнчү) тәнликләрин нисбәтиндән

$$\frac{sk - k_3}{k_1 + ik_2} = \frac{k_1 - ik_2}{sk + k_3} \quad \text{јахуд} \quad s^2k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2$$

алыныр, бурадан да $s^2=1$, $s=\pm1$ олур, јә'ни спин моментинин импулс бојунча пројексијасы јалныз ики гијмәт ала биләр: ја $+\dfrac{\hbar}{2}$ вә ја $-\dfrac{\hbar}{2}$.

Һесаблама системинин z оху зәррәчијин һәрәкәти истигамәтинә јөнәлдиләрсә, спинин $s_p = \dfrac{\vec{\sigma}\vec{p}}{|\vec{p}|} = \vec{\sigma}\vec{p}^o$ пројексијасы спинин узунуна пројексијасы вә ја зәррәчијин *спираллыгы* адланыр. Спираллыг дедикдә спинин, јә'ни полјарлашма вектору $\vec{S}$ -ин зәррәчијин $\vec{p}$ импулсуна нәзәрән фырланмасы баша дүшүлүр. Сағ һесаблама системиндә s_p сағ винт спираллығыны ($s_p=1$), сол һесаблама системиндә исә сол винт спираллығыны ($s_p=-1$) характеризә едир. Бу нәтичәни баша дүшмәк о гәдәр дә чәтин дејилдир. Доғрудан да, $(\vec{S}\vec{p}^o)$ скалјар һасилдә $\vec{p}^o$ полјар вектор, $\vec{\sigma}$ исә аксиал вектордур (јухары бах). Сағ һесаблама системиндән фәза инверсија чеврилмәләри ($x\to-x$, $y\to-y$, $z\to-z$) васитәсилә сол һесаблама системинә кечсәк, $\vec{p}^o$ векторунун координат охлары үзрә пројексијалары

ишарәсини дәјишир, $\vec{\sigma}$ векторунун компонентләри исә дәјишмәдән галыр, беләликлә бу кечиддә $\vec{S}\vec{p}^o$ һасили ишарәсини дәјишир.

Гејд едәк ки, зәррәчијин сүр'әти ишыг сүр'әтинә јахынлашдыгда ($\upsilon\sim c$) онун спин моменти импулс истигамәтинә паралел јөнәлмәјә чәһд едир вә о, јалныз узунуна пројексијаја малик олур. Спинин бу хассәси һәм фермионлара вә һәм дә бозонлара хасдыр. Мәсәлән, ишыг сүр'әти илә һәрәкәт едән фотонун спини $\hbar$ ваһидләриндә ваһидә бәрабәрдир. Лакин фотон, спининин импулсу бојунча $+1\hbar$, $0\hbar$, $-1\hbar$ үч пројексијаја ујғун үч һал әвәзиндә $+\hbar$ вә $-\hbar$ пројексијаларына ујғун ики һалда ола билир, јә'ни о, һәрәкәти истигамәтинә перпендикулјар пројексијасына ујғун һала малик дејилдир. Фотонун спин моменти һәмишә онун импулсуна паралелдир. Зәррәчијин υ сүр'әтинин c-дән хејли кичик гијмәтләриндә исә спин моменти енинә (импулса перпендикулјар) пројексијаја да малик ола биләр. $\dfrac{\vec{\sigma}\vec{p}}{|\vec{p}|} = (\vec{\sigma}\vec{p}^o)$ оператору белә һаллары нәзәрә алмаға имкан вермир. Бурадан спинин истәнилән пројексијасынын сахланмасыны тә'мин едән операторун дахил едилмәси зәруријјәти ортаја чыхыр. Бу һагда "Квант електродинамикасы" вә ја саһәнин квант нәзәријјәсинә һәср олунан курслардан әтрафлы мә'лумат алмаг олар.

(69.20) вә (69.21) системләри u_i функсијаларына көрә бирчинс тәнликләр системи олдуғундан, онлар васитәсилә бу функсијаларын үчүнүн һәр һансы биринә нисбәтләри тапыла биләр. Далға функсијасынын $\int \Psi^+\Psi(d\vec{r}) = u^+u = u_1^*u_1 + u_2^*u_2 + u_3^*u_3 + u_4^*u_4 = 1$ нормаланма шәртини дә нәзәрә аланда $u(\lambda,s,k)$ үчүн

$$u(\lambda,s,k) = N\begin{vmatrix} -k\ (k + sk_3) \\ -sk\ (k_1 + ik_2) \\ \lambda(K + \lambda k_o)\ (k + sk_3) \\ \lambda s(K + \lambda k_o)\ (k_1 + ik_2) \end{vmatrix} \qquad (69.22)$$

алынар. Буна охшар олараг

$$u^+(\lambda,s,k) = N\ \big|-k(k + sk_3), -sk(k_1 - ik_2), \lambda(K + \lambda k_o)(k + sk_3), \lambda s(K + \lambda k_o)(k_1 - ik_2)\big|$$

олар, бурада

$$N = \frac{1}{2\sqrt{Kk(K + \lambda k_o)(k + sk_3)}} \qquad (69.23)$$

нормалајычы вуругдур.

Зәррәчик z оху истигамәтиндә һәрәкәт едирсә, енержинин ихтијари ишарәсиндә ($\lambda=\pm1$) а) спинин импулс бојунчакы пројексијасы $s=1$ илә сәчијјә олунан һалы тәсвир едән далға функсијасы

$$u(\lambda, s=1, \vec{k}) = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} \sqrt{1+\lambda\frac{k_o}{K}} \\ 0 \\ \lambda\sqrt{1-\lambda\frac{k_o}{K}} \\ 0 \end{vmatrix}, \qquad (69.24)$$

б) әкс истигамәтдәки пројексијаја ($s=-1$) ујғун һалын функсијасы исә

$$u(\lambda, s=-1, \vec{k}) = \frac{1}{2}\begin{vmatrix} 0 \\ \sqrt{1+\lambda\frac{k_o}{K}} \\ 0 \\ -\lambda\sqrt{1-\lambda\frac{k_o}{K}} \end{vmatrix} \qquad (69.25)$$

олар.

Беләликлә, енержинин мүәјјән λ ишарәсиндә Дирак тәнлији спинин пројексијасы илә фәргләнән ики һәллә малик олур. Онда импулсун вә енержинин мүәјјән гијмәти вә енержинин верилмиш ишарәси илә тә'јин олунан (K, $\lambda=1$) һалынын далға функсијасы (69.11)-дән

$$\Psi(\vec{r},t,\lambda=1)=\frac{1}{\sqrt{2L^3}}\left\{C(s=1)\begin{pmatrix} \sqrt{1+\frac{k_o}{K}} \\ 0 \\ \sqrt{1-\frac{k_o}{K}} \\ 0 \end{pmatrix} + C(s=-1)\begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1+\frac{k_o}{K}} \\ 0 \\ -\sqrt{1-\frac{k_o}{K}} \end{pmatrix}\right\} e^{-icKt+i\vec{k}\vec{r}} \qquad (69.26)$$

шәклиндә олар. (K, $\lambda=-1$) һалынын функсијасыны да ејни шәкилдә јазмаг олар.

§ 70. ДИРАК НӘЗӘРИЈЈӘСИНДӘ МӘНФИ ТАМ ЕНЕРЖИЛИ ҺАЛЛАР. ПОЗИТРОН (АНТИЗӘРРӘЧИК)

Јухарыда көрдүк ки, Дирак тәнлијинин мүсбәт енержили ($\lambda=1$) һәлләрлә јанашы мәнфи енержили ($\lambda=-1$) һәлләри дә мөвчуддур. Отузунчу илләрин әввәлләриндә мәнфи енержили һәлләрин варлығы нәзәријјәнин чәтинликләриндән ән әсасы һесаб олунурду. Бир сыра алимләр Дирак тәнлији үзәриндә мүхтәлиф чеврилмәләр апармагла бу һәлләри нәзәријјәдән кәнар етмәјә чалышмышларса да, буна мүвәффәг ола билмәмишләр. Сонра мә'лум олду ки, мәнфи енержили һаллар јалныз Дирак нәзәријјәсиндә јох, истәнилән релјативистик классик нәзәријјәдә дә ортаја чыхмалыдыр.

Доғрудан да, релјативистик механикада сәрбәст һәрәкәт едән зәррәчијин енержиси, Ејнштејнә көрә $E^2=c^2p^2+m_o^2c^4$ кими тә'јин олунур. Бурадан енержи үчүн $E=\pm\sqrt{c^2p^2+m_o^2c^4}$ кими ејниһүгуглу ики гијмәт алыныр. Бурадан көрүнүр ки, мүсбәт вә мәнфи енержи областлары арасында $E_{+}(\vec{p}=0)-E_{-}(p=0)=2m_oc^2$-а бәрабәр аралыг вардыр. Мәнфи енержи областы сонсузлуға ($E_{-}\to\infty$) гәдәр јајылдығындан, верилмиш шәраитдә, систем ән кичик енержили һала малик ола билмәз. Системин һәр һансы ади һалы дајаныглы гала билмир вә о, спонтан оларaг һәр ан енержиси даһа кичик олан һала кечмәкдә давам едәр.

Классик физикада мәнфи енержили һалларын сахланмасынын һеч бир әһәмијјәти јохдур, чүнки зәррәчијин сәрбәст һәрәкәти заманы онун енержиси јалныз кәсилмәдән дәјишир. Мүсбәт енержили областдан мәнфи енержили области кечмәк үчүн исә зәррәчијин енержиси $2m_oc^2$ гәдәр сычрајышла дәјишмәлидир. Лакин классик физикада енержиси сычрајышла дәјишән һәрәкәт мүмкүн дејилдир. Буна көрә дә классик физикада габагчадан belә һаллары нәзәрә алмамаг олар.

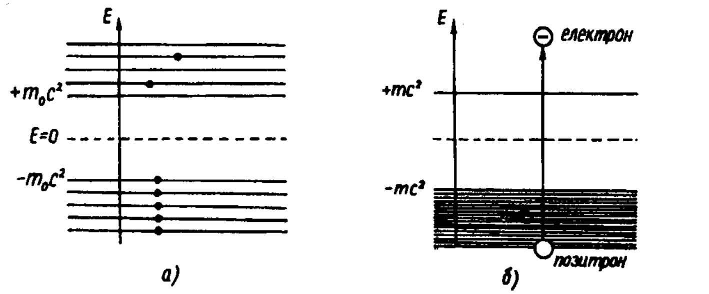
Квант механикасында исә вәзијјәт там башгадыр. Квант механикасында зәррәчијин һәрәкәти заманы онун енержиси һәм кәсилмәдән, һәм дә сычрајышла дәјишә биләр. Дикәр тәрәфдән, Дирак көстәрди ки, мүсбәт вә мәнфи енержили сәвијјәләр арасында кечид еһтималы сыфырдан фәрглидир вә белә кечид баш верә биләр. Она көрә дә мәнфи енержили сәвијјәләрин нәзәријјәдән кәнар едилмәси доғру олмаз.

Онда ортаја белә бир суал чыхыр: нијә ади шәраитдә мәнфи енержили сәвијјәләр, јә'ни там енержиси мәнфи олан сәрбәст зәррәчик мүшаһидә олунмур? Бу суалын чавабыны релјативистик квант нәзәријјәсинин мүәллифи Диракын өзү тапмышды.

Диракын фикринчә мәнфи енержили һаллар ади шәраитдә она көрә мүшаһидә олунмур ки, мәнфи енержили һаллар Паули принсипинә әсасән там, мүсбәт енержили һаллар исә гисмән тутулмушдур (шәкил 32,а). Бу сәбәбдән мүсбәт енержи областында зәррәчикләрин һәрәкәти мүшаһидә олунур, мәнфи енержи областында исә мүшаһидә олунмур.

Системə һəр һансы бир васитə илə (мəс., γ-квантларла) $2m_oc^2$ бəрабəр вə ја ондан бөјүк енержи верилмиш оларса, мəнфи енержи һалында олан електронлардан һəр һансы бири мүсбəт енержи областына кечəр. Бу заман мүсбəт енержи областында артыг електрон, мəнфи енержи областында исə онунла ејни заманда "бош јер" (сəвијјə) јаранар (шəкил 32,б).

Дирак мəнфи енержилəр фонундакы бу бош јерə күтлəси вə јүкү електронун күтлəсинə вə јүкүнə бəрабəр, лакин мүсбəт күтлəли вə мүсбəт јүклү зəррəчик кими бахмыш вə ону *позитрон*, јахуд *електронун антизəррəчији* адландырмышды.



Шəкил 32. Дирак нəзəријјəсиндə зəррəчијин сəрбəст һəрəкəтинə ујғун енержи сəвијјəлəринин схеми: а)- һəјəчанланмамыш; б)- електрон-позитрон чүтү əмəлə кəлəн һаллар.

Доғрудан да, белə бир системи електронлары сүр'əтлəндирəн харичи електрик саһəсинə дахил етсəк, һəр ики областда електронларын енержиси артдығына көрə онлар шəклин јухары һиссəсинə, "бош јер" исə һəмин сүр'əтлə шəклин ашағы тəрəфинə доғру һəрəкəт едəр. Башга сөзлə, "бош јерин" һəрəкəти күтлəси вə електрик јүкү мүсбəт олан зəррəчијин һəрəкəтини хатырладар. Отузунчу иллəрин ахырларына јахын сөјлəнмиш бу фикир 1932-чи илдə Андерсон тəрəфиндəн тəчрүбəдə тəсдиг олунду. О, һəмин илдə космик шүаларын тəркибиндə позитрону мүшаһидə етмəјə мүвəффəг олду. Белəликлə, 1932-чи илдə илк антизəррəчик кəшф олунду вə елементар зəррəчиклəр физикасында јени еранын башланғычы гојулду.

Сонракы иллəрдə апарылан тəчрүби тəдгигатлар нəтичəсиндə ашкар едилди ки, тəбиəтдə мүшаһидə олунан зəррəчиклəрин һамысынын–фермион вə ја бозон олмасындан асылы олмајараг – ујғун антизəррəчији вардыр.

Електронун мəнфи енержи областындан мүсбəт енержи областына кечмəси процеси *електрон-позитрон чүтүнүн јаранмасы*, мүсбəт енержи областында олан һəр һансы електронун мəнфи енержилəр фонунда олан "бош јерə" кечмəси процеси исə *електрон-позитрон чүтүнүн аннигилјасијасы* адланыр. Електрон-позитрон чүтүнүн малик олдуғу енержинин гијмəтиндəн асылы олараг електрон-позитрон чүтүнүн аннигилјасијасы заманы јалныз гамма-квантлар јох, истəнилəн зəррəчик чүтү вə ја зəррəчиклəр шырнағы јарана билəр. Мүасир физикада бу процесдəн тəбиəтдə сəрбəст һалда чох гыса мүддəт ($10^{-10}\div10^{-20}$ сан) јашаја билəн гејри-стабил зəррəчиклəрин хассəлəрини өјрəнмəк үчүн истифадə олунур.

Гејд едəк ки, електрон-позитрон, протон-антипротон, нејтрон-антинејтрон чүтлəринин аннигилјасијасы вə бу зəррəчиклəрин нүвəлəрдəн сəпилмəси процеслəринин тəчрүби өјрəнилмəси зəиф вə күчлү (нүвə) гаршылыглы тə'сирлəрин тəбиəтинин мүəјјəн едилмəсиндə вə бунунла да онларын ујғун олараг $W^{\pm}$ вə Z_o вə глүон-кварк моделлəринин ишлəниб дəгиглəшдирилмəсиндə мүһүм рол ојнамышдыр.

§ 71. ТАМ МОМЕНТ ОПЕРАТОРУ ВƏ ОНУН ХАССƏЛƏРИ

Шрединкер нəзəријјəсиндə мəркəзи саһəдəки һəрəкəт үчүн (бах: §39-а) квант механики системин фырланма (орбитал) моменти сахланыр, јə'ни

$$\check{\vec{L}} = \left[\vec{r}\check{\vec{p}}\right] \tag{71.1}$$

операторунун квадраты вə $\check{\vec{L}}$-ин координат охлары үзрə көтүрүлмүш проjексијаларындан бири системин $\check{H} = \dfrac{\check{p}^2}{2m} + V(r)$ Һамилтон оператору илə коммутасија едир. Системин E енержиси, L^2 һəрəкəт мигдары моменти квадраты вə мəсəлəн, L_z проjексијасы һəрəкəт интеграллары олур.

Релјативистик еффектлəр вə зəррəчијин спини нəзəрə алынан Дирак нəзəријјəсиндə $\check{L}_z$ оператору системин Дирак Һамилтон оператору илə коммутасија етмир.

Доғрудан да, Дирак нəзəријјəсиндə мəркəзи саһəдəки һəрəкəтин Һамилтон оператору

$$\check{H} = c\vec{\alpha}\check{\vec{p}} + \rho_3 m_o c^2 + V(r) \tag{71.2}$$

шəклинə маликдир.

$\check{L}_z$ вə $\check{S}_z = \dfrac{\hbar}{2}\sigma_z$ операторларынын $\check{H} = c\vec{\alpha}\check{\vec{p}} + \rho_3 m_o c^2$ оператору илə коммутасијасы ујғун олараг (67.2) вə (67.3) мүнасибəтлəри илə верилмишдир. Бурадан чыхыр ки, системин

$$\check{\vec{J}} = \check{\vec{L}} + \check{\vec{S}} \tag{71.3}$$

там моментинин $\check{J}_z$ проjексијасы (71.2) оператору илə коммутасија едир.

$\vec{\breve{L}}$ вә $\vec{\breve{S}}$ операторлары ермит олдуғундан (71.3) оператору да ермитдир. $\vec{\breve{J}}$-јә ујғун физики кәмијјәт системин там моменти адланыр вә о сахланыр.

$\vec{\breve{J}}$ там момент операторунун $\breve{J}_x, \breve{J}_y, \breve{J}_z$ компонентләри үчүн коммутасија мүнасибәтләрини тапаг.

(13.14)-дән орбитал момент операторунун компонентләри

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

мүнасибәтләрини өдәјир. $\vec{S} = \frac{h}{2}\vec{\sigma}$ спин операторунун $\breve{S}_i$ компонентләри үчүн исә онлары тә'јин едән σ_i Дирак матрисаларынын өдәдији (61.10′) мүнасибәтләриндән

$$\breve{S}_i\breve{S}_k - \breve{S}_k\breve{S}_i = i\hbar\tilde{\varepsilon}_{ikl}\breve{S}_l \qquad (61.10)$$

алыныр. $\breve{L}_i$ вә $\breve{S}_i$ операторлары мүхтәлиф дәјишәнләрә тә'сир етдијиндән, онлар коммутасија едир.

$$\breve{L}_i\breve{S}_k - \breve{S}_k\breve{L}_i = 0. \qquad (71.4)$$

(13.14), (61.10′) вә (71.4)-дән там момент операторунун компонентләри үчүн

$$\breve{J}_i\breve{J}_k - \breve{J}_k\breve{J}_i = i\hbar\tilde{\varepsilon}_{ikl}\breve{J}_l \qquad (71.5)$$

коммутасија мүнасибәтләри алыныр.

Бурадан бир нәтичә олараг чыхыр ки, системин мүәјјән һалында там момент мүәјјән гијмәтә малик дејилдир. Лакин, орбитал моментдә олдуғу кими, там момент операторунун квадраты илә онун үч компонентләриндән истәнилән биринә ујғун оператор коммутасија едир. Мәсәлән, $\breve{J}^2$ илә $\breve{J}_z$ операторларынын коммутасијасыны һесаблајаг.

(71.3)-дән онларын коммутасијасы

$$\breve{J}^2\breve{J}_z - \breve{J}_z\breve{J}^2 = (\breve{L}^2 + \breve{S}^2)\breve{J}_z - \breve{J}_z(\breve{L}^2 + \breve{S}^2) + 2((\vec{\breve{L}}\vec{\breve{S}})\breve{J}_z - \breve{J}_z(\vec{\breve{L}}\vec{\breve{S}}))$$

олар. Бурада $\breve{L}^2, \breve{L}_z, \breve{S}^2$ вә $\breve{S}_z$ операторлары гаршылыглы коммутасија етдијиндән

$$\breve{J}^2\breve{J}_z - \breve{J}_z\breve{J}^2 = 2\left[(\breve{L}_x\breve{S}_x + \breve{L}_y\breve{S}_y)(\breve{L}_z + \breve{S}_z) - (\breve{L}_z + \breve{S}_z)(\breve{L}_x\breve{S}_x + \breve{L}_y\breve{S}_y)\right]$$

вә ја

$$\breve{J}^2\breve{J}_z - \breve{J}_z\breve{J}^2 = 2\{ (\breve{L}_x\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}_x)\breve{S}_x + (\breve{L}_y\breve{L}_z - \breve{L}_z\breve{L}_y)\breve{S}_y + \\ + \breve{L}_x(\breve{S}_x\breve{S}_z - \breve{S}_z\breve{S}_x) + \breve{L}_y(\breve{S}_y\breve{S}_z - \breve{S}_z\breve{S}_y) \}$$

алыныр. Бу ифадәдә (13.14) вә (61.10′) бәрабәрликләрини нәзәрә алсаг,

$$\breve{J}^2\breve{J}_z - \breve{J}_z\breve{J}^2 = 2i\hbar(-\breve{L}_y\breve{S}_x + \breve{L}_x S_y - \breve{L}_x S_y + L_y S_x) = 0. \qquad (71.6)$$

Ејнилә бунун кими

$$\breve{J}^2\breve{J}_x - \breve{J}_x\breve{J}^2 = 0, \ \breve{J}^2\breve{J}_y - \breve{J}_y\breve{J}^2 = 0 \qquad (71.7)$$

олур. Асанлыгла көстәрмәк олар ки $\breve{J}^2, \breve{L}^2$ вә $\breve{S}^2$ операторлары да гаршылыглы коммутасија едир:

$$\breve{J}^2\breve{L}^2 - \breve{L}^2\breve{J}^2 = 0, \ \breve{J}^2\breve{S}^2 - \breve{S}^2\breve{J}^2 = 0, \ \breve{L}^2\breve{S}^2 - \breve{S}^2\breve{L}^2 = 0. \qquad (71.8)$$

(71.3)-үн квадратыны көтүрсәк,

$$\breve{J}^2 = \breve{L}^2 + \breve{S}^2 + 2(\vec{\breve{L}}\vec{\breve{S}}),$$

бурадан

$$\vec{\breve{L}}\vec{\breve{S}} = \frac{1}{2}(\breve{J}^2 - \breve{L}^2 - \breve{S}^2) \qquad (71.9)$$

вә $\vec{\breve{L}} = \vec{\breve{J}} - \vec{\breve{S}}$-ин квадратындан

$$\vec{\breve{J}}\vec{\breve{S}} = \frac{1}{2}(\breve{J}^2 - \breve{L}^2 + \breve{S}^2) \qquad (71.10)$$

алыныр. (71.8)–(71.10) ифадәләриндән көрүнүр ки, $\vec{\breve{L}}\vec{\breve{S}}$ вә $\vec{\breve{J}}\vec{\breve{S}}$ операторлары $\breve{J}^2, \breve{L}^2, \breve{S}^2$ вә $\breve{J}_z$ операторлары илә коммутасија едир вә бу алты оператор ејни бир үмуми мәхсуси функсијаја маликдир.

§ 72 $\breve{J}^2$ вә $\breve{J}_z$ ОПЕРАТОРЛАРЫНЫН МӘХСУСИ ГИЈМӘТЛӘРИ ВӘ МӘХСУСИ ФУНКСИЈАЛАРЫ

$\breve{J}^2$ вә $\breve{J}_z$ операторлары коммутасија етдијиндән онлар үмуми мәхсуси функсијаја маликдир:

$$\breve{J}^2\Psi = J^2\Psi, \\ \breve{J}_z\Psi = J_z\Psi. \qquad (72.1)$$

$\breve{J}^2$ оператору $\breve{J}^2 = \breve{J}_x^2 + \breve{J}_y^2 + \breve{J}_z^2$ кими һәмишә мүсбәт вә ермит операторларын квадратлары чәми олдуғундан, өзү дә һәмишә мүсбәт ермит оператордур.

(72.1) тәнликләринин һәллиндә Паули јахынлашмасы илә кифајәтләнмәк олар. Бу јахынлашмада $\breve{S}_i$ спин операторлары ики сәтир–сүтунлу σ_i Паули матрисалары илә ифадә едилдијиндән (72.1) тәнликләрин һәллини

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \tag{72.2}$$

кими ахтармаг олар. (72.2)-ни (72.1)-ин биринчи тәнлијиндә јазыб, (71.3) нәзәрә алынса,

$$(\breve{L}^2 + \breve{S}^2 + 2(\vec{\breve{L}}S))\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = J^2\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \tag{72.3}$$

олар. $\breve{J}^2, \breve{L}^2, \breve{S}^2$ вә $\vec{\breve{L}}\vec{\breve{S}}$ операторлары үмуми мәхсуси функсијалара малик олдуғундан, (72.3)-үн һәлли олан Ψ_1 вә Ψ_2 функсијалары $\breve{L}^2$-ын (14.28′) илә верилмиш $У_{lm}(\theta,\varphi)$ мәхсуси функсијасындан јалныз сабитлә фәргләнә биләр. Һәмин сабитләри тапмаг үчүн (72.3)-дә

$$\breve{L}^2\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1)\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

вә

$$\breve{S}^2\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2)\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l_s(l_s+1)\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \tag{72.3′}$$

(бурада $l_s = \frac{1}{2}$-дир) олдуғуну нәзәрә алдыгда (72.3) тәнлији (61.13) әсасән,

$$\left\{ \hbar^2\left[l(l+1) + \frac{3}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right] + \hbar\left[\breve{L}_x\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + L_y\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + L_z\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right] \right\}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = J^2\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

вә ја бүтүн һәдләри $\hbar^2$-на бөләндән сонра

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\hbar}\left[\breve{L}_z\Psi_1 + (\breve{L}_x - i\breve{L}_y)\Psi_2\right] = \lambda\Psi_1 \\ &\frac{1}{\hbar}\left[(\breve{L}_x + i\breve{L}_y)\Psi_1 - \breve{L}_z\Psi_2\right] = \lambda\Psi_2 \end{aligned} \tag{72.4}$$

системи шәклиндә јазмаг олур. Бурада

$$\lambda = \eta - l(l+1) - \frac{3}{4}, \quad \eta = \frac{J^2}{\hbar^2} \tag{72.5}$$

әвәзләри гәбул едилмишдир.

$$\breve{L}_+ = \breve{L}_x + i\breve{L}_y, \quad \breve{L}_- = \breve{L}_x - i\breve{L}_y \tag{72.6}$$

кими бир-бирилә гаршылыглы ермит олан операторлар дахил едәк (бах §13) (13.17)-дә көстәрилән кими онлар үчүн

$$\breve{L}_z\breve{L}_\pm - \breve{L}_\pm L_z = \pm\hbar L_\pm \tag{72.7}$$

коммутасија мүнасибәти өдәнилир.

$\breve{L}_z\breve{L}_\pm$ оператору илә $\breve{L}_z$-ин $У_{lm}(\theta,\varphi)$ мәхсуси функсијасына тә'сир едәк. (72.7) ифадәләринә көрә бу тә'сир

$$\breve{L}_z\breve{L}_\pm Y_{lm} = (\breve{L}_\pm\breve{L}_z \pm \hbar\breve{L}_\pm)Y_{lm} = \breve{L}_\pm(\breve{L}_z \pm \hbar)Y_{lm} = \hbar(m\pm 1)\breve{L}_\pm Y_{lm}$$

олур. Бурадан чыхыр ки, $У_{lm}(\theta,\varphi)$ функсијасы $\breve{L}_\pm$ операторларынын $\hbar(m\pm1)$ мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијасыдыр, јә'ни

$$\breve{L}_\pm Y_{lm}(\theta,\varphi) = aY_{l,m\pm1}(\theta,\varphi). \tag{72.8}$$

Бу бәрабәрлији сол тәрәфдән $Y^+_{lm'}(\theta,\varphi)$-ә вуруб θ вә φ-нин бүтүн дәјишмә интервалында интеграллагасаг, $Y_l^m(\theta,\varphi)$-ләр үчүн ортонормаланма шәртләриндән

$$\int Y^+_{lm'}\breve{L}_\pm Y_{lm}d\Omega = a\int Y^+_{lm'}Y_{l,m\pm1}d\Omega = a\delta_{m',m\pm1}$$

аларыг, јә'ни $\breve{L}_\pm$ операторлары үчүн јалныз $(\breve{L}_+)_{m\pm1,m} = \langle m+1|\breve{L}_+|m\rangle$ вә $(\breve{L}_-)_{m-1,m} = \langle m-1|\breve{L}_-|m\rangle$ матриса елементләри сыфырдан фәргли олур:

$$\langle m+1|\breve{L}_+|m\rangle \neq 0; \ \langle m-1|\breve{L}_-|m\rangle \neq 0 \tag{72.9}$$

Бу матриса елементләрини һесаблајаг. Әввәлчә $\breve{L}^2 = \breve{L}_x^2 + \breve{L}_y^2 + \breve{L}_z^2$ операторуну $\breve{L}_\pm$ операторлары илә ифадә едәк. Бунун үчүн $\breve{L}_\pm = \breve{L}_x \pm i\breve{L}_y$ операторларыны $\breve{L}_\mp = \breve{L}_x \mp i\breve{L}_y$-ә вураг:

$$\breve{L}_\pm\breve{L}_\mp = \breve{L}_x^2 + \breve{L}_y^2 \mp (\breve{L}_x L_y - \breve{L}_y\breve{L}_x) = \breve{L}_x^2 + \breve{L}_y^2 \pm \hbar\breve{L}_z$$

Бурада $\breve{L}_x^2 + \breve{L}_y^2$ чәмини $\breve{L}^2$ -ын ифадәсиндән $\breve{L}^2 - \breve{L}_z^2$ илә әвәз етсәк,

$$\breve{L}_\pm L_\mp = \breve{L}^2 - \breve{L}_z^2 \pm \hbar \breve{L}_z \qquad (72.10)$$

аларыг. (72.10) ифадәсини солдан вә сағдан $\breve{L}^2$ вә $\breve{L}_z$ операторларынын мәхсуси функсијалары олан Y_{lm}^+ вә Y_{lm} вуруб интегралласаг,

$$\int Y_{lm}^+ \breve{L}_- \breve{L}_+ Y_{lm} d\Omega = \langle lm / \breve{L}_- \breve{L}_+ / lm \rangle = \hbar^2 (l-m)(l+m+1),$$

$$\int Y_{lm}^+ \breve{L}_+ \breve{L}_- Y_{lm} d\Omega = \langle lm / \breve{L}_+ \breve{L}_- / lm \rangle = \hbar^2 (l+m)(l-m+1), \qquad (72.11)$$

бурада $l(l+1) - m^2 \mp m = (l \pm m)(l \mp m + 1)$ олдуғу нәзәрә алынмышдыр. (72.8) тәнлијиндән көрүнүр ки, $\breve{L}_\pm$ -ун тә'сири јалныз m квант әдәдинин дәјишмәсинә кәтирдијиндән $\breve{L}_\pm$ операторларын матриса елементләринин јазылышында јалныз m индексини сахламагла кифајәтләнмәк олар:

$$\langle m / L_- L_+ / m \rangle = \hbar^2 (l-m)(l+m+1) \qquad (72.12)$$

$$\langle m / L_\pm L_\mp / m \rangle = \hbar^2 (l \pm m)(l \mp m + 1)$$

Матрисаларын вурулма гајдасына көрә

$$\langle m / L_\mp L_\pm / m \rangle = \langle m / L_\mp / m' \rangle \langle m' / L_\pm / m \rangle \qquad (72.13)$$

$\breve{L}_+$ вә $\breve{L}_-$ операторларынын ермит операторлары олдуғуну, јә'ни

$$\langle m / \breve{L}_+ / m' \rangle = \langle m' / \breve{L}_- / m \rangle \qquad (72.14)$$

нәзәрә алсаг, (72.9), (72.12) вә (72.13) ифадәләриндән

$$\langle m+1 / \breve{L}_+ / m \rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \qquad (72.15)$$

$$\langle m-1 / \breve{L}_- / m \rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)},$$

јахуд

$$\breve{L}_+ Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_{l,m+1}(\theta,\varphi) \qquad (72.16)$$

$$\breve{L}_- Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l,m-1}(\theta,\varphi)$$

алыныр. (72.16)-дан чыхыр ки, (72.4) системинин һәллини

$$\Psi_1 = a Y_l^{m-1}(\theta,\varphi) \qquad (72.17)$$

$$\Psi_2 = b Y_l^m(\theta,\varphi)$$

шәклиндә ахтармаг олар. Онда a вә b әмсаллары үчүн

$$(\lambda - m + 1)a - \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, b = 0 \qquad (72.18)$$

$$(\lambda + m)b - \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\, a = 0$$

системи алыныр. (72.18) бирчинс системин сыфырдан фәргли (гејри-тривиал) һәллин олмасы үчүн a вә b-нин әмсалларындан дүзәлмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр.

$$\begin{vmatrix} \lambda - m + 1 & -\sqrt{(l+m)(l-m+1)} \\ -\sqrt{(l+m)(l-m+1)} & \lambda + m \end{vmatrix} = 0$$

Бурадан λ

$$\lambda(\lambda+1) = l(l+1) \qquad (72.19)$$

бәрабәрлији илә тә'јин олунур вә λ үчүн

$$\lambda = l, \quad \lambda = -(l+1) \qquad (72.20)$$

кими ики һәлл алыныр. λ- нын бу гијмәтләрини (72.5)-дә јазсаг, $\lambda = l$ оланда $\eta = \frac{J^2}{\hbar^2} = l^2 + 2l + \frac{3}{4} = (l + \frac{1}{2})(l + \frac{3}{2})$, $\lambda = -(l+1)$ оланда исә $\eta = l^2 - \frac{1}{4} = (l - \frac{1}{2})(l + \frac{1}{2})$ олур. Биринчи һалда $j = l + \frac{1}{2}$, икинчи һалда исә $j = l - \frac{1}{2}$ котүрсәк, $\breve{J}^2$ операторунун мәхсуси гијмәтләри үчүн һәр ики һалда

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1) \qquad (72.21)$$

ифадәси алыныр. Бурада j *дахили квант әдәди* адланыр. j-нын $j = l + \frac{1}{2}$ гијмәти орбитал вә спин моментләринин топланмасына, $j = l - \frac{1}{2}$ гијмәти исә онларын чыхылмасына ујғундур. j-нын $j = l \pm \frac{1}{2}$ ифадәсиндә l=0,1,2,... мүсбәт там гијмәтләр алдығындан

$$j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots \qquad (72.22)$$

кими мүсбәт јарым там гијмәтләр алыр. E-ин верилмиш гијмәтиндә исә

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \text{вә} \quad j = l - \frac{1}{2} \tag{72.23}$$

кими ики мүхтәлиф гијмәт алыр. j дахили квант әдәди там моментин квадратыны тә'јин едир. Она көрә о, мәнфи гијмәтләр ала билмир. $l=0$ оланда j јалныз $j = \left| l - \frac{1}{2} \right| = \frac{1}{2}$ гијмәтини алыр.

$\breve{J}^2$ операторунун мәхсуси функсијаларынын дәгиг аналитик ифадәсини тапмаг үчүн λ-нын $\lambda=l$ вә $\lambda=-(l+1)$ гијмәтләрини (72.18)-дә јазыб, (72.2) функсијасынын

$$\int \Psi^{+}\Psi(d\vec{r}) = \int (\Psi_1^{*}\Psi_1 + \Psi_2^{*}\Psi_2)(d\vec{r}) = 1$$

нормаланма вә $Y_l^m(\theta,\varphi)$ функсијаларынын исә ортонормаланма шәртләриндән тапылан $a^2 + b^2 = 1$ бәрабәрлијиндән истифадә етмәк лазымдыр. Онда $\lambda = l,\ j = l + \frac{1}{2}$ оланда

$$a = \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}},\ b = -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}},$$

вә мәхсуси функсија

$$\Psi_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}\ Y_l^{m-1}(\theta,\varphi) \\ -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}\ Y_l^{m}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} = Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi), \tag{72.24}$$

$\lambda = -(l+1),\ j = l - \frac{1}{2}$ оланда исә

$$a = \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}},\ b = \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}},$$

ујғун мәхсуси функсија

$$\Psi_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}\ Y_l^{m-1}(\theta,\varphi) \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}\ Y_l^{m}(\theta,\varphi) \end{pmatrix} = Y_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \tag{72.25}$$

олур. Y_{lm}^{J} функсијалары сферик спинорлар адланыр. Онлар үчүн ортонормаланма шәрти

$$\int Y_{l'm'}^{J'}(\theta,\varphi) Y_{lm}^{J}(\theta,\varphi) d\Omega = \delta_{j'j}\delta_{m'm}\delta_{l'l} \tag{72.26}$$

шәклиндә јазылыр. Бу шәртин доғрулуғуну јохламаг үчүн $Y_{lm}^{+(j)}$ функсијасынын

$$Y_{lm}^{+(j)} = (aY_l^{+^{m-1}},\ bY_l^{+^{m}}) \tag{72.27}$$

кими бир сәтирли икинчи тәртиб матриса олдуғуну вә $Y_l^m(\theta,\varphi)$ функсијаларынын ортонормаланма шәртләрини өдәдијини нәзәрә алмаг лазымдыр.

Спини јарым там олан зәррәчијин мәркәзи саһәдәки һәрәкәтинә аид олан истәнилән мәсәләдә $Y_{lm}^{(J)}(\theta,\varphi)$ сферик спинорлар, јәгин ки, ујғун квант тәнлијинин јалныз бучаглардан асылы һиссәсинин һәлли олачагдыр.

(72.21), (72.24), (72.25) ифадәләриндән көрүнүр ки, там моментин мүәјјән j гијмәтинә бир һәлл јох, магнит квант әдәди илә фәргләнән бир сыра һәлләр ујғун кәлир, јә'ни системин там моментин гијмәти илә тә'јин олунан һаллары чырлашмыш олур. Доғрудан да, j квант әдәди l илә тә'јин олундуғундан j-нын вә ја l-ин верилмиш гијмәтинә $m=0,\pm1, \pm2, \pm,\ldots\pm l$ илә фәргләнән $(2l+1)$ мүхтәлиф һал функсијасы ујғун кәлир. Бу, там моментин фәзада мүхтәлиф истигамәтләрә малик олмасы илә изаһ олунур.

Буну өзүмүзә даһа ајдын тәсәввүр етмәк үчүн $\breve{J}_z$ операторунун мәхсуси гијмәтләрини тапаг. $Y_{lm}^{J}(\theta,\varphi)$ функсијалары $\breve{J}_z$-ин мәхсуси функсијалары олдуғундан

$$\breve{J}_z Y_{lm}^{J} = J_z Y_{lm}^{J}$$

вә ја

$$(\breve{L}_z + \breve{S}_z) Y_{lm}^{J} = \left[\breve{L}_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} aY_l^{m-1} \\ bY_l^{m} \end{pmatrix} = \tag{72.28}$$

$$= \begin{pmatrix} (\breve{L}_z + \frac{\hbar}{2}) a\ Y_l^{m-1} \\ (L_z - \frac{\hbar}{2}) b\ Y_l^{m} \end{pmatrix} = J_z \begin{pmatrix} aY_l^{m-1} \\ bY_l^{m} \end{pmatrix}.$$

$\breve{L}_z$-ин $Y_l^{m'}$-ә ($m'=m$, јахуд $m'=m-1$) тә'сирини нәзәрә алсаг,

$$\begin{pmatrix} \left[(m-1)\hbar + \dfrac{\hbar}{2}\right] aY_l^{m-1} \\ (\hbar m - \dfrac{1}{2}\hbar) bY_l^m \end{pmatrix} = \hbar(m - \frac{1}{2}) \begin{pmatrix} aY_l^{m-1} \\ bY_l^m \end{pmatrix} = J_z \begin{pmatrix} aY_l^{m-1} \\ bY_l^m \end{pmatrix}$$

олар. Бурада $m_j = m - \dfrac{1}{2}$ әвәзини гәбул етсәк, $\breve{J}_z$-ин мәхсуси гијмәтләри үчүн

$$J_z = m_j \cdot \hbar \tag{72.29}$$

ифадәси алынар.

Билдијимиз кими, квант механикасында һал функсијасынын (векторунун) нормасы һеч вахт мәнфи ола билмәз. Норма һәмишә мүсбәт, хүсуси һалда сыфра бәрабәр олар. Норманын сыфра бәрабәр олмасы үчүн һал векторунун өзү сыфра бәрабәр олмалыдыр. Һал векторларынын (72.24) вә (72.25) ифадәләриндән көрүнүр ки, (72.1) тәнлијинин $j = l + \dfrac{1}{2}$-ә ујғун биринчи нөв һәлләринин нормасы о вахт сыфыр олар ки, ја $m=-l$ ($m_j = (-l - \dfrac{1}{2}) = -j$) вә ја $m=l+1$ ($m_j = l - \dfrac{1}{2} + 1 = l + \dfrac{1}{2} = j$) олсун (һәр ики һалда $Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}} = 0$). $j = l - \dfrac{1}{2}$-ә ујғун икинчи нөв һәлләр үчүн исә ја $m=l+1$ ($m_j = l + \dfrac{1}{2} = j$), ја да $m=-l$ ($m_j = -j$) олсун (һәр ики һалда $Y_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}} = 0$). l орбитал квант әдәдинин l=0,1,2,... мүсбәт там гијмәтләр алдығындан, m_j квант әдәди һәр ики һалда $-j$ дан $+j$-ја гәдәр

$$m_j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \pm\ldots \tag{72.30}$$

кими $2j+1$ сајда мүхтәлиф гијмәтләр алыр*.

* Спини там олан зәррәчикләр һалында һәм l вә һәм дә j квант әдәдләри мүсбәт там гијмәт алдығындан $j=l+l_s$ кими тә'јин олунан дахили квант әдәди мүсбәт там, m_j –квант әдәди исә мүсбәт вә мәнфи там гијмәтләр алыр.

$\breve{J}^2, \breve{L}^2$ вә $\breve{S}^2$ операторларынын (72.3′) вә (72.21) илә верилмиш гијмәтләри әсасында, бундан габагкы §-да (71.9) вә (71.10) ифадәләри илә верилмиш $\breve{\vec{L}}\breve{\vec{S}}$ вә $\breve{\vec{J}}\breve{\vec{S}}$ скалјар һасилләрин мәхсуси гијмәтләри үчүн

$$\begin{gathered} \vec{L}\vec{S} = \frac{\hbar^2}{2}\left\{j(j+1) - l(l+1) - l_s(l_s+1)\right\} \\ \vec{J}\vec{S} = \frac{\hbar^2}{2}\left\{j(j+1) - l(l+1) + l_s(l_s+1)\right\} \end{gathered} \tag{72.31}$$

ифадәләри алыныр.

§ 73. ҺӘРӘКӘТ МИГДАРЫ МОМЕНТЛӘРИНИН ВЕКТОРИ ТОПЛАНМАСЫ

Квант механикасында елә чохзәррәчикли системләрә тәсадүф олунур ки, онларын һалларыны һәрәкәт мигдары моментләри квадратынын вә онларын пројексијасынын мүәјјән гијмәтләри илә характеризә етмәк лазымдыр. Белә системләрә мисал олараг гаршылыглы тә'сирдә олмајан вә ја кифајәт гәдәр зәиф гаршылыглы тә'сирдә олан ики зәррәчикли системә бахаг.

Системдәки зәррәчикләрин һәрәкәт мигдары моментләрини $\vec{J}(1)$ вә $\vec{J}(2)$ илә ишарә едәк. Адәтән $\vec{J}(1)$ вә $\vec{J}(2)$ моментләри ики зәррәчијин орбитал, спин, там моментләри вә һәтта ејни бир зәррәчијин орбитал һәрәкәт мигдары вә спин моментләри ола биләр. $\vec{J}(1)$ вә $\vec{J}(2)$ моментләринә ујғун операторлары $\breve{\vec{J}}(1)$ вә $\breve{\vec{J}}(2)$ илә ишарә етсәк, онлар үчүн ајрылыгда

$$\left[\breve{J}_i(1), \breve{J}_k(1)\right] = \breve{J}_i(1)\breve{J}_k(1) - \breve{J}_k(1)\breve{J}_i(1) = i\hbar\varepsilon_{ikl}\breve{J}_l(1) \tag{73.1}$$

$$\left[J_i(2), J_k(2)\right] = ih\varepsilon_{ikl}\breve{J}_l(2); \left[\breve{J}^2(1), \breve{J}_i(1)\right] = 0; \left[\breve{J}^2(2)\breve{J}_i(2)\right] = 0 \tag{73.2}$$

мүнасибәтләри өдәниләр. i,k=1,2,3. $\breve{J}_i(1)$ вә $\breve{J}_k(2)$ операторлары мүхтәлиф фәзаларда (мүхтәлиф зәррәчикләрин координатларына) тә'сир етдији үчүн онлар бир-бирилә коммутасија едир:

$$\left[\breve{J}_i(1), \breve{J}_k(2)\right] = 0; \left[\breve{J}_i(1), \breve{J}^2(2)\right] = 0; \left[\breve{J}_i(2), \breve{J}^2(1)\right] = 0\,. \tag{73.3}$$

(73.1) вә (72.2) мүнасибәтләриндән алыныр ки, систем, һәрәкәт мигдары моментләри квадратлары

$$J^2(1)=\hbar^2 j_1(j_1+1); \qquad J^2(2)=\hbar^2 j_2(j_2+1) \qquad (73.4)$$

вә онларын, дејәк ки, z оху бојунча проjексиjалары

$$J_z(1)=\hbar m_1; \qquad J_z(2)=\hbar m_2 \qquad (73.5)$$

ејни заманда мүәјјән гиjмәт алдығы һалларда ола биләр.

Билдиjимиз кими j_1 вә j_2-нин верилмиш гиjмәтиндә m_1 вә m_2 квант әдәдләри

$$m_1=j_1, j_1-1, ..., -j_1+1, -j \qquad (73.6)$$
$$m_2=j_2, j_2-1, ..., -j_2+1, -j_2$$

кими $(2j_{1,2}+1)$ саjда мүхтәлиф гиjмәт алыр.

Белә систем, јәгин ки, $\breve{J}^2(1)$, $\breve{J}_z(1)$ операторларынын $\Psi_{j_1m_1}$ вә $\breve{J}^2(2)$, $\breve{J}_z(2)$ операторларынын $\Psi_{j_2m_2}$ мәхсуси функсиjалары һасили олан

$$\Psi_{j_1m_1j_2m_2}=\Psi_{j_1m_1}\Psi_{j_2m_2} \qquad (73.7)$$

далға функсиjасы илә тәсвир олунар. Һәрәкәт мигдары моменти операторунун мәхсуси функсиjалары јалныз бучаг дәјишәнләриндән асылы олдуғуна көрә онлары § 14-дә гәбул олунмуш ишарәләрә уjғун олараг $Y_{jm}(\theta,\varphi)$ кими ишарә едәчәjик. Онда (73.7) бәрабәрлиjи:

$$Y_{j_1m_1j_2m_2}=Y_{j_1m_1}Y_{j_2m_2} \qquad (73.8)$$

кими jазылыр.

j_1 вә j_2-нин верилмиш гиjмәтләриндә m_1 вә m_2 квант әдәдләри (73.6)-jа уjғун олараг $(2j_1+1)$ вә $(2j_2+1)$ саjда мүхтәлиф гиjмәт алдығындан, (73.7)-дәки мүхтәлиф функсиjаларын (системин квант һалларынын) саjы $(2j_1+1)$ $(2j_2+1)$ олар. Беләликлә системин һәр бир һалы j_1, j_2, m_1, m_2 квант әдәдләринин верилмәси илә тә'јин олунар.

Инди дә системин там һәрәкәт мигдары моменти операторуну дахил едәк:

$$\breve{\vec{J}}=\breve{\vec{J}}(1)+\breve{\vec{J}}(2). \qquad (73.9)$$

(73.9)-ун сағ тәрәфиндә даjанан операторлар үчүн (73.1) мүнасибәтләри өдәнилдиjиндән $\vec{J}$ там момент операторунун проjексиjалары үчүн дә һәмин мүнасибәтләр өдәнилир:

$$\left[\breve{J}_i,\breve{J}_k\right]=i\hbar\varepsilon_{ikl}\breve{J}_l; \qquad \left[J^2,J_i\right]=0. \qquad (73.10)$$

Там момент операторунун z оху үзрә проjексиjасы $J_z=J_z(1)+J_z(2)$ үчүн (73.5) вә (73.8)-дән

$$\breve{J}_z\Psi_{j_1m_1j_2m_2}=(J_z(1)+J_z(2))Y_{j_1m_1}Y_{j_2m_2}=\hbar(m_1+m_2)Y_{j_1m_1}Y_{j_2m_2}=\hbar mY_{j_1m_1j_2m_2}$$

бәрабәрлиjи өдәнилдиjинә көрә магнит квант әдәдләри арасында

$$m=m_1+m_2 \qquad (73.11)$$

кими садә мүнасибәт алыныр.

(73.9)-а дахил олан операторларын квадратларынын мәхсуси гиjмәтләри арасында исә белә садә мүнасибәт јохдур. Бу онунла әлагәдардыр ки,

$$\breve{J}^2=\breve{J}^2(1)+\breve{J}^2(2)+2\breve{\vec{J}}(1)\breve{\vec{J}}(2) \qquad (73.12)$$

оператору үчүн (73.10) јердәјишмә мүнасибәтләриндән әлавә

$$\left[J^2,J^2(1)\right]=0; \qquad \left[\breve{J}^2,\breve{J}^2(2)\right]=0, \qquad (73.13)$$
$$\left[J_i,J^2(1)\right]=0; \qquad \left[\breve{J}_i,\breve{J}^2(2)\right]=0$$

коммутасиjа мүнасибәтләри өдәнилдиjи һалда: о, (73.12) вә (73.1)-дән көрүндүjү кими $\breve{J}_i(1)$ вә $\breve{J}_i(2)$ операторлары илә коммутасиjа етмир.

$$\left[J^2,J_i(1)\right]\neq 0; \qquad \left[J^2,J_i(2)\right]\neq 0. \qquad (73.14)$$

Беләликлә (73.10) мүнасибәтләриндән чыхыр ки, там һәрәкәт мигдары моменти моментләрин үмуми квантланма гаjдасына табедир:

$$J^2=\hbar^2 j(j+1), \ J_z=\hbar m, \ m=j, j-1,...,-j+1,-j. \qquad (73.15)$$

(73.13) вә (73.14) ифадәләри көстәрир ки, там моментин квадраты вә онун z оху бојунча проjексиjасы аjры-аjры һәрәкәт мигдары моментләринин квадраты илә ејни заманда мүәјјән гиjмәт ала, јә'ни бахылан системин һалы j, m, j_1, j_2 квант әдәдләринин верилмәси илә тә'јин олуна биләр. Лакин $\breve{J}_z(1)$ вә $\breve{J}_z(2)$ операторларынын мәхсуси гиjмәтләри исә $\breve{J}^2$-нын мәхсуси гиjмәти илә ејни заманда өлчүлә билмир вә беләликлә (73.8) илә верилмиш $Y_{j_1m_1j_2m_2}$ далға функсиjасы $\breve{J}^2$-нын мәхсуси функсиjасы олмур.

(73.8) илә верилмиш $Y_{j_1m_1}$, $Y_{j_2m_2}$ функсиjалар чохлуғу там ортонормаланмыш функсиjалар системи тәшкил етдиjиндән (бах, §72) системин j, m, j_1, j_2 квант әдәдләри илә тә'јин олунан һалларыны характеризә едән Y_{jm,j_1j_2} далға функсиjасыны суперпозисиjа принсипинә көрә, $Y_{j_1m_1}$ вә $Y_{j_2m_2}$ функсиjаларынын хәтти комбинасиjасы шәклиндә көстәрмәк олар:

$$Y_{jmj_1j_2}=\sum_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum_{m_2=-j_2}^{j_2}C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}Y_{j_1m_1j_2m_2}=\sum_{m_1m_2}C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}Y_{j_1m_1}Y_{j_2m_2}. \qquad (73.16)$$

Бура дахил олан $C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}$ әмсаллары векторы топланма әмсаллары вә ја Клебш-Гордон (К–Г) әмсаллары адланыр.

$Y_{jmj_1j_2}$ функсијаларынын фаза вуруғу елә сечилир ки, бу әмсаллар һәгиги әдәд олсун. Адәтән $Y_{jmj_1j_2}$ вә $Y_{j_1m_1}$, $Y_{j_2m_2}$ функсијалары ејни дәјишәнләрдән асылыдыр. $Y_{j_1m_1}$ вә $Y_{j_2m_2}$ функсијалардан бири бучаг координатларындан, дикәри исә спин дәјишәниндән асылыдырса, $Y_{jmj_1j_2}$ функсијасы спинли сферик функсија адланыр. §72-дә биз белә бир һал үчүн бир зәррәчикли системин $\hat{\vec{J}}=\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}}$ там моменти операторунун $Y_{lm}^{j=l\pm\frac{1}{2}}$ мәхсуси функсијаларыны тапмышдыг. (72.24) вә (72.25) ифадәләриндә $Y_{lm}^{j=l+\frac{1}{2}}$ вә $Y_{lm}^{j=l-\frac{1}{2}}$ функсијаларынын габағындакы әмсаллар бу вектору топланманын Клебш–Гордон әмсалларыдыр. Һәмин ифадәләрдә $S_{1/2}(s_z)$ вә $S_{-1/2}(s_z)$ спин функсијалары онларын $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ вә $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ ифадәләри илә әвәз олунмушдур.

(73.16)-дан алыныр ки, К–Г әмсаллары системи тәшкил едән зәррәчикләрин һәрәкәт мигдары моменти пројексијалары верилмиш олан (m_1,m_2) тәсвирдән там момент вә онун пројексијасы верилмиш олдуғу (J,m) тәсвиринә кечид әмсалларыдыр.

$C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}$ әмсалларына дахил олан m, m_1 вә m_2 квант әдәдләри үчүн (73.11) бәрабәрлији өдәнилдијиндән (73.16)-да m_1 вә m_2 үзрә олан ики гат чәм формал характер дашыјыр, m-ин верилмиш гијмәтиндә (73.16)-дакы чәми онлардан јалныз бири үзрә апармаг олар.

Јухарыда гејд етдик ки, j_1, j_2 илә j арасында (73.11)-ә охшар садә бәрабәрлик јохдур. j_1 вә j_2-нин верилмиш гијмәтиндә J-нын ала биләчәк гијмәтләрини тапмаг үчүн ашағыдакы кими мүлаһизә апармаг олар.

Тутаг ки, m_1 вә m_2 өзүнүн (73.6)-дакы верилмиш ән бөјүк гијмәтини алыр: $m_1=j_1$, $m_2=j_2$ онда $m=m_1+m_2=j_1+j_2$ гијмәти m-ин дә ән бөјүк гијмәти олар: $m_{max}=j_1+j_2$. m-ин бу гијмәтинә бир $Y_{j_1m_1j_2m_2}$ һалы вә бир $Y_{jmj_1j_2}$ һалы ујғун кәләр. Там моментин пројексијасы $m=m_1+m_2-1$-ә бәрабәр оланда m-ин бу гијмәтинә $m_1=j_1$, $m_2=j_2-1$ вә $m_1=j_1-1$, $m_2=j_2$ кими ики $Y_{j_1m_1j_2m_2}$ һалы вә $j=j_1+j_2$ $(m=J-1)$ вә $j=j_1+j_2-1$ $(m=J)$ кими ики

$Y_{jmj_1j_2}$ һалы ујғундур. Еләчә дә $m=j_1+j_2-2$ гијмәтинә $m=j_1$, $m_2=j_2-2$, $m_1=j_1-1$, $m_2=j_2-2$, $m_1=j_1-2$, $m_2=j_2$ кими үч $Y_{j_1m_1j_2m_2}$ һалы, $J=j_1+j_2$, $J=j_1+j_2-1$, $J=j_1+j_2-2$ кими үч $Y_{jmj_1j_2}$ һалы ујғун кәлир вә и.а. Беләликлә, m квант әдәди бир ваһид азаланда m-ин мүәјјән гијмәтинә ујғун системин мүмкүн һалларынын сајы бир ваһид артыр. Бу просеси $j_1>j_2$ олан һал үчүн $m=j_1-j_2$ гијмәтинә гәдәр давам етдирмәк олар. m-ин бу гијмәтиндә m_2 квант әдәди j_2-дән $-j_2$-јә гәдәр $2j_2+1$ сајда мүхтәлиф гијмәт алыр. m_1 исә $m_1=m-m_2$ бәрабәрлијиндән тә'јин олунур. Бу заман j квант әдәди j_1+j_2-дән j_1-j_2-јә гәдәр $(2j_2+1)$ сајда мүхтәлиф гијмәт алыр. Бу заман һәр ики $Y_{j_1m_1j_2m_2}$ вә $Y_{jmj_1j_2}$ тәсвирдә квант һалларын сајы $(2j_2+1)$ олур. Сонра $m=j_1-j_2-1$ ола биләр. Лакин m_2 јенә дә j_2-дән $-j_2$-јә кими, m_1 исә $m_1=j_1-1,...,j_1-2j_2-1$ гијмәтләрини алыр. $m_2\le j_2$ олдуғундан онун үчүн $(j_2,-j_2)$ интервалдан кәнарда гијмәт мөвчуд олмадығындан j үчүн јени гијмәт алынмыр вә системин мүмкүн олан квант һалларынын сајы $(2j_2+1)$ олараг галыр. m-ин $-j_1-j_2$-јә гәдәр азалмасы да j үчүн јени гијмәтә кәтирмир. Беләликлә j_1 вә j_2-нин верилмиш гијмәтиндә j квант әдәди $j_{max}=j_1+j_2$ илә $j_{min}=|j_1-j_2|$ арасында

$$j=j_1+j_2,\ j_1+j_2-1,\ \ldots,\ |j_1-j_2| \qquad (73.17)$$

сајда мүхтәлиф гијмәт алыр. $j_1>j_2$ оланда онларын сајы $(2j_2+1)$, $j_1<j_2$ оланда исә $(2j_1+1)$-ә бәрабәрдир. Бу мә'нада да ахырынчы һәддин модулу көтүрүлмүшдүр. j-нын (j_{max}, j_{min}) интервалдакы $Y_{jmj_1j_2}$ һалларынын үмуми сајы $Y_{j_1m_1j_2m_2}$ тәсвириндә олдуғу кими, јенә дә

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}(2j+1)=(2j_1+1)(2j_2+1) \qquad (73.18)$$

олар.

Бу нәтичәнин вектор модели адланан модел васитәсилә шәрһини вермәк олар. Узунлуғу j_1 вә j_2 олан ики $\vec{j}_1$ вә $\vec{j}_2$ векторун векторы топланмасында алынан $\vec{J}$ векторунун j узунлуғу, векторларын паралел һалына ујғун j_1+j_2 максимум гијмәти илә онларын антипаралел һалына ујғун $|j_1-j_2|$ минимум гијмәти арасында јерләшән ардычыл там (јарым там) әдәдләрә бәрабәр гијмәт алар.

(73.16) кечидиндә иштирак едән далға функсијалары ортонормалајычы шәртини өдәдијиндән Клебш–Гордон әмсаллары да һәмин шәртләри өдәјир:

$$\sum_{m_1 m_2} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} C^{j'm'}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \delta_{JJ'} \delta_{mm'}, \tag{73.19}$$

$$\sum_{Jm} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} C^{jm}_{j_1 m_1' j_2 m_2'} = \delta_{m_1 m'} \delta_{m_2 m_2'} \tag{73.20}$$

$$\sum_{m_1 m} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2' m_2'} = \frac{2j+1}{2j_2+1} \delta_{J_2 J_2'} \delta_{m_2 m_2'} \tag{73.21}$$

Бу орта-нормаланма шәртләри (73.16) кечидинин унитар кечид олдуғуна дәлаләт едир. Бундан башга (73.19)–(73.21) мүнасибәтләри кечид әмсалларынын там систем тәшкил етдијини көстәрир.

$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2}$ әмсаллары һәгиги кәмијјәтләр олдуғундан (j,m) тәсвириндән (m_1, m_2) тәсвиринә кечид дә һәмин әмсалларла апарылыр:

$$Y_{j_1 m_1 j_2 m_2} = \sum_{Jm} C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} Y_{jmj_1 j_2}. \tag{73.22}$$

Векторы топланма әмсаллары садә физики мә'наја маликдир. (73.16) кечидиндә $(C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2})^2$-ы системин там моменти j-ја, онун проjексиjасы m-ә бәрабәр олан $Y_{jmj_1 j_2}$ һалында зәррәчијин биринин, дејәк ки, $\vec{J}_1$ моментинин z оху үзрә пројексијасынын мүәјјән m_1 гијмәтиндә, икинчи моментин пројексијасынын $m_2 = m - m_1$ гијмәти алма еһтималыны көстәрир. (73.22) кечидиндә исә һәмин $(C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2})^2$-ы һәр ики моментин m_1 вә m_2 пројексијалары верилдији $Y_{j_1 j_2 m_1 m_2}$ һалында системин там моментинин J-ја бәрабәр олма еһтималыдыр.

К–Г әмсаллары ашағыдакы симметрија хассәләринә маликдир.

$$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C^{jm}_{j_2 m_2 j_1 m_1} \tag{73.23}$$

$$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = (-1)^{j_1 + j_2 - j} C^{j_1, -m}_{j_1 - m_1, j_2 - m_2} \tag{73.24}$$

$$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = (-1)^{j_2 + m_2} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_2+1}} C^{j_1, -m_1}_{J_1, -m, j_2 m_2} \tag{73.25}$$

$$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_1+1}} C^{j_2, -m_2}_{j_1 m_1, j, -m} \tag{73.26}$$

Мисал үчүн j_1-ин истәнилән, $j_2 = \frac{1}{2}$ гијмәтиндә К–Г әмсаллары үчүн алынан чәдвәли көстәрәк:

$C^{Jm}_{j_1 m_1 \frac{1}{2} m_2} =$

j	$m_2 = \frac{1}{2}$	$m_2 = -\frac{1}{2}$
$j_1 + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\dfrac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\dfrac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$
$j_1 - \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\dfrac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\dfrac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}}$

Белә бир һал §72-дә тәһлил олунмушдур. Һәмин §-да спини $\frac{1}{2}\hbar$ олан бир зәррәчикли системин $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ там моментинин мәхсуси функсијалары һесабланмышдыр. Чәдвәлдә $j_1 = l$ көтүрүб, m-и $m - \frac{1}{2}$ илә әвәз етсәк, §72-дә (72.24) вә (72.25) ифадәләрдәки әмсаллары алмыш оларыг.

§ 74. ДИРАК ТӘНЛИЈИНИН МҮХТӘЛИФ ЈАХЫНЛАШМАЛАРЫ

Јүклү зәррәчијин електромагнит саһәсиндәки һәрәкәти

$$(E - e\varphi - c\alpha(\bar{\bar{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}) - \rho_3 m_o c^2)\Psi = 0 \tag{74.1}$$

Дирак тәнлији илә тәсвир олунур. Бу тәнлијин үмуми шәкилдә һәлли мүрәккәб ријази һесабламаларла әлагәдардыр. Лакин Дирак нәзәријјәсиндә һәлл едилән бир чох мәсәләләр үчүн (74.1) тәнлијини бу вә ја башга јахынлашмада һәлл етмәк вә бурадан да релјативистик вә башга тәбиәтли дүзәлишләри һесабламаг мәсәләнин нисбәтән там тәһлили үчүн кифајәт едир.

Чох да бөјүк олмајан сүр'әтләр һалында $(\upsilon < c)$, зәиф $(e\varphi, e\vec{A} << m_o c^2)$ харичи саһәдәки һәрәкәт үчүн (74. 1) тәнлијини υ/c вә υ^2/c^2 дәгиглији илә һәлл етмәк кифајәт едир.

а) Әввәлчә (74.1) тәнлијинин гејри-релјативистик (вә ја Паули) јахынлашмасыны тапаг. Бу јахынлашма Дирак тәнлијиндә јалныз υ/c тәртибли һәдләрин сахланмасына ујғундур.

Дирак матрисаларынын Паули матрисалары илә верилмиш (64.11) ифадәләриндән истифадә едәрәк (74.1) тәнлијини

$$(E - e\varphi)\Phi_1 = c\vec{\sigma}\vec{P}\Phi_2 \qquad (74.2)$$

$$(E - e\varphi + 2m_o c^2)\Phi_2 = c\vec{\sigma}\vec{\vec{P}}\Phi_1$$

системи шәклиндә јазаг, бурада

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad \Phi_2 = \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} \qquad (74.3)$$

вә $E \approx E' + m_o c^2$, $\vec{\vec{P}} = \vec{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}$ -дыр. (74.2)-нин икинчи тәнлијиндән

$$\Phi_2 = \frac{c\vec{\sigma}\vec{P}}{2m_o c^2 + E - e\varphi}\Phi_1 = \frac{1}{2m_o c^2}\left(1 + \frac{E' - e\varphi}{2m_o c^2}\right)^{-1}\vec{\sigma}\vec{\vec{P}}\Phi_1$$

Зәиф саһәләр үчүн $E' - e\varphi << 2m_o c^2$ олдуғундан

$$\Phi_2 = \frac{1}{2m_o c^2}\left(1 - \frac{E' - e\varphi}{2m_o c^2}\right)\vec{\sigma}\vec{\vec{P}}\Phi_1 . \qquad (74.4)$$

Буну (74.2)-дә биринчи тәнликдә јеринә јазсаг, алынмыш тәнлик јалныз Φ_1 үчүн олар:

$$(E' - e\varphi)\Phi_1 = \frac{\vec{\sigma}\vec{\vec{P}}}{2m_o}\left(1 - \frac{E' - e\varphi}{2m_o c^2}\right)\vec{\sigma}\vec{\vec{P}}\Phi_1 . \qquad (74.5)$$

Там енержинин мүсбәт гијмәтләри ($E>0$) үчүн $\frac{E' - e\varphi}{2m_o c^2} \sim \frac{m v^2}{m_o c^2} \sim \frac{v^2}{c^2}$ олдуғундан, бахылан јахынлашмада бу һәдди ваһидә нисбәтән нәзәрә алмасаг, (74.4) вә (74.5) ифадәләри ујғун олараг

$$\Phi_2 = \frac{\vec{\sigma}\vec{\vec{P}}}{2m_o c}\Phi_1 \qquad (74.4')$$

вә

$$(E' - e\varphi)\Phi_1 = \frac{(\vec{\sigma}\vec{\vec{P}})(\vec{\sigma}\vec{\vec{P}})}{2m_o}\Phi_1 \qquad (74.5')$$

шәклинә дүшәр. Һәм Дирак вә һәм дә Паули матрисалары үчүн доғру олан

$$(\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b}) = (\vec{a}\vec{b}) + i\vec{\sigma}\left[\vec{a}\vec{b}\right] \qquad (74.6)$$

мүнасибәтиндән истифадә етдикдә (бурада $\vec{a}, \vec{b}$ ихтијари векторлардыр)

$$(E' - e\varphi)\Phi_1 = \frac{1}{2m_o}\left(\vec{P}^2 + i\vec{\sigma}\left[\vec{\vec{P}}\vec{\vec{P}}\right]\right)\Phi_1 \qquad (74.7)$$

алынар. $\vec{\vec{P}} = \vec{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}$ операторунун компонентләринин гејри-коммутативлијини вә $\vec{\vec{p}}$ -нин өзүндән сағда дуран функсијалара тә'сир етдијини нәзәрә алсаг,

$$\left[\vec{\vec{P}}\vec{\vec{P}}\right]\Phi_1 = -\frac{e}{c}\left(\left[\vec{\vec{p}}\vec{A}\right] + \left[\vec{A}\vec{\vec{p}}\right]\right)\Phi_1 = -\frac{e}{c}\left[\vec{\vec{p}}\vec{A}\right]\cdot\Phi_1 = i\hbar\frac{e}{c}\,\mathrm{rot}\,\vec{A}\cdot\Phi_1$$

олар. $\vec{H} = \mathrm{rot}\,\vec{A}$ олдуғундан

$$\left[\vec{\vec{P}}\vec{\vec{P}}\right]\Phi_1 = \frac{ie\hbar}{c}\vec{H}\Phi_1 . \qquad (74.7')$$

Буну (74.7)-дә јеринә јазанда (61.15) Паули тәнлијини алырыг:

$$E' - e\varphi - \frac{1}{2m_o}P^2 + \frac{e\hbar}{2m_o c}(\vec{\sigma}\vec{H})\Phi_1 = 0 . \qquad (74.8)$$

Демәли, гејри-релјативистик јахынлашмада, јә'ни Дирак тәнлијиндә јалныз υ/c тәртибли һәдләри сахладыгда, о, Паули тәнлијинә кечир. (74.8) тәнлијиндә сонунчу

$$V^{\text{маг}} = \frac{e\hbar}{2m_o c}\vec{\sigma}\vec{H} = -\vec{\mu}_s\vec{H} \qquad (74.9)$$

һәдди зәррәчијин спинә малик олмасы һесабына мејдана чыхмышды вә о, спин магнит моменти

$$\vec{\mu}_s = \frac{e\hbar}{2m_o c}\vec{\sigma} = \frac{e}{m_o c}\vec{S}, \qquad \vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} \qquad (74.10)$$

илә харичи магнит саһәси арасында мејдана чыхан гаршылыглы тә'сири характеризә едир (бурада $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ – спин операторудур).

(74.10) мүнасибәти спин механики моменти илә ујғун магнит моменти үчүн Де-Гааз вә Ејнштејн тәчрүбәләриндә алынмыш мүнасибәтин үзәринә дүшүр вә маддәләрин магнит хассәләринин јалныз спин магнит моменти һесабына олмасыны көстәрир. Дикәр тәрәфдән, магнит саһәсинин зәррәчијин һәрәкәтинә спинин варлығы илә әлагәдар олан тә'сири гејри-релјативистик јахынлашмада артыг өзүнү көстәрир. Електрик саһәсинин зәррәчијин һәрәкәтинә спинлә әлагәдар тә'сири исә бу јахынлашмада мејдана чыхмыр. Бу тә'сир, ашағыда көрәчәјимиз кими (бу параграфын б) бәндинә бах), јалныз сонракы јахынлашмада (јә'ни (74.1) тәнлијинә υ^2/c^2 тәртибли һәдләр дә дахил олдугда) өзүнү көстәрир.

Беләликлә, Дирак нәзәријјәси зәррәчијин дахили магнит моментинә (спинә) малик олмасыны габагчадан сөјләмәклә бәрабәр, онун гијмәти үчүн (тәчрүбәјә ујғун) дүзкүн гијмәтә кәтирир. Бу, Дирак нәзәријјәсинин әсас үстүн чәһәтләриндән бири һесаб олунур.

б) Паули тәнлијини чыхаранда биз, (74.4) тәнлијиндә јалныз υ/c тәртибли һәдләри сахламышдыг. Бу јахынлашмада, (74.8)-дән көрүндүјү кими, електрик саһәсинин електронун һәрәкәтинә спинин варлығы илә әлагәдар тә'сири мејдана чыхмыр. Електронун һәрәкәтинә бу тә'сирлә јанашы релјативистик дүзәлишләрин дә әһәмијјәти бөјүкдүр. Бунлары һесабламаг үчүн (74.5) тәнлијиндә υ/c тәртибли һәдләрлә јанашы υ^2/c^2 тәртибли һәдләри сахламаг лазымдыр.

(74.4) вә (74.4′) мүнасибәтләриндән көрүнүр ки, (74.5) тәнлијинин һәлли олан Φ_1 функсијасы ики компонентли функсијаја ујғун нормаланма шәртини өдәмир вә далға функсијасынын физики мә'насына ујғун шәклә малик дејилдир. Доғрудан да

$$1 = \int \Psi^+\Psi(d\vec r) = \int(\Phi_1^*\Phi_1 + \Phi_2^*\Phi_2)(d\vec r) = \int \Phi_1^*(1+\frac{p^2}{4m_o^2c^2})\Phi_1(d\vec r) \quad (74.11)$$

бәрабәрлијиндә $1 + p^2/4m_o^2c^2$ вуруғу мејдана чыхыр вә Φ_1 үчүн нормаланма шәрти ади шәклә малик олмур.

Ики компонентли функсијалар үчүн дә нормаланма шәртини ади шәкилдә сахламаг үчүн

$$\Phi = g\Phi_1 \quad (74.11')$$

кими јени ики компонентли функсија дахил едәк. Онда

$$\int \Phi^*\Phi(d\vec r) = \int \Phi_1^+ g^+ g\Phi_1(d\vec r) = 1 \quad (74.12)$$

олар. (74.11) илә (74.12)-ни мүгајисә етсәк,

$$g^2 = 1 + \frac{\breve{p}^2}{4m_o^2c^2},$$

бурадан υ^2/c^2 дәгиглији илә

$$g = 1 + \frac{\breve{p}^2}{8m_o^2c^2}; \quad g^{-1} = 1 - \frac{\breve{p}^2}{8m_o^2c^2}$$

алыныр. Көрүндүјү кими g чеврилмә оператору ермит гошма оператордур: $g^+ = g$. Лакин унитар дејилдир: $g^+ \neq g^{-1}$.

$\Phi_1 = g^{-1}\Phi$-и (74.5)-дә јазыб, онда јалныз υ/c вә υ^2/c^2 һәдләри илә мәһдудлашсаг,

$$\left(E' - V - \frac{(E'-V)\breve{p}^2}{8m_o^2c^2}\right)\Phi = \left\{\frac{(\vec\sigma\breve{\vec P})(\vec\sigma\breve{\vec P})}{2m_o} - \frac{(\vec\sigma\breve{\vec p})(E'-V)(\vec\sigma\breve{\vec p})}{4m_o^2c^2} - \frac{(\vec\sigma\breve{\vec p})(\vec\sigma\breve{\vec p})\breve{p}^2}{16m_o^3c^2}\right\}\Phi$$

вә ја (74.6) мүнасибәтинә әсасән

$$\left(E' - V - \frac{(E'-V)\breve{p}^2}{8m_o^2c^2}\right)\Phi = \left\{\frac{\breve{\vec P}^2 + i\vec\sigma\left[\vec P\vec P\right]}{2m_o} - \frac{(\vec\sigma\breve{\vec p})(E'-V)(\vec\sigma\breve{\vec p})}{4m_o^2c^2} - \frac{p^4}{16m_o^3c^2}\right\}\Phi \quad (74.13)$$

олар.

$\breve{\vec p}$ вә $\vec\sigma$ операторларынын тә'сир ганунларындан истифадә едәрәк (74.13) тәнлијини садәләшдирәк. $(\vec\sigma\breve{\vec p})(E'-V)(\vec\sigma\breve{\vec p})\Phi$ һәдди һесабланан заман нәзәрә алмаг лазымдыр ки, $\breve{\vec p} = -i\hbar\vec\nabla$ оператору јалныз V вә Φ-ә тә'сир едир (E' координатлардан асылы дејилдир):

$$(\vec\sigma\breve{\vec p})(E'-V)(\vec\sigma\breve{\vec p})\Phi = (E'-V)\breve{p}^2\Phi - (\vec\sigma\breve{\vec p}V)(\vec\sigma\breve{\vec p})\Phi =$$
$$= (E'-V)\breve{p}^2\Phi - i\hbar e(\vec\sigma\vec{\mathcal E})(\vec\sigma\breve{\vec p})\Phi = \left\{(E'-V)\breve{p}^2 - i\hbar e(\vec{\mathcal E}\breve{\vec p}) + \hbar e\vec\sigma\left[\vec{\mathcal E}\breve{\vec p}\right]\right\}\Phi. \quad (74.14)$$

Бурада $V = e\varphi$ вә $\vec{\mathcal E} = -\vec\nabla\varphi$-дән истифадә едилмишдир.

$\frac{\breve{p}^4}{16m_o^3c^2}$ һәддини садәләшдирәк. Бахылан һәддин өзү υ^2/c^2 тәртибли олдуғундан, $\frac{\breve{p}^2}{2m_o}$ оператору үчүн

$$\frac{\breve{p}^2}{2m_o}\Phi = (E'-V)\Phi \quad (74.15)$$

бәрабәрлијиндән истифадә етмәк олар. Онда

$$\frac{\breve{p}^4}{2m_o}\Phi = \breve{p}^2(E'-V)\Phi = (E'-V)\breve{p}^2\Phi - (\breve{p}^2 V)\Phi - 2(\breve{\vec{p}}V)(\breve{\vec{p}}\Phi) =$$

$$= (E'-V)\breve{p}^2\Phi + e\hbar^2\nabla^2\varphi\cdot\Phi - 2ie\hbar(\vec{\mathcal{E}}\breve{\vec{p}})\Phi \qquad (74.16)$$

вә бурадан

$$(E'-V)\breve{p}^2\Phi = \left(\frac{\breve{p}^4}{2m_o} - e\hbar^2\vec{\nabla}^2\varphi + 2i\hbar e(\vec{\mathcal{E}}\breve{\vec{p}})\right)\Phi \qquad (74.17)$$

алыныр. (74.14) вә (74.17) ифадәләрини (74.13)-дә јеринә јазыб (74.7′) бәрабәрлијини нәзәрә алдыгда

$$\left(E' - e\varphi - \frac{\breve{p}^2}{2m_o}\right)\Phi = \Big\{ -\frac{\breve{p}^4}{8m_o^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m_o^2c^2}\left(\vec{\sigma}\left[\vec{\mathcal{E}}\breve{\vec{p}}\right]\right) +$$

$$+\frac{e\hbar^2}{8m_o^2c^2}\nabla^2\varphi - \frac{e}{m_oc}(\vec{A}\breve{\vec{p}}) - \mu_Б(\vec{\sigma}\vec{H})\Big\}\Phi \qquad (74.18)$$

олар. (74.18) тәнлији релјативистик зәррәчијин харичи електрик вә магнит саһәләриндәки һәрәкәтини характеризә едир. Она релјативистик вә спин еффектләри илә әлагәдар системин харичи електрик вә магнит саһәләри илә гаршылыглы тә'сир енержи операторлары дахилдир.

Ахырынчы тәнлији квант механики тәнликләринә хас олан үмуми шәкилдә јазсаг,

$$(E - \breve{H})\Phi = 0\,, \qquad (74.19)$$

онун $\breve{H}$ Һамилтон операторуну

$$\breve{H} = \breve{H}_o + \breve{H}_1 + \breve{H}_2 + \breve{H}_3 + \breve{H}_4 \qquad (74.20)$$

кими беш һәддин чәми кими көстәрмәк олар. (74.19) тәнлијинә кәтирән јахынлашма зәиф релјативистик јахынлашма адланыр. Бурада

$$\breve{H}_o = \frac{\breve{p}^2}{2m_o} + e\varphi \qquad (74.21)$$

харичи електростатик саһәдә һәрәкәт едән гејри-релјативистик зәррәчијин Һамилтон операторудур.

$$\breve{H}_1 = -\frac{\breve{p}^4}{8m_o^3c^2} \qquad (74.22)$$

зәррәчијин сүр'әтинин кифајәт гәдәр бөјүк олмасы ($\upsilon\sim c$) илә әлагәдар олан релјативистик дүзәлиш операторудур.

$$H_2 = -\frac{e\hbar}{4m_o^2c^2}\left(\vec{\sigma}\left[\vec{\mathcal{E}}\breve{\vec{p}}\right]\right) \qquad (74.23)$$

спин-орбитал гаршылыглы тә'сир оператору адланыр вә зәррәчијин спин магнит моментинә електрик саһәсинин тә'сирини характеризә едир.

$$H_3 = \frac{e\hbar^2}{8m_o^2c^2}\nabla^2\varphi \qquad (74.24)$$

контакт гаршылыглы тә'сир оператору адланыр вә онун зәррәчијин енержи сәвијјәсинә вердији дүзәлишә *Дарвин дүзәлиши* дејилир. Онун классик аналогу јохдур вә она әјани мә'на вермәк мүмкүн олмур.

$$\breve{H}_4 = \frac{e}{m_oc}(\vec{A}\breve{\vec{p}}) + \frac{e\hbar}{2m_oc}(\vec{\sigma}\vec{H}) \qquad (74.25)$$

оператору зәррәчијин спин вә орбитал магнит моментләринә магнит саһәсинин тә'сирини характеризә едир.

§ 75. РЕЛЈАТИВИСТИК ЕЛЕКТРОНУН ($\upsilon\sim c$) НҮВӘНИН КУЛОН САҺӘСИНДӘ ҺӘРӘКӘТИ

Һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларда електронун нүвәнин Кулон саһәсиндәки һәрәкәтинин енержи сәвијјәләри үчүн Шрединкер нәзәријјәсиндә

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \qquad (75.1)$$

ифадәси алыныр (бах 40.26), бурада $R = \dfrac{me^4}{2\hbar^3}$ *Ридберг* сабитидир. Бу нәтичәнин тәчрүбә илә мүгајисәси көстәрир ки, о, тәчрүби фактлары там тәсвир едә билмир. Һидрокенәбәнзәр атомларын спектрләриндә спектр хәтләри инчә гурулуша маликдир: һәр бир хәтт бир-биринә чох јахын ики хәтдән ибарәтдир. Спин вә релјативистик еффектләри өзүндә әкс етдирмәјән Шрединкер нәзәријјәси спектр хәтләринин инчә гурулушуну изаһ едә билмир. Һидрокен атомунун дүзкүн нәзәријјәси јалныз Дирак тәнлији васитәсилә гурула билир. Лакин Дирак тәнлијинин Кеплер мәсәләси үчүн һәлли мүрәккәб ријази һесабламаларла әлагәдардыр. Ондан алынан нәтичәләрә кифајәт гәдәр јахын нәтичәләрә (74.18) тәнлији васитәсилә дә кәлмәк олур.

Бахылан һалда харичи електромагнит саһәси олмадығындан ($\vec{H}=0$, $\vec{A}(x)=0$) (74.18) тәнлијинин сағ тәрәфиндә јалныз биринчи үч һәдд галыр. Јухарыда гәбул етдијимиз ишарәләрә әсасән ону

$$E\Phi = \breve{H}\Phi$$

вә ја

$$E\Phi = (\breve{H}_o + \breve{H}_1 + \breve{H}_2 + \breve{H}_3)\Phi \tag{75.2}$$

шәклиндә јазаг.

Јухарыда көстәрдик ки, υ/c јахынлашмада Дирак тәнлији Паули тәнлијинә кечир. Харичи магнит саһәси олмадығда исә Паули тәнлијинин Һамилтон оператору Шрединкер Һамилтон оператору үзәринә дүшүр, јә'ни $\breve{H}_o^{п} = H_o^{ш} = \breve{H}_o$ олур. $\breve{H}_1, \breve{H}_2, \breve{H}_3$ операторларына ујғун кәмијјәтләр исә υ^2/c^2 тәртибли кичик кәмијјәтләрдир. Она көрә дә (75.2) тәнлијини һәлл етмәк үчүн стасионар һәјәчанланма нәзәријјәсини тәтбиг етмәк вә биринчи јахынлашма илә кифајәтләнмәк олар. Лакин, бахылан һалда сыфырынчы јахынлашманын далға функсијалары олараг Шрединкер тәнлијинин һәлләри олан

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{75.3}$$

функсијаларыны јох, спини нәзәрә алмагла тапылмыш ики компонентли (72.24) вә (72.25) функсијаларыны көтүрмәк лазымдыр:

$$\Psi_{nlm}^{(J)} = R_{nl}(r)Y_{lm}^{(J)}(\theta,\varphi). \tag{75.4}$$

Бу онунла әлагәдардыр ки, (75.3) функсијалары (75.2) тәнлијинә дахил олан $\breve{H}_2$ спин-орбитал гаршылыглы тә'сир оператору илә коммутасија етмәјән $\breve{L}_z$ операторунун мәхсуси функсијалары олдуғу һалда, (75.4) функсијалары исә $\breve{H}_2$ илә коммутасија едән там момент операторунун $\breve{J}_z$ компоненти операторунун мәхсуси функсијаларыдыр. Бу бахымдан спектрин инчә гурулушунун һесабланмасы үчүн (75.3) јох, (75.4) функсијалары көтүрүлмәлидир. Беләликлә фәрз олунур ки, сыфырынчы јахынлашмада $\Psi_{nlm}^{(J)}(\theta,r,\varphi)$ функсијалары

$$E^o\Psi^{(J)} = \breve{H}_o\Psi^{(J)}$$

вә ја

$$(E^o - e\varphi)\Psi^J = \frac{\breve{p}^2}{2m_o}\Psi^{(J)} \tag{75.5}$$

тәнлијинин һәлләридир. Онда $R_{nl}(r)$ функсијалары (40.37) илә верилир. (75.2) тәнлијиндә $V = \breve{H}_1 + \breve{H}_2 + \breve{H}_3$ операторуна һәјәчанланма оператору кими бахдығда, енержијә биринчи тәртиб дүзәлиш

$$E^{(1)} = \int \Psi^{+(J)} V \Psi^{(J)}(d\vec{r}) = \int \Psi^{+(J)}\breve{H}_1\Psi^{(J)}(d\vec{r}) + $$
$$+\int \Psi^{+(J)}\breve{H}_2\Psi^{(J)}(d\vec{r}) + \int \Psi^{+(J)}\breve{H}_3\Psi^{(J)}(d\vec{r}) \tag{75.6}$$

кими һесабланар.

а) Релјативистик дүзәлиш. Бу дүзәлиши һесабламаг үчүн (75.5) тәнлијиндән истифадә едәк. Дүзәлиши һәр һансы ихтијари (n,l,m) һалына һесабламыш олсаг, (75.5) тәнлијиндәки E^o кәмијјәти гејри-релјативистик јахынлашмада һесабланан вә (75.1) ифадәси илә верилмиш бахылан һалын E_n^o енержиси үзәринә дүшәр. $\Psi^{(J)}$ функсијалары һәјәчанланмамыш системин, јахуд $\breve{H}_o = \dfrac{\breve{p}^2}{2m_o} + e\varphi$ операторунун мәхсуси функсијалары олдуғундан

$$E_1^{рел} = -\int \Psi^{+(J)}\frac{\breve{p}^4}{8m_o^3c^2}\Psi^{(J)}(d\vec{r}) = -\frac{1}{2m_oc^2}\int \Psi^{+(J)}(E_n^o - e\varphi)^2\Psi^{(J)}(d\vec{r}) \tag{75.7}$$

алынар. Нүвәнин Кулон саһәсиндәки һәрәкәти үчүн $e\varphi = -\dfrac{Ze^2}{r}$ олдуғундан (75.7)-дә $E_n^o - e\varphi$ кәмијјәти јалныз r-ин мүтләг гијмәтиндән асылы олур. Онда бучаглара көрә интеграл

$$\int Y_{lm}^{+(J)}(\theta,\varphi)Y_{lm}^{(J)}(\theta,\varphi)d\Omega = 1$$

вә

$$E_1^{рел} = -\frac{1}{2m_oc^2}\int R_{nl}\left(E_n^o + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 R_{nl}r^3dr = -\frac{1}{2m_oc^2}(E_n^{o2} + 2E_n^oZe^2\overline{r^{-1}} + Z^2e^4\overline{r^{-2}})$$

олур. $\overline{r^{-1}}$ илә $\overline{r^{-2}}$-нин (40.46) илә верилмиш

$$\overline{r^{-1}} = \frac{Z}{a}\frac{1}{n^2} = \frac{2R\hbar Z}{e^2n^2}, \quad \overline{r^{-2}} = \left(\frac{Z}{a}\right)^2\frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)} = \frac{2RZ^2m_o}{\hbar n^3(l+\frac{1}{2})}$$

гијмәтләрини јухарыда јеринә јазсаг,

$$E_1^{рел} = E_{nl}^{рел} = -\frac{R\hbar Z^4\alpha^2}{n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right) \tag{75.8}$$

алырыг, бурада $\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c} \approx \dfrac{1}{137}$ –инчә гурулушу сабитидир.

б) Спин-орбитал гаршылыглы тә'сирә ујғун дүзәлиш. Әввәлчә мәркәзи саһәдәки һәрәкәт үчүн $\breve{H}_2$ операторунун шәклини дәјишәк. Спин операторунун $\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, нүвәнин Кулон саһәси үчүн $\varphi=\frac{Ze}{r}$ вә $\vec{\mathcal{E}}=-\mathrm{grad}\varphi=\frac{Ze\vec{r}}{r^3}$ (бурада e–електронун јүкүдүр) олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\breve{H}_2=\frac{Ze^2}{2m_o^2c^2}\frac{(\breve{\vec{S}}\breve{\vec{L}})}{r^3} \tag{75.9}$$

шәклинә дүшүр, бурада $\breve{\vec{L}}=\left[\vec{r}\breve{\vec{p}}\right]$ – орбитал һәрәкәт мигдары моменти операторудур. Бурадан көрүнүр ки, $\breve{H}_2$-и $\breve{\vec{S}}$ спин вә $\breve{\vec{L}}$ орбитал моменти операторлары илә тә'јин олунур, буна көрә дә $\breve{H}_2$ спин-орбитал гаршылыглы тә'сир оператору адланыр. Она ујғун дүзәлиш

$$E_2^{c.o.}=\int\Psi^{+(J)}H_2\Psi^{(J)}(d\vec{r})=\frac{Ze^2}{2m_o^2c^2}\overline{r^{-3}}\int Y_{lm}^{(J)}(\breve{\vec{S}}\breve{\vec{L}})Y_{lm}^{J}d\Omega$$

олар. Бурада $\overline{r^{-3}}=\int R_{nl}\breve{r}^{-3}R_{nl}r^2dr$ -дир вә (40.46)-ја әсасән

$$\overline{r^{-3}}=\left(\frac{Z}{a}\right)^3\frac{1}{n^3l(l+\frac{1}{2})(l+1)}$$

бәрабәрдир.

Бурада (71.9)-дан

$$\breve{\vec{L}}\breve{\vec{S}}=\frac{1}{2}(\breve{J}^2-\breve{L}^2-\breve{S}^2)$$

бәрабәрлијиндән истифадә едиб, $\breve{J}^2,\breve{L}^2$ вә $\breve{S}^2$ операторларынын ејни $Y_{lm}^{(J)}(\theta,\varphi)$ мәхсуси функсијалара малик олдуғуну нәзәрә алсаг, спин-орбитал гаршылыглы тә'сир енержиси үчүн

$$E_2^{c.o.}=\frac{\hbar^2Z^2e^2}{4m_oc^2}\overline{r^{-3}}\left[j(j+1)-l(l+1)-l_s(l_s+1)\right],\ l\neq 0$$

$$E_2^{c.o.}=0,\ l=0$$

алыныр. $\overline{r^{-3}}$-ү гијмәтилә әвәз етдикдә

$$E_2^{c.o.}=\frac{R\hbar Z^4\alpha^2}{2n^3}\frac{\left[j(j+1)-l(l+1)-l_s(l_s+1)\right](1-\delta_{lo})}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \tag{75.10}$$

бурада

$$\delta_{lo}=\begin{cases}1, & l=0\\ 0, & l\neq 0\end{cases}$$

вә квадрат мө'тәризә

$$j(j+1)-l(l+1)-l_s(l_s+1)=\begin{cases}l, & j=l+l_s\\ -(l+1), & j=l-l_s\end{cases} \tag{75.11}$$

в) Контакт гаршылыглы тә'сирә ујғун дүзәлиш.

$$E_3^k=\int\Psi^{+(J)}\breve{H}_3\Psi^{(J)}(d\vec{r})=\frac{\hbar^2e}{8m_o^2c^2}\int\Psi^{+(J)}\nabla^2\varphi\Psi^{(J)}(d\vec{r}). \tag{75.12}$$

Нүвәнин Кулон саһәсинин мәркәзи саһә олмасы фәрзијјәсинә әсасән нүвәјә нөгтәви јүк кими бахмаг олар. Нөгтәви јүкүн јаратдығы саһәнин потенсиалы исә Пуассон тәнлији илә тә'јин олунур:

$$\nabla^2\varphi=-4\pi\rho(\vec{r})=-4\pi e\delta(\vec{r}).$$

Буну (75.12)-дә јеринә јазыб, $\delta(\vec{r})$ функсијасы васитәсилә интеграл көтүрсәк,

$$E^k=\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m_o^2c^2}\left|\Psi^{(J)}(0)\right|^2 \tag{75.13}$$

аларыг. Бурада

$$\left|\Psi^{(J)}(0)\right|^2=\left|R_{nl}(0)\right|^2Y_{lm}^{+(J)}Y_{lm}^{(J)}.$$

R_{nl} – радиал функсијанын (40.37) ифадәсиндән

$$R_{nl}(0)=\frac{2}{n^{3/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\delta_{lo}$$

вә $l=0$ олдугда исә $Y_{lm}^{(J)}=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$ олур. Онда

$$|\Psi^{(J)}(0)|^2=\frac{1}{\pi\cdot n^3}\left(\frac{Z}{a}\right)^3.$$

Буну (75.13)-дә јеринә јазсаг, контакт гаршылыглы тә'сир енержиси үчүн

$$E_3^k=\frac{R\hbar Z^4\alpha^2}{n^3}\delta_{lo} \tag{75.14}$$

аларыг. (75.10) вә (75.14) ифадәләрини топлајыб (75.11) бәрабәрлијини нәзәрә алсаг, релјативистик еффектә вә еләчә дә спин-орбитал вә контакт гаршылыглы тә'сирә ујғун әлавә енержи

$$E_{nj}^{(1)}=E_1^{рел}+E_2^{c.o.}+E_3^k=-\frac{R\hbar Z^4\alpha^2}{n^4}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right) \tag{75.15}$$

олар. Беләликлә һидрокен вә һидрокенәбәнзәр атомларын енержи спектри үчүн

$$E_{nlj}=E_{nl}^{o}+E_{nj}^{(1)}=-\frac{R\hbar Z^2}{n^2}\left[\,1+\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right] \tag{75.16}$$

гијмәти алыныр. Бурадан көрүнүр ки, спектрал хәтләрин парчаланмасы икинчи һәдлә тә'јин олунур вә парчаланмыш хәтләр арасындакы мәсафә инчә гурулуш сабити α-нын квадраты илә мүтәнасибдир.

г) **Спектрин инчә гурулушу**. (75.16) ифадәси Дирак тәнлијинин дәгиг һәлли васитәси илә алынмыш ујғун ифадәдән υ^4/c^4 вә даһа јүксәк тәртибли һәдләрлә фәргләнир*. Електронун атомдакы сүр'әтләри үчүн исә онларын еlә бир бөјүк әһәмијјәти јохдур.

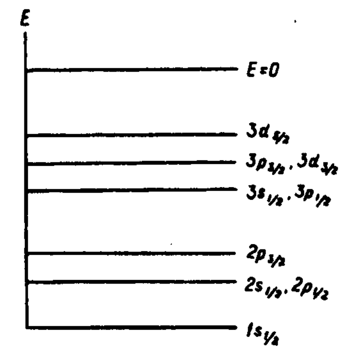
* Доғрудан да, Дирак тәнлијинин дәгиг һәллиндән алынан

$$E_{nlj}=m_oc^2\left[\,1+\frac{\alpha^2Z^2}{\left[\,n-j+\frac{1}{2}+\sqrt{(j+\frac{1}{2})-\alpha^2Z^2}\,\right]}\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{75.17}$$

ифадәсини α^2Z^2-ын үстләринә көрә сыраја ајырыб, биринчи ики һәдлә кифајәтләндикдә (75.16) ифадәси алыныр.

Атомун стасионар һаллары үчүн алынмыш (75.16) ифадәсиндән көрүнүр ки, спектрал хәтләрин инчә гурулушу јалныз j дахили квант әдәдиндән асылыдыр. Атомун s сәвијјәләри инчә гурулуша малик дејилдир, чүнки $l=0$ оланда j јалныз $j=\frac{1}{2}$ гијмәтини алыр. Бүтүн башга сәвијјәләр, l -ин верилмиш гијмәтиндә $j=l\pm\frac{1}{2}$ гијмәтләрини алдығындан, ики сәвијјәјә парчаланыр. Доғрудан да, $n=1$, $l=0$ вә $j=\frac{1}{2}$ олур. Бу үч әдәдә атомун јеканә бир $1s_{1/2}$ сәвијјәси ујғун кәлир. $n=2$ оланда исә l орбитал квант әдәди $l=0$ вә $l=1$ гијмәтләрини алыр. Бурада $2s_{1/2}$ сәвијјәси парчаланмыр. $l=1$ оланда исә $j=l\pm\frac{1}{2}=3/2$ вә $j=l-\frac{1}{2}=\frac{1}{2}$ кими ики гијмәт алыр вә атомун бу сәвијјәси $2p_{1/2}$ вә $2p_{3/2}$ кими ики сәвијјәјә парчаланыр вә и.а. (шәкил 33). Беләә парчаланмаја сәвијјәләрин *мултиплетлији* дејилир.

§40-да көрдүк ки, һидрокен атомунун n вә l-ин верилмиш гијмәтләринә ујғун сәвијјәси магнит квант әдәдинә көрә $2l+1$ дәфә чырлашмыш олур. Сәвијјәнин инчә гурулушу нәзәрә алындыгда онун чырлашма тәртиби бир гәдәр дәјишир. Бахылан һалда l-ин верилмиш гијмәтиндә $j=l\pm\frac{1}{2}$ кими ики гијмәт, m_j магнит квант әдәди исә $-j, \ldots, \frac{1}{2}, \ldots, +j$ кими $2j+1$ мүхтәлиф гијмәтләр алыр. Беләликлә nl сәвијјәсинин чырлашма тәртиби $2l+1$ јох, $2(2l+1)$-ә бәрабәр олур.



Шәкил 33. Һидрокен атомунун енержи сәвијјәләринин инчә гурулушу (мултиплетлији).

Доғрудан да, $n=1$, $l=0$ сәвијјәсинин чырлашма тәртиби $j=\frac{1}{2}$, $m_j=\pm\frac{1}{2}$ олдуғундан 2, $n=2$, $l=1$ сәвијјәсинин чырлашма тәртиби исә $j=\frac{1}{2}$, $m_j=\pm\frac{1}{2}$ вә $j=\frac{3}{2}$, $m_j=-\frac{3}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2}$ олдуғундан 6-ја бәрабәр олур вә и.а.

Спектрал хәтләрин парчаланма тәртибини (инчә гурулушуну) һесабламаг үчүн сечмә гајдаларындан истифадә етмәк лазымдыр. *n*, *l* вә *m* үчүн сечмә гајдалары §42-дә алынмышды: Δn-истәнилән, $\Delta l = \pm 1$ вә $\Delta m = 0, \pm 1$. Бу гајдалара вә $l = j \pm \frac{1}{2}$, $m_l = m \pm \frac{1}{2}$ бәрабәрликләри әсасында j вә m_j үчүн $\Delta j = 0, \pm 1$ вә $\Delta m_j = 0, \pm 1$ сечмә гајдалары алыныр. Демәли, мүмкүн олан кечидләри мүәјјән етмәк үчүн Δn истәнилән,

$$\Delta l = \pm 1, \ \Delta j = 0, \pm 1$$
$$\Delta m = 0, \pm 1, \Delta m_j = 0, \pm 1 \qquad (75.18)$$

сечмә гајдаларындан истифадә етмәк лазымдыр.

Лајман серијасынын һәр истәнилән (n, l=1) сәвијјәсиндән (n=1, l=0) сәвијјәсинә кечидләрә ујғун һәр бир хәтти $np_{1/2}$-дән $1s_{1/2}$ вә $np_{3/2}$ -дән $1s_{1/2}$ сәвијјәсинә кечидләрлә јаранан ики хәттә парчаланыр. Символик олараг бу хәтләри

$$\omega^{(1)} = (1s_{1/2}) - (np_{1/2}); \ \omega^{(2)} = (1s_{1/2}) - (np_{3/2}) \qquad (75.19)$$

кими көстәрирләр. Ејнилә (n, l=0,1,2) сәвијјәләриндән (n=2, l=0,1) сәвијјәләрә кечидләрә ујғун Балмер серијасы үчүн ашағыдакы парчаланмалары алырыг:

$$\omega^{(1)} = (2s_{1/2}) - (np_{1/2}); \ \ \omega^{(2)} = (2s_{1/2}) - (np_{3/2});$$
$$\omega^{(3)} = (2p_{1/2}) - (ns_{1/2}); \ \ \omega^{(4)} = (2p_{1/2}) - (nd_{3/2}); \qquad (75.20)$$
$$\omega^{(5)} = (2p_{3/2}) - (ns_{1/2}); \ \omega^{(6)} = (2p_{3/2}) - (nd_{3/2});$$
$$\omega^{(7)} = (2p_{3/2}) - (nd_{5/2}).$$

Релјативистик вә спин еффектләринин тәзаһүрү нәтичәси кими спектрал хәтләрин инчә гурулушунун изаһы Дирак нәзәријјәсинин ән мүһүм мүвәффәгијјәтләриндән бири иди. Лакин нәзәријјәнин тәчрүбә илә даһа дигтәтли мүгајисәси көстәрди ки, онлар арасында там ујғунлуг мөвчуд дејилдир.

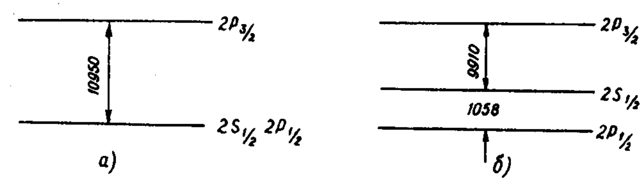
(75.16) дүстурундан вә шәкил 33-дән көрүндүјү кими Дирак нәзәријјәсинә көрә $2s_{1/2}$ вә $2p_{1/2}$ сәвијјәләри там мә'насы илә бир-биринин үзәринә дүшүр:

$$E_{20\frac{1}{2}} = E_{21\frac{1}{2}} = \frac{R}{4}\left(1 + \frac{5\alpha^2}{16}\right). \qquad (75.21)$$

Лакин 1947-чи илдә Лемб вә Ризерфорд радиоспектроскопија методларынын көмәји илә һидрокен атомунда $2s_{1/2}$ вә $2p_{1/2}$ сәвијјәләринин енержиләри арасындакы фәрги өлчә билмиш вә көстәрмишдиләр ки,

$2s_{1/2}$ сәвијјәси $2p_{1/2}$ сәвијјәсинә нисбәтән тәхминән $\frac{1}{10}\frac{R\alpha^2}{16}$ гәдәр јухарыда јерләшир. Буна *Лемб сүрүшмәси* дејилир (бах: §80). Шәкил 34-дә. $2p_{1/2}$, $2s_{1/2}$, вә $2p_{3/2}$ сәвијјәләри үчүн Дирак нәзәријјәсиндә, Лемб вә Ризерфорд тәчрүбәләриндә алынан нисби вәзијјәтләри көстәрилмишдир, онлар арасындакы фәрг мегаһерсләрлә көстәрилир. Тәчрүбә илә нәзәријјә арасындакы бу ујғунсузлуг јалныз квант електродинамикасында изаһ олунур вә о, вахтилә ахырынчынын сүр'әтлә инкишафына сәбәб олмушдур.

§50-нин г) бәндиндә көстәрдик ки, електромагнит саһәсинин һәр бир квант һалында реал (енинә) фотонларын сајы сыфра бәрабәр оларса, саһәнин белә һалы **електромагнит саһәсинин вакууму** вә јахуд **виртуал фотонлар саһәси** адланыр. Илк дәфә 1947-чи илдә Н.Бете нәзәри олараг көстәрди ки, Лемб сүрүшмәси електромагнит саһәси вакуумунун атомун $2s_{1/2}$ сәвијјәсиндә олан електрона тә'сири нәтичәсидир. Саһәнин вакууму илә електронлар арасындакы гаршылыглы тә'сир виртуал фотонларла дашыныр. Нәзәријјәдән Лемб сүрүшмәси үчүн 1040 мегаһерс алыныр, бу да тәчрүбәдән алынан гијмәтә (1058 мегаһерс) олдугча јахындыр.



Шәкил 34. Һидрокен атомунун $2s$ вә $2p$ сәвијјәләринин Дирак нәзәријјәсиндә (а) вә Лемб-Ризерфорд тәчрүбәсиндә алынан (б) нисби вәзијјәтләри.

г) Ифрат инчә гурулуш. Електронун сферик симметрик Кулон саһәсиндә һәрәкәтини тәдгиг етдикдә көстәрдик ки, атомун енержиси там моментин проjексијасыны характеризә едән m_j квант әдәдиндән асылы дејил, там моментин мүтләг гијмәтини тә'јин едән j квант әдәдиндән асылыдыр. Она көрә дә атомун һәр бир енержи сәвијјәси ($2j$+1) тәртибдән чырлашмышдыр. Бу чырлашма јалныз саһәнин мәркәзилик (сферик симметриклик) шәрти позуланда јох (бах: §89), атомун нүвәси магнит моментинә малик олдугда да ортадан көтүрүлүр. Адәтән реал атомларын әксәријјәтинин нүвәси магнит моментинә маликдир. Белә атомларда онун електронлары илә нүвәнин магнит моменти арасында гаршылыглы тә'сир мејдана чыхыр вә о, електрон нүвәјә јахын олдугча күчлү олур. Нүвә магнетону електрон магнетонундан тәхминән мин дәфә кичик олдуғундан атомун сәвијјәләринин ифрат инчә гурулушу (гоншу сәвијјәләр арасындакы мәсафә) сәвијјәләрин инчә гурулушундан бир о гәдәр кичик олмалыдыр.

Бахылан еффектин кичиклијини вә нүвәјә јахын олан електронлар үчүн онун нисбәтән бөјүк гијмәт алдығыны нәзәрә алараг, садәлик наминə, јалныз һидрокен атомунун s сəвијјəсинин ифрат инчə гурулушуну өјрəнмəклə кифајəтлəнмəк олар. Бу һалда електронун вə сүкунəтдəки нүвəнин магнит моментлəри спин магнит моментлəри олдуғундан, атом сəвијјəлəринин ифрат инчə гурулушунун тəдгигини Паули јахынлашмасында апармаг олар.

Ики зəррəчијин спин магнит моментлəри арасындакы гаршылыглы тə'сирə, онлардан биринин (дејəк ки, протонун) магнит моментинин јаратдығы магнит саһəсиндə дикəринин һəмин саһə илə гаршылыглы тə'сири кими бахмаг олар. (61.5) əсасəн белə гаршылыглы тə'сир оператору

$$H^{маг} = \frac{e}{mc}(\vec{A}\breve{\vec{p}} + \vec{S}\vec{H}) \qquad (75.22)$$

шəклиндəдир. Бурада $\vec{A}$ – нүвəнин магнит моменти саһəсинин вектор потенсиалы, $\vec{H}$ – һəмин саһəнин интенсивлији, $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ електронун спин операторудур.

Атом нүвəсинин $\vec{\mu}$ магнит моментинə нөгтəви магнит диполу кими бахсаг, онун јаратдығы саһəнин вектор потенсиалы

$$\vec{A} = \frac{[\vec{\mu}\vec{r}]}{r^3} = -\left[\vec{\mu}\vec{\nabla}\frac{1}{r}\right]$$

кими тə'јин олунар. Саһəјə ујғун интенсивлик вектору

$$\vec{H} = \mathrm{rot}\vec{A} = -\left[\vec{\nabla}\left[\vec{\mu}\vec{\nabla}\frac{1}{r}\right]\right] = -\vec{\mu}\nabla^2\frac{1}{r} + (\vec{\mu}\vec{\nabla})\vec{\nabla}\frac{1}{r}. \qquad (75.23)$$

Буну (75.22)-дə јазсаг,

$$\breve{H}^{маг} = \frac{e}{mc}\left\{(\breve{\vec{p}}\left[\vec{\mu}_p\vec{\nabla}\frac{1}{r}\right]) + (\vec{\mu}_p\vec{\nabla})(\vec{S}\vec{\nabla}\frac{1}{r}) - (\vec{S}\vec{\mu}_p)\vec{\nabla}\frac{1}{r}\right\}$$

вə ја

$$\breve{H}^{маг} = \frac{e}{mc}\left\{-\frac{\vec{\mu}_p\breve{\vec{L}}}{r^3} + (\vec{\mu}_p\vec{\nabla})(\vec{S}\vec{\nabla}\frac{1}{r}) - (\vec{S}\vec{\mu}_p)\vec{\nabla}^2\frac{1}{r}\right\} \qquad (75.24)$$

олар. Бурада $\breve{\vec{L}} = \left[\vec{r}\breve{\vec{p}}\right]$ – електронун орбитал моменти операторудур, $\vec{\mu}_p$ – протонун магнит моментидир.

Атомун енержисинə əлавəни биринчи јахынлашмада һесабламаг истəсəк, $\breve{H}^{маг}$ операторунун бу гаршылыглы тə'сирə нəзəрəн һəјəчанланмамыш системин (40.40) далға функсијаларына көрə орта гијмəтини көтүрмəк лазымдыр. Бу орта гијмəт s сəвијјəси үчүн һесабландыгда, (75.24) ифадəсиндə биринчи һəдд сыфра бəрабəр олур. Дикəр тəрəфдəн нүвəнин магнит моменти оператору $\vec{\mu}_p = \mu_p\vec{\sigma}'_p$ вə електронун магнит моменти оператору $\vec{\mu} = \mu_Б\vec{\sigma}'$ олдуғуну нəзəрə алсаг,

$$H^{маг} = \mu_p\mu_Б\left\{(\vec{\sigma}'_p\vec{\nabla})(\vec{\sigma}\vec{\nabla}\frac{1}{r}) - (\vec{\sigma}'_p\vec{\sigma}')\nabla^2\frac{1}{r}\right\} \qquad (75.25)$$

олар, бурада $\vec{\sigma}'$ – Паули матрисалары, $\mu_p = \frac{e\hbar}{2M_pc}$ — нүвə, $\mu = \frac{e\hbar}{2m_ec}$ — Бор магнитону, M_p—протонун күтлəсидир.

$\breve{H}^{маг}$ -ин орта гијмəтиндəки интеграл $\vec{\mu}_p$ вə $\vec{\mu}_Б$ моментлəринин нисби јөнүндəн асылы олур. Фəзада сечилмиш истигамəт олмадығына көрə (харичи саһə јохдур) (75.25)-дəки биринчə һəдди бу векторларын истигамəтлəри үзрə орта гијмəти илə əвəз етмəк олар

$$(\vec{\sigma}'_p\vec{\nabla})(\vec{\sigma}\vec{\nabla}\frac{1}{r}) \approx \frac{1}{3}(\vec{\sigma}'_p\vec{\sigma}')\nabla^2\frac{1}{r} \qquad (75.26)$$

вə нөгтəви јүкүн саһəсиндə

$$\nabla^2\frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r})$$

олдуғундан

$$\bar{H}^{маг} = -\frac{8\pi}{3}\mu_p\mu_Б(\vec{\sigma}'_p\vec{\sigma}')\delta(\vec{r}). \qquad (75.27)$$

Електронун вə протонун $\vec{\sigma}'$ операторлары васитəси илə системин там спин операторуну гурмаг олар:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}(\vec{\sigma}'_p + \vec{\sigma}'), \qquad (75.28)$$

онун квадратынын мəхсуси гијмəти

$$S^2 = \hbar^2 S(S+1)$$

вə ја (75.28)-дəн

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\vec{\sigma}'^2_p + \vec{\sigma}'^2 + 2\vec{\sigma}'_p\vec{\sigma}')$$

олар, бурада $\vec{\sigma}'^2 = 3$ олдуғундан

$$2S(S+1) = 3 + \vec{\sigma}'_p\vec{\sigma}'$$

вә ја

$$\vec{\sigma}'_p\vec{\sigma}' = 2S(S+1) - 3 \qquad (75.29)$$

олар. (75.29)-у (75.28)-дә јазыб, $\breve{H}^{\text{маг}}$ орта гијмәтини һесабласаг,

$$\Delta E^{\text{иф.и.г.}} = \int \Psi^*_{nlm} H^{\text{маг}} \Psi_{nlm}(d\vec{r}) = \frac{8\pi}{3}\mu_p\mu_Б\left[2S(S+1)-3\right]\int \Psi^*_{nlm}\Psi_{nlm}\delta(\vec{r})(d\vec{r})$$

олар. Бурада

$$\int \Psi^*_{nlm}(\vec{r})\Psi_{nlm}(\vec{r})\delta(\vec{r})(d\vec{r}) = \left|\Psi_{nlm}(0)\right|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a^3}$$

олудуғундан,

$$\Delta E^{\text{иф.и.г.}} = \frac{8}{3}\frac{\mu_p\mu_Б}{n^3a^3}\left[2S(S+1)-3\right] \qquad (75.30)$$

олар, n–баш квант әдәди, $a = \dfrac{\hbar^2}{m_e c^2}$ – биринчи Бор орбитинин радиусудур.

Бурада ики һалы фәргләндирмәк олар:

а) Протон вә електронун спинләри антипаралелдир, онда S=0 вә

$$\Delta E^{\text{иф.и.г.}}_{s=0} = -8\mu_p\mu_Б\frac{1}{n^3a^3} \qquad (75.31)$$

б) Спинләр паралелдир, S=1

$$\Delta E^{\text{иф.и.г.}}_{s=1} = \frac{8}{3}\cdot\frac{\mu_p\mu_Б}{n^3a^3}. \qquad (75.32)$$

(75.31) илә (75.32) ифадәләри арасындакы фәрг атомун s сәвијјәсинин ифрат инҹә гурулушуну верир:

$$\omega^{\text{иф.и.г.}} = \frac{\Delta E^{\text{иф.и.г.}}_{s=1} - \Delta E^{\text{иф.и.г.}}_{s=0}}{\hbar} = \frac{32}{3}\frac{\mu_p\mu_Б}{\hbar n^3a^3}. \qquad (75.33)$$

Атомун нүвәјә ән јахын $1s$ сәвијјәси (n=1) үчүн нәзәри фәрг

$$\Delta\omega^{\text{нәз}} = 1417\,Mhc$$

бәрабәрдир. Бу фәргин тәҹрүби гијмәти исә

$$\Delta\omega^{\text{тәҹ}} = 1420\,Mhc.$$

Мүасир тәҹрүбәләр (75.33) дахил олан кәмијјәтләри олдугҹа дәгиг өлчмәјә имкан вердијинә көрә тәҹрүбә илә нәзәријјә арасындакы фәрги јалныз електромагнит саһәсинин вакуум һалынын електрона етдији тә'сир нәтиҹәсиндә (бах: Лемб сүрүшмәси) електронун магнит моментинин бир Бор магнетону $\mu_Б$ -дән әлавә кичик $\mu_{ан}$ аномал магнит моментинә дә малик олмасы илә изаһ етмәк мүмкүн олмушдур. Нәзәријјәјә көрә електронун магнит моменти

$$\mu_{ел} = \mu_Б + \mu_{ан}$$

бәрабәрдир. $\mu_{ан}$ исә $\mu_{ан} = 0{,}00116\mu_Б$ -јә бәрабәрдир. Бу һалда нәзәријјә илә тәҹрүбәнин нәтиҹәләри дәгиг бир-биринин үзәринә дүшүр.

IX ФӘСИЛ

МАГНИТ ВӘ ЕЛЕКТРИК САҺӘЛӘРИНДӘ ҺӘРӘКӘТ

§ 76. ЕЛЕКТРОНУН БИРҸИНС МАГНИТ САҺӘСИНДӘ ҺӘРӘКӘТИ

Сәрбәст електронун харичи магнит саһәсиндә һәрәкәтини Паули јахынлашмасында тәдгиг етмәклә кифајәтләнәҹәјик, чүнки белә бахыш онун әсас хүсусијјәтләрини ајдынлашдырмаға имкан верир. Һәрәкәтин тәнлијини алмаг үчүн (61.1)-дә (§61, Паули тәнлији) $V(r) = 0$, $\varphi = 0$ көтүрмәк лазымдыр:

$$\left\{ \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + \frac{e\hbar}{2\mu c}H\sigma'_z \right\}\Psi = E\Psi \qquad (76.1)$$

вә ја

$$\frac{1}{2\mu}\left[\hat{\vec{p}}^2 - \frac{2e}{c}\vec{A}\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}(\hat{\vec{p}}\vec{A}) + \frac{e^2A^2}{c^2}\right] + \frac{e\hbar}{2\mu c}H\sigma'_z\Psi = E\Psi \qquad (76.1')$$

Бурада $(\hat{\vec{p}}\vec{A})$ — мө'тәризәси $\hat{\vec{p}}$ операторунун јалныз $\vec{A}$ -ја тә'сир етдијини көстәрир.

Бирҹинс магнит саһәсинин z оху бојунча јөнәлдијини фәрз етсәк, $H_x = H_y = 0$, $H_z = H$ олар вә $\vec{A}$ вектор-потенсиал

$$A_x = -yH, \qquad A_y = A_z = 0$$

кими сечилә биләр. Онда $\hat{\vec{p}}\vec{A} = -i\hbar\,\mathrm{div}\,\vec{A} = 0$ вә (76.1) тәнлији

$$\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} + \frac{eH}{\mu c}y\hat{p}_x + \frac{e^2H^2}{2\mu c^2}y^2 + \frac{e\hbar}{2\mu c}H\sigma'_z\right)\Psi = E\Psi \qquad (76.2)$$

шәклинә дүшәр. Бу тәнлији, мәркәзи саһәдәки һәрәкәти тәсвир едән (39.2′) тәнлији кими дәгиг һәлл етмәк олар. (76.2) тәнлијинин сол тәрәфиндә дајанан

$$\breve{H}=\frac{\breve{\vec{p}}^2}{2\mu}+\frac{eH}{\mu c}y\breve{p}_x+\frac{e^2H^2}{2\mu c^2}y^2+\frac{e\hbar}{2\mu c}H\sigma'_z \qquad (76.3)$$

Һамилтон оператору $\breve{p}_x,\breve{p}_z,\sigma'_z$ операторлары илә коммутасија етдијиндән (76.2) тәнлијинин һәллини

$$\Psi(x,y,z,s_z)=\varphi(y)e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x+p_z z)}S_\alpha(s_z) \qquad (76.4)$$

шәклиндә ахтармаг олар, бурада $S_\alpha(s_z)-\sigma'_z$ операторунун, $e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x+p_z z)}$ исә $\breve{p}_x$ вә $\breve{p}_z$ операторларынын мәхсуси функсијаларыдыр. (76.4)-ү (76.2) тәнлијиндә јазсаг, $\varphi(y)$ функсијасы үчүн

$$\Big(\frac{\breve{p}_y^2}{2\mu}+\frac{p_x^2}{2\mu}+\frac{eH}{\mu c}yp_x+\frac{e^2H^2}{2\mu c}y^2\Big)\varphi(y)=\Big(E-\frac{p_z^2}{2\mu}-\frac{e\hbar}{2\mu c}\sigma'_z\Big)\varphi(y) \qquad (76.5)$$

тәнлији алыныр. Бурада

$$\frac{p_x^2}{2\mu}+\frac{eH}{\mu c}yp_x+\frac{e^2H^2}{2\mu c^2}y^2=\frac{\mu\omega_L^2}{2}(y+y_o)^2$$

$$y_o=\frac{cp_x}{eH},\ \omega_L=\frac{eH}{\mu c},\ y'=y+y_o,\ \varepsilon=E-\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma'_z \qquad (76.6)$$

әвәзләрини гәбул етдикдә, (76.5) тәнлији

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\varphi(y')}{dy'^2}+\frac{\mu\omega_L^2}{2}y'^2\varphi(y')=\varepsilon\varphi(y') \qquad (76.7)$$

шәклинә дүшүр, бурада ω_L – *тсиклик тезлик*, $\sigma'_z=\pm1$ спин операторунун мәхсуси гијмәтидир ($\frac{\hbar}{2}$ ваһидләриндә). (76.7) тәнлији хәтти осилјаторун §35-дә тәдгиг едилән тәнлијидир. Онун һәллиндән мәхсуси функсијалар вә мәхсуси гијмәтләр үчүн (бах §35)

$$\varphi_n(y')=e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi),\ \xi=\sqrt{\frac{m\omega_L}{h}}\,y' \qquad (76.8)$$

$$\varepsilon_n=\hbar\omega_L\Big(n+\frac{1}{2}\Big),\qquad n=0,1,2,... \qquad (76.9)$$

ифадәләри алыныр, бурада $H_n(\xi)$ ифадәси (35.30) илә верилмиш Ермит-Чебышов полиномудур. Беләликлә, спинә малик електронун харичи бирчинс магнит саһәсиндәки һәрәкәтинин енержи сәвијјәләри n, p_z, σ'_z кими үч квант әдәдиндән асылы олур. Доғрудан да (76.6) вә (76.9)-дан

$$E_{n,p_z,\sigma_z}=\hbar\omega_L\Big(n+\frac{1}{2}\Big)+\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma'_z \qquad (76.10)$$

олур. (76.10)-дакы биринчи һәдд саһәјә перпендикулјар мүстәвидә баш верән енинә (тсиклотрон) һәрәкәт енержисидир. О, n=0,1,2,... јә ујғун олараг дискрет дәјишир вә бу дискрет енержи сәвијјәләри *Ландау сәвијјәләри* адланыр. Икинчи һәдд електронун саһә истигамәтиндә јердәјишмә енержисидир. p_z квант әдәди $(-\infty,\infty)$ интервалында кәсилмәдән дәјишдијиндән, ујғун енержи сәвијјәләри кәсилмәз спектр тәшкил едир. Нәһајәт үчүнчү һәдд спин магнит моментинин магнит саһәси илә гаршылыглы тә'сир енержисидир вә $\sigma'_z=\pm1$ -ә ујғун олараг јалныз ики гијмәт ала биләр.

(76.4) вә (76.8)-дән (76.2) тәнлијинин мәхсуси функсијалары үчүн

$$\Psi_{n,p_z,p_x,\sigma_z}(x,y,z,s_z)=e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x+p_z z)}e^{-\frac{\xi^2}{2}}H_n(\xi)S_\alpha(s_z) \qquad (76.11)$$

ифадәси алыныр. (76.11) вә (76.10)-дан көрүнүр ки, бирчинс магнит саһәсиндә һәрәкәт едән електронун далға функсијасы дөрд квант әдәдиндән асылыдыр, енержи сәвијјәләри исә јалныз үч квант әдәди илә тә'јин олунур. $E_{np_z\sigma_z}$ енержиси p_x квант әдәдинин ишарәсиндән асылы дејил, лакин онун $(-\infty,\infty)$ интервалында алдығы мүхтәлиф гијмәтләрин һамысы үчүн ејни бир гијмәтә маликдир, демәли, һәр бир сәвијјә сонсуз тәртиб чырлашмышдыр. Дикәр тәрәфдән, $E_{np_z\sigma_z}$-ин енинә һәрәкәтә вә спинин варлығына ујғун олан һиссәси $\hbar\omega_L\big(n+\frac{1}{2}+\frac{\sigma_z}{2}\big)$-јә бәрабәрдир. σ_z=1 -дә n-нин $n-1$ -ә вә $\sigma_z=-1$ -дә n-ин n-ә ујғун сәвијјәләри ејни енержијә аид олур. Она көрә дә һәр бир енержи сәвијјәси һәтта p_x=0, p_z=0 да белә ики гат чырлашмыш олур. n=0, p_z=0, $\sigma_z=-1$-ә ујғун әсас сәвијјә исә чырлашмамышдыр.

$E_{np_z\sigma_z}$ енержи сәвијјәләри p_x вә σ'_z квант әдәдләринә көрә чырлашмыш олдуғундан, јалныз (76.11) илә верилмиш далға функсијалары јох, онларын p_x вә σ_z үзрә суперпозисијасы нәтичәсиндә алынан

$$\Psi_{np_z}(x,y,z)=\sum_{\sigma'_z}\int C(p_x)\Psi_{np_zp_x\sigma'_z}dp_x \qquad (76.12)$$

далға функсијалар чохлуғу да онун мәхсуси функсијаларыдыр.

§ 77. НОРМАЛ ЗЕЈЕМАН ЕФФЕКТИ

Бир оптик електрона малик атомларын харичи магнит саһәсиндәки һәрәкәтинин квант нәзәријјәси илә танныш олаг. Белә һәрәкәти ја (62.5) Клејн–Гордон–Фок (КГФ) вә ја да (61.14) Паули тәнлији илә тәсвир етмәк олар.

Әввәлчә КГФ-тәнлијинә мүрачиәт едәк. Саһәнин бирчинс олдуғуну гәбул етсәк, далға функсијанын замандан асылылығы,

$$\Psi(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}(E+\mu c^2)t} \qquad (77.1)$$

ифадәси илә верилләр. (77.1)-и (62.5)-дә јазсаг, $\Psi(\vec{r})$ үчүн

$$\left\{E-\frac{\breve{\vec{p}}^2}{2\mu}+V(r)-\frac{e}{\mu c}\vec{A}\breve{\vec{p}}+\frac{1}{2\mu c^2}\left[(E-V)^2-e^2A^2\right]\right\}\Psi=0 \quad (77.2)$$

тәнлији алынар, бурада $V=-e\varphi$ вә $\breve{\vec{p}}\vec{A}=-i\hbar\operatorname{div}\vec{A}=0$ көтүрүлмүшдүр. Тәнликдәки $(E-V)^2$ һәдди магнит саһәсиндән асылы дејил вә күтләнин сүр'әтдән релјативистик асылылығына, e^2A^2 һәдди исә зәррәчијин саһәјә перпендикулјар мүстәвидә тсиклик һәрәкәтинә кәтирир (бах §76). Һәр ики һәдд енержијә кичик релјативистик әлавә верир. Атомун енержи сәвијјәләринин садәчә сүрүшмәсинә кәтирән бу әлавәләри бахылан һалда нәзәрә алмамаг олар. Онда КГФ тәнлији магнит саһәсиндәки һәрәкәт үчүн јазылмыш Шрединкер тәнлији үзәринә дүшүр:

$$E\Psi=\left(\frac{\breve{\vec{p}}^2}{2\mu}+V-\frac{e}{\mu c}\vec{A}\breve{\vec{p}}\right)\Psi\,. \qquad (77.3)$$

z охуну магнит саһәси истигамәтиндә јөнәлдиб, бирчинс магнит саһәси үчүн доғру олан

$$\vec{A}=\frac{1}{2}\left[\vec{H}\vec{r}\right]$$

ифадәсиндән

$$A_x=-\frac{1}{2}yH_z=-\frac{1}{2}yH, \qquad (77.3')$$

$$A_y=\frac{1}{2}xH_z=\frac{1}{2}xH,$$

$$A_z=0$$

олдуғундан

$$\frac{e}{\mu c}\vec{A}\breve{\vec{p}}=\frac{eH}{2\mu c}(x\breve{p}_y-y\breve{p}_x)=\frac{eH}{2\mu c}\breve{L}_z \qquad (77.3'')$$

алынар. Онда (77.3) тәнлији

$$E\Psi=\left(\frac{\breve{\vec{p}}^2}{2\mu}+V(r)-\frac{eH}{2\mu c}\breve{L}_z\right)\Psi \qquad (77.4)$$

шәклә дүшәр.

$$\breve{H}_o=\frac{\breve{\vec{p}}^2}{2\mu}+V(r)$$

харичи саһә олмадыгда атомун Һамилтон операторунун мәхсуси функсијалары §40-дан бизә мә'лумдур:

$$\Psi_{nlm}=R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}\,. \qquad (77.5)$$

$\breve{H}_o$ оператору орбитал һәрәкәт мигдары моментинин z оху истигамәтиндәки пројексијасына ујғун $\breve{L}_z$ оператору илә коммутасија етдијинә көрә онлар ејни мәхсуси функсијалара маликдир:

$$\breve{L}_z\Psi_{nlm}=\hbar m\Psi_{nlm}\,. \qquad (77.6)$$

(77.5) вә (77.6)-дан енержинин мәхсуси гијмәтләр спектри үчүн

$$E_{nlm}=E^o_{nl}+\frac{eH}{2\mu}\hbar m \qquad (77.7)$$

ифадәси алынар. Белә атомун шүаланма тезлији:

$$\omega_{n'l'm',nlm}=\frac{E_{n'l'm'}-E_{nlm}}{\hbar}=\frac{E^o_{n'l'}-E^o_{nl}}{\hbar}+O_L(m'-m),$$

јахуд

$$\omega=\omega_o+O_L\Delta m$$

олар. Бурада ω–саһә олдуғу, ω_o–саһә олмадығы һалда шүаланма тезликләри, $O_L=\dfrac{eH}{2\mu c}$ — *Лармор* тезлијидир.

Нисбәтән бөјүк интенсивлијә малик дипол кечидләри үчүн $\Delta m=0,\pm1$ олдуғундан, магнит саһәсинин тә'сири алтында атомун һәр бир спектр хәтти

$$\omega_1=\omega_o,\ \omega_2=\omega_o+O_L,\ \omega_3=\omega_o-O_L$$

тезликли үч хәттә парчаланачагдыр. Магнит саһәсиндә атомун спектр хәтләринин белә үч хәттә парчаланмасына *нормал Зејеман еффекти* дејилир.

Инди дә Зејеман еффектини електронун спинини нәзәрә алан (61.14) Паули тәнлији васитәсилә тәһлил едәк. Бу һалда, јәгин ки, (77.4) тәнлијинә спин магнит моментинин харичи магнит саһәси илә гаршылыглы тә'сирини нәзәрә алан $-\vec{M}_s\vec{H} = \dfrac{e}{\mu c}\vec{S}\vec{H}$ һәдди әлавә олунмалыдыр. $\vec{H}\| z$ олдугда (77.4) тәнлији

$$E\Psi = (\breve{H}_o - \frac{eH}{2\mu c}(\breve{L}_z + 2S_z))\Psi \qquad (77.4')$$

шәклинә дүшәр. Бурада $\breve{S}_z = \dfrac{\hbar}{2}\sigma'_z$ –спин оператору, $\Psi = \begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}$ –Паули функсијасыдыр. S_z-ин Ψ-јә тә'сири

$$S_z\Psi = \frac{\hbar}{2}\sigma'_z\Psi = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \hbar\frac{1}{2}\begin{pmatrix}+\Psi_1\\ -\Psi_2\end{pmatrix} = \hbar m_s\Psi$$

олдуғундан, (77.4′) тәнлији

$$E\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix} = \left(\breve{H}_o - \frac{eH}{2\mu c}(\breve{L}_z + 2\hbar m_s)\right)\begin{pmatrix}\Psi_1\\ \Psi_2\end{pmatrix}$$

вә ја

$$E\Psi_1 = \left(\breve{H}_o - \frac{eH}{2\mu c}(L_z + \hbar)\right)\Psi_1,$$

$$E\Psi_2 = \left(\breve{H}_o - \frac{eH}{2\mu c}(L_z - \hbar)\right)\Psi_2 \qquad (77.8)$$

системи шәклинә дүшәр, бурада $m_s = \pm\dfrac{1}{2}$ –спин магнит квант әдәдидир.

(77.8) системинә дахил олан $\breve{H}_o$, һәрәкәт мигдары моменти квадратынын $\vec{L}^2$ оператору, механики вә спин моментләринин z оху үзрә проjексија операторлары $\breve{L}_z$ вә $\breve{S}_z$ гаршылыглы коммутасија етдијиндән, онлар ејни мәхсуси функсијалара маликдир. Демәли, магнит саһәси олмадығы һала ујғун $\breve{H}_o$ операторунун мәхсуси функсијалары олан

$$\Psi_1 = \Psi_{nlm}S_{\alpha=\frac{1}{2}}(s_z) = \begin{pmatrix}\Psi_{nlm}\\ 0\end{pmatrix}$$

$$\Psi_2 = \Psi_{nlm}S_{\alpha=-\frac{1}{2}}(s_z) = \begin{pmatrix}0\\ \Psi_{nlm}\end{pmatrix} \qquad (77.9)$$

функсијалары (77.8) тәнликләринин һәлләри көтүрүлә биләр, бурада да Ψ_{nlm} функсијасы (77.5) илә верилир. Лакин $\breve{L}_z\Psi_{nlm} = \hbar m\Psi_{nlm}$ олдуғундан онлар E^o_{nl}-а јох.

$$E'_{nlm} = E^o_{nl} - \frac{eH}{2\mu c}\hbar(m+1), \qquad (77.10)$$

$$E''_{nlm} = E^o_{nl} - \frac{eH}{2\mu c}\hbar(m-1) \qquad (77.11)$$

мәхсуси гијмәтләринә ујғун олар.

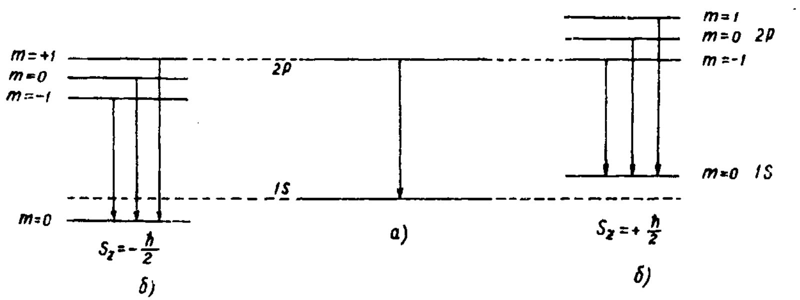
Бурадан көрүнүр ки, спинин нәзәрә алынмасы атомун һәр бир сәвијјәсинин ики сәвијјәјә парчаланмасына сәбәб олур. Зејеман еффектинин характерини исә дәјишмир, чүнки, спин магнит моментинин магнит саһәси илә гаршылыглы тә'сири спинин истигамәтинин дәјишмәсинә кәтирмир. Бу сәбәбдән кечидләр спинин проjексијасынын ја мүсбәт вә ја да мәнфи ишарәсинә ујғун сәвијјәләр арасында баш верир. Мәсәлән, n=1, l=0 олан 1s сәвијјәси үчүн m=0 олдуғундан о, $E_{100} = E^o_{10} \pm \hbar O_L$ ($O_L = \dfrac{eH}{2\mu c}$ –Лармор тезлијидир) кими ики сәвијјәјә, n=2, l=1, m=0, 1, –1 олан 2p сәвијјәси исә $E_{210} = E^o_{20} \pm \hbar O_L$, $E'_{211} = E^o_{21} \pm 2\hbar O_L$, $E''_{211} = E^o_{21}$, $E'_{21-1} = E^o_{21}$ вә $E''_{21-1} = E^o_{21} - 2\hbar O_L$ кими алты сәвијјәјә парчаланыр. Лакин онлардан m=1, s_z=–$\hbar/2$ -јә ујғун E''_{211} вә m=–1, $s_z = \dfrac{\hbar}{2}$ -јә ујғун E'_{21-1} сәвијјәләри бир-биринин үзәринә дүшүр. Беләликлә, n=2, l=1-ә ујғун 2p сәвијјәси магнит саһәсиндә беш мүхтәлиф сәвијјәјә парчаланыр (бах шәкил 35), јә'ни онун чырлашмасы гисмән арадан галдырылыр.

(77.10) вә ја (77.11)-дән кечидләрин тезлији үчүн

$$\omega_{n'l'm',nlm} = \frac{E_{n'l'm'} - E_{nlm}}{\hbar} = \frac{E^o_{n'l'} - E^o_{nl}}{\hbar} + O_L(m' - m) \qquad (77.12)$$

$$\omega = \omega_o + O_L\Delta m \qquad (77.13)$$

алыныр, бурада ω –саһә олан, ω_o –исә саһә олмајан һалдакы кечид тезликләридир.



Шәкил 35. Нормал Зејеман ефффектиндә $1s$ вә $2p$ сәвијјәләринин парчаланмасы (спин нәзәрә алынмагла): а) саһәсиз, б) саһәдә.

Атомун дипол кечидләри үчүн алынмыш сечмә гајдаларына көрә (бах §42) $\Delta m = 0,\pm 1$ кими јалныз үч мүхтәлиф гијмәт алыр. Буна ујғун олараг бахылан атомларын һәр бир спектр хәтти бирчинс магнит саһәсиндә $\omega_1 = \omega_o(\Delta m = 0)$, $\omega_2 = \omega_o + O_L(\Delta m = 1)$, $\omega_3 = \omega_o - O_L(\Delta m = -1)$ тезликләринә ујғун үч хәттә парчаланар (шәкил 35). Беләликлә, Шрединкер, Паули вә Клејн–Гордон–Фок нәзәријјәләри Зејеман ефффекти үчүн ејни нәтичәјә кәтирир.

Магнит квант әдәди дәјишмәјән $(\Delta m = 0)$ кечидләрә ујғун спектрал хәтт саһә истигамәтиндә полјарлашдығындан (шүаланманын рәгси z оху бојунча баш верир), атом һәмин истигамәтдә шүаланмыр. Δm-ин ± 1 дәјишмәсинә ујғун хәтләр исә саһәјә перпендикулјар олараг даирәви вә ја xy мүстәвиси тәрәфдән бахдыгда хәтти полјарлашмыш олур. Она көрә дә мүшаһидә саһәнин јајылма истигамәтиндә апарылдыгда ики хәтт, она перпендикулјар истигамәтдә апарылдыгда исә үч хәтт мүшаһидә олунур.

Квант нәзәријјәсиндә алынан бу нәтичә тамамилә классик нәтичәнин үзәринә дүшүр.

Доғрудан да, классик нәзәријјәдә Зејеман ефффекти һадисәси електрон орбитинин харичи магнит саһәсиндә O_L Лармор тезлији илә пресесија етмәси нәтичәси кими изаһ едилир. (77.13) дүстурунда исә ω кечид тезлији $\hbar$ Планк сабитиндән асылы дејил. $\hbar = 0$ оланда о дәјишмир. Бурадан чыхыр ки, классик вә квант нәзәријјәләри ејни нәтичәјә кәтирмәлидир. Бу тәчрүбәдә там тәсдиг олунур.

Гејд едәк ки, нормал Зејеман ефффекти аномал Зејеман ефффектинә (бах §78) нисбәтән даһа сејрәк мүшаһидә олунур. Әсасән а) атомун там спин моменти сыфыр; б) магнит саһәси күчлү* олан ики һалда магнит саһәсинин атома тә'сири нормал Зејеман ефффектинә кәтирир. Бүтүн башга һалларда исә бу тә'сир аномал Зејеман ефффектинә сәбәб олур. Бу

* "Күчлү" вә "зәиф" магнит саһәси анлајышлары нисби мә'на дашыјыр. Бу анлајышлар §78-дә дәгигләшдириләчәкдир.

ахырынчынын нәзәријјәси исә јалныз Дирак нәзәријјәси әсасында гурула билир, белә ки, аномал Зејеман ефффекти електронун (атомун) спинә малик олмасы нәтичәсидир.

§ 78. АНОМАЛ ЗЕЈЕМАН ЕФФЕКТИ

1. §77-дә көрдүк ки, Шрединкер, Паули вә һәтта Клејн–Гордон–Фок нәзәријјәләри атомун енержи сәвијјәләринин харичи магнит саһәсиндә јалныз үч сәвијјәјә парчаланмасына кәтирир, јә'ни онлар јалныз нормал Зејеман ефффектини изаһ едә билир. Лакин магнит саһәсинин атом системләринин енержи спектринә тә'сири електронун спинә малик олмасындан вә бунун нәтичәсиндә мејдана чыхан спин-орбитал гаршылыглы тә'сирин мөвчудлуғундан кәскин шәкилдә асылыдыр. Бу амилләрин тә'сири "зәиф" саһәдә даһа кәскин өзүнү бүрузә верир. Буна көрә дә, релјативистик вә спин ефффектләрини өзүндә чәмләшдирән Дирак нәзәријјәси васитәсилә Зејеман ефффектинин там нәзәријјәсини гурмаг мүмкүн олмушдур.

Зејеман ефффектинин нәзәријјәсинә кечмәздән әввәл "күчлү" вә "зәиф" саһә анлајышыны дәгигләшдирәк.

Дирак нәзәријјәси енержи сәвијјәләринин мултиплет–инчә гурулушуну изаһ етмәјә имкан верир. n баш вә l орбитал квант әдәдләринин верилмиш гијмәтләриндә атомун һәр бир енержи сәвијјәси (s-сәвијјәсиндән башга) көмәкчи квант әдәди j-нын гијмәтләри илә фәргләнән ики сәвијјәдән ибарәт олур. Бу дублетин енержи фәрги

$$\Delta E_{j'j} = E_{nlj'} - E_{nlj} \tag{78.1}$$

олур. Магнит саһәси исә, §77-дә көрдүјүмүз кими, атомун енержи сәвијјәләринин әлавә парчаланмасына сәбәб олур. Бу парчаланмада гоншу ики сәвијјәнин енержиләри арасындакы фәрг $\frac{\hbar e H}{2\mu c}$-јә бәрабәрдир.

Харичи магнит саһәсиндә олан атом үчүн

$$\frac{\hbar e H}{2\mu c} >> E_{nlj'} - E_{nlj} \tag{78.2}$$

шәрти өдәнилирсә, белә саһәјә "күчлү",

$$\frac{\hbar e H}{2\mu c} << E_{nlj'} - E_{nlj} \tag{78.3}$$

шәрти өдәнилдикдә исә "зәиф" саһә дејилир. Гејд едәк ки, "күчлү" вә "зәиф" саһә анлајышлары нисби анлајышлардыр. Бир нөв атом үчүн "күчлү" ("зәиф") саһә, дикәри үчүн "зәиф" ("күчлү") ола биләр.

Күчлү саһә һалында Зејеман ефффекти үчүн Дирак нәзәријјәсиндә алынан нәтичә §77-дә алынан нәтичәнин үзәринә дүшүр. Она көрә дә әввәлчә бу ефффект үчүн мүһүм олан "зәиф" саһә һалы үзәриндә дајанаг. Бу һалда Дирак тәнлијинин спин ефффектләрини нәзәрә алмаға имкан верән зәиф-релјативистик јахынлашма илә кифајәтләнмәк олар. Бу тәнлик (74.18) вә (74.19) әсасән

$$(E - e\varphi - \frac{\breve{p}^2}{2\mu})\Phi = (H^{\text{рел}} + H^{c.o.} + H^{\text{к}} + H^{\text{маг}})\Phi, \tag{78.4}$$

бурада

$$\Phi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = R_{nl} Y^J_{lm}. \tag{78.5}$$

Y^J_{lm} – (72.24) вә ја (72.25) илә верилмиш сферик спинор, $H^{\text{рел}}, H^{c.o.}, H^{\text{к}}$ вә $H^{\text{маг}}$ ифадәләри (74.22)–(74.25) илә верилмиш операторлардыр.

Релјативистик електронун Кулон саһәсиндәки һәрәкәти тәдгиг едилдикдә релјативистик, спин-орбитал вә контакт гаршылыглы тә'сирләрин енержиләри, һәјәчанланма нәзәријјәсинин биринчи јахынлашмасында һесабланмыш вә онларын чәми үчүн (75.16) ифадәси алынмышды:

$$E_{nj} = E^{\text{рел}} + E^{c.o.} + E^{k} = -Rh\frac{\alpha^2 Z^4}{n^4}(\frac{n}{j+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}). \tag{78.6}$$

(78.4) тәнлијиндәки

$$\breve{H}^{\text{маг}} = -\frac{e}{\mu c}\vec{A}\vec{\breve{p}} + \frac{e\hbar}{2\mu c}\vec{\sigma}\vec{H} \tag{78.7}$$

һәдди исә атомун магнит саһәси илә гаршылыглы тә'сир енержи операторудур. Бу гаршылыглы тә'сирин там енержијә вердији әлавә дә һәмин јахынлашмада һесаблана биләр:

$$E^{\text{маг}} = \int \Phi^{+} \breve{H}^{\text{маг}} \Phi (d\vec{r}). \tag{78.8}$$

Φ-далға функсијалары сферик координат системиндә ифадә олундуғундан $\breve{H}^{\text{маг}}$ операторуну да һәмин системдә јазаг. Бунун үчүн z охуну магнит саһәси бојунча јөнәлдәк. Онда $H_z = H,\ H_x = H_y = 0$ олар. Магнит саһәси үчүн $\vec{A}$ вектор-потенсиалын (77.3′) ифадәсиндән истифадә етдикдә

$$\breve{H}^{\text{маг}} = \frac{eH}{2\mu c}(\breve{L}_z + 2\breve{S}_z) \tag{78.9}$$

олур (бах (77.3″)), бурада $\breve{L}_z = x\breve{p}_y - y\breve{p}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}$

вә $S_z = \frac{h}{2}\sigma'_z$ -дир.

(78.9)-у вә Φ далға функсијасынын (78.5) илә верилмиш ифадәсини (78.8)-дә јазсаг,

$$E^{\text{маг}} = \frac{e}{2\mu c}H\int_o^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr \int Y^{+J}_{lm}(\breve{L}_z + \hbar\sigma'_z)Y^J_{lm}d\Omega \tag{78.10}$$

$\breve{L}_z + h\sigma'_z$ операторунун $Y^{j=l\pm\frac{1}{2}}_{lm}$ функсијаларына тә'сири

$$(\breve{L}_z + \hbar\sigma'_z)Y^{j=l+\frac{1}{2}}_{lm} = \hbar\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}mY^{m-1}_l \\ -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}(m-1)Y^m_l \end{pmatrix}$$

вә

$$(\breve{L}_z + \hbar\sigma'_z)Y^{j=l-\frac{1}{2}}_{lm} = \hbar\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}}mY^{m-1}_l \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}(m-1)Y^m_l \end{pmatrix}$$

һесабланандан сонра R_{nl} радиал вә Y^J_{lm} сферик спинор үчүн

$$\int_o^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr = 1;\ \int Y^{+J}_{lm}Y^J_{lm}d\Omega = 1$$

нормаланма шәртләри өдәнилдијини нәзәрә алсаг, (78.10)-дан $j = l + \frac{1}{2}$ һалында

$$E^{\text{маг}} = \frac{e\hbar}{2\mu c}H\frac{1}{2l+1}\left[m(l+m) + (m-1)(l-m+1)\right] = \frac{e\hbar H}{2\mu c}(m - \frac{1}{2})\frac{2(l+1)}{2l+1};$$

$j = l - \frac{1}{2}$ һалында исә

$$E^{\text{маг}} = \frac{e\hbar H}{2\mu c}\frac{1}{2l+1}\left[m(l-m+1)+(m-1)(l+m)\right] = \frac{e\hbar H}{2\mu c}(m-\frac{1}{2})\frac{2l}{2l+1}$$

олур. §72-дә дахил едилән $m_j = m - \frac{1}{2}$ квант әдәдиндән истифадә етсәк, һәр ики ифадәни

$$E^{\text{маг}}_{jm} = \frac{eH}{2\mu c}\hbar g m_j = \hbar O_L g m_j \qquad (78.11)$$

шәклиндә јазмаг олар, бурада $O_L = \frac{eH}{2\mu c}$ –Лармор тезлији

$$g = \frac{j+\frac{1}{2}}{l+\frac{1}{2}}. \qquad (78.12)$$

Ланде вуруғудур. Бир оптик електрона малик атомлар үчүн Ланде вуруғунун үмуми шәкли

$$g = 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + l_s(l_s+1)}{2j(j+1)} \qquad (78.13)$$

шәклиндәдир. Бурада $l_s = \frac{1}{2}$ –спин квант әдәдидир $(S^2 = \hbar^2 l_s(l_s+1))$, g үчүн (78.12) вә (78. 13) ифадәләри исә там еквивалентдир.

Беләликлә, магнит саһәсиндә бир оптик електронлу атомларын енержи спектри

$$E_{nljm_j} = E^o_{nl} + E_{nj} + E^{\text{маг}}_{jm} = E_{nlj} + \hbar g O_L m_j. \qquad (78.14)$$

Бурада магнит гаршылыглы тә'сир енержиси үчүн алынмыш (78.11) ифадәси илә нормал Зеjеман еффектиндә алынмыш уjғун (77.7,8) ифадәләринин мүгајисәсиндән көрүнүр ки, (78.11)-ә әлавә олараг Ланде вуруғу дахил олур вә m квант әдәди әвәзиндә спинин нәзәрә алынмасы нәтичәси олан m_j квант әдәди дурур.

(78.12) вә ја (78.13) ифадәләриндән атомун мүхтәлиф һаллары үчүн g-нин гијмәти мүхтәлиф олур. Мәсәлән, $l = 0, j = \frac{1}{2}$ -јә уjғун $s_{1/2}$ һалында

$g = 2$; $p_{1/2}(l = 1, j = \frac{1}{2})$ һалында $g = \frac{2}{3}$; $p_{3/2}(l = 1, j = 3/2)$ һалында $g = \frac{4}{3}$ вә и. а. m_j квант әдәдинә кәлдикдә о, j-нын верилмиш гијмәтиндә $-j$-дан $+j$-ја гәдәр $2j+1$ мүхтәлиф гијмәт алыр. Релјативистик квант нәзәријјәсиндә һидрокен атомунун һәр бир енержи сәвијјәсинин енержиси E_{nlj} јалныз үч квант әдәдиндән асылыдыр. Демәли, һәр бир сәвијјә m_j -ја вә јахуд там һәрәкәт мигдары моментинин фәзада јөнәлмә истигамәтләринә көрә $2j+1$ тәртибдән чырлашмыш олур (бах §72). Магнит саһәси исә бу чырлашманы там ортадан көтүрүр.

Магнит саһәсиндә парчаланмыш енержи сәвијјәләри арасында мүмкүн олан кечидләрә уjғун шүаланма тезликләри

$$\omega = \frac{E_{n'l'j'} - E_{nlj}}{\hbar} + O_L(m_j g_j - m_{j'} g_{j'}) \qquad (78.15)$$

јахуд

$$\omega = \omega_o + O_L(m_j g_j - m_{j'} g_{j'}) \qquad (78.16)$$

ифадәси илә верилир, бурада m_j вә g_j –башланғыч, $m_{j'}$, $g_{j'}$ исә сон һалын магнит квант әдәди вә Ланде вуруғу, ω_o – саһә олмадыгдакы шүаланма тезлијидир.

§48-дә ән интенсивли дипол шүаланмасы үчүн сечмә гајдалары алынмышды. Онлара көрә ики сәвијјә арасында кечидин баш вермәси үчүн l, j, m_j квант әдәдләри

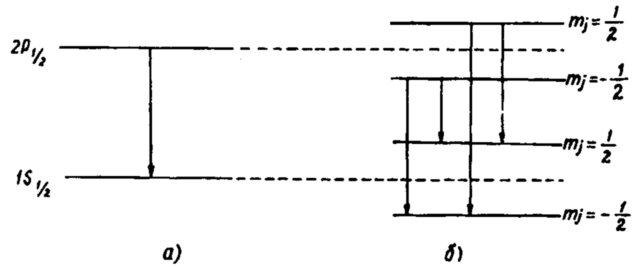
$$\Delta l = \pm 1,\ \Delta j = 0, \pm 1,\ \Delta m_j = 0, \pm 1$$

шәртләрини өдәмәлидир. Нормал Зеjеман еффектиндә олдуғу кими, $\Delta m_j = 0$ шәрти өдәнилән кечидләрә уjғун шүаланма саһә истигамәтиндә хәтти, $\Delta m_j = \pm 1$-ә уjғун шүаланма исә саһәјә перпендикулјар истигамәтдә даирәви полјарлашмыш олур.

Зәиф магнит саһәсиндә $2p$ вә $1s$ сәвијјәләри арасында баш верә биләчәк кечидләрин схеми шәкил 36-дә көстәрилмишдир.

Схемдән көрүнүр ки, саһә олмадығы һалда спектрдә ики хәтт мүшаһидә олунмалыдыр (шәкил 36,а). Белә атом системи саһәјә дахил едилдикдә исә $2p_{1/2}$–$1s_{1/2}$ кечидиндә бир хәтт әвәзиндә $\omega_1 = \omega_o + \frac{4}{3}O_L$, $\omega_2 = \omega_o + \frac{2}{3}O_L$, $\omega_3 = \omega_o - \frac{2}{3}O_L$, $\omega_4 = \omega_o - \frac{4}{3}O_L$ тезликли дөрд; $2p_{3/2}$–$1s_{1/2}$

кечидиндә исә $\omega_1=\omega'_o+\frac{1}{3}O_L$, $\omega_2=\omega'_o+\frac{5}{3}O_L$, $\omega_3=\omega'_o+\frac{7}{3}O_L$, $\omega_4=\omega'_o-\frac{1}{3}O_L$, $\omega_5=\omega'_o-\frac{5}{3}O_L$, $\omega_6=\omega'_o-\frac{7}{3}O_L$ тезликли алты хәтт мүшаһидә олунар (шәкил 36,б).



Шәкил 36. Аномал Зејеман еффектиндә $1s_{1/2}$ вә $2p_{1/2}$ сәвијјәләринин парчаланмасы: а) -саһәсиз, б) - саһәдә.

Бүтүн јухарыда дедикләримиз һидрокен атомуна вә бир оптик електрона малик атомлара аиддир.

Харичи тәбәгәдә бирдән чох електрону олан атомлар үчүн исә ики һалы бир-бириндән фәргләндирмәк лазымдыр.

Биринчи јахынлашмада фәрз олунур ки, белә атомларын спин-орбитал гаршылыглы тә'сир оператору, бир електронлу атомларда олдуғу кими, $\vec{L}\vec{\vec{S}}$ һасили илә мүтәнасибдир. Бурада $\vec{L}$ вә $\vec{\vec{S}}$ атомун там орбитал вә там спин моментләри операторларыдыр.

а) Атомун електронлары арасындакы електростатик гаршылыглы тә'сир енержиси спин-орбитал гаршылыглы тә'сир енержисиндән кичикдирсә; биринчини нәзәрә алмамаг олар. Бу һалда спин илә орбита арасындакы рабитә гырылмыр вә $\vec{\vec{J}}=\vec{\vec{L}}+\vec{\vec{S}}$ там момент өзүнү бүтөв бир кәмијјәт кими апарыр. $\vec{\vec{J}}$ оператору $\breve{H}_o+A\vec{\vec{L}}\vec{\vec{S}}$ оперетору илә коммутасија етдијиндән, о һәрәкәт интегралы олур вә атомун һаллары L, J, M_J квант әдәдләр чохлуғу илә тә'јин олунур. Бахылан һалда атомун һаллары J квант әдәди илә фәргләнир.

Електростатик гаршылыглы тә'сир нәзәрә алындыгда j квант әдәди илә фәргләнән һаллар парчаланыр. Белә рабитәјә jj -рабитә дејилир.

б) Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир енержиси електронлар арасындакы електростатик гаршылыглы тә'сир енержисиндән кичикдирсә, спин илә орбит арасындакы рабитә гырыла биләр. Бу һалда $\vec{L}$ там орбитал вә $\vec{S}$ там спин моментләри бир-бириндән асылы олмур вә һәр икиси ајрылыгда һәрәкәт интегралы олур. Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда електросатик тә'сир L-ин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун сәвијјәләрин парчаланмасына кәтирир. Она көрә дә атомун һаллары ја L, S, M_L, M_S вә ја да L, S, J, M_J квант әдәдләр чохлуғу илә тә'јин олунур. Електронларын ајрылыгда орбитал моментләринин чәми олан там орбитал момент $\vec{L}$-ә, ајрылыгда спин моментләринин чәми олан там спин моменти $\vec{\vec{S}}$-ә кәтирилдијиндән бу рабитәјә Рессел-Саундерс рабитәси вә ја LS рабитә дејилир. Бу рабитәдә атомун сәвијјәси ${}^{2s+1}X_J$ кими ишарә олунур. X һәрфи L-ин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун S, P, D, F... вә и.а. һәрфләрини көстәрир.

Рессел-Саундерс јахынлашмасында Ланде вуруғу бирелектронлу атомларда олдуғу кими

$$g=1+\frac{J(J+1)-L(L+1)+L_s(L_s+1)}{2J(J+1)} \tag{78.17}$$

шәклиндә сечилир. Бурада

$$J=|L-S|,(L-S+1),\ldots,(L+S-1),(L+S)$$

гијмәтләрини алыр.

Бу бәрабәрлик бир оптик електрона малик атомлар үчүн дәгиг, чох електронлу атомлар үчүн исә тәхмини өдәнилир.

§83-дә көрәчәјимиз кими, икиелектронлу һелиум атому там спини S=0-а ујғун синглет вә S=1-ә ујғун триплет һалларда ола биләр. Биринчи груп һаллар ${}^1X_{J=L}$, икинчи груп һаллар исә ${}^3X_J$ кими көстәрилир. ${}^1X_{J=L}$ һалларда олан пара-һелиум үчүн магнит саһәсинин истәнилән интенсивлијиндә там орбитал моментин фәзадакы мүхтәлиф јөнү илә тә'јин олунан јалныз нормал Зејеман еффекти мүшаһидә олунур.

§ 79. ПАШЕН–БАК ЕФФЕКТИ

Фәрз едәк ки, атом системинә (78.2) шәртинин өдәнилмәсини тә'мин едән күчлү магнит саһә тә'сир едир. (78.2)-дән көрүнүр ки, бу һалда парчаланмыш ики енержи сәвијјәси арасындакы мәсафә j квант әдәдинин дәјишмәси һесабына јаранан мәсафәдән хејли бөјүк олур. Дикәр тәрәфдән магнит саһәси спинлә орбит арасындакы рабитәни гырыр вә спин магнит моменти илә орбитал магнит моменти магнит саһәси әтрафында бир-бириндән асылы олмајараг пресесија едир. Беләликлә, (78.4) тәнлијиндә $H^{\text{маг}}$ һәддинә нисбәтән j-ја көрә парчаланмаја кәтирән $H^{\text{рел}}, H^{c.o.}$ вә H^{κ} һәдләрини нәзәрә алмамаг олар. Онда (78.4) тәнлији (78.9)-а әсасән

$$E\Phi = (\breve{H}_o + \frac{eH}{2\mu c}(\breve{L}_z + 2\breve{S}_z))\Phi \qquad (79.1)$$

шәклинә дүшүр. (79.1) тәнлији исә Паули нәзәријјәси әсасында нормал Зејеман еффектини тәһлил етдијимиз (77.4′) тәнлији үзәринә дүшүр вә һәр бир спектр хәттинин үч хәттә парчаланмасына сәбәб олур. Буна Пашен–Бак еффекти дејилир вә онун шәрһи артыг §77-дә верилмишдир.

§ 80. ЛЕМБ СҮРҮШМӘСИ

Електромагнит саһәсинин квантланмасына һәср олунмуш §50-дә көрдүк ки, саһәнин бүтүн мүмкүн олан енержи сәвијјәләриндә зәррәчикләрин (фотонларын) сајы $N_{k\lambda} = 0$ оларса, саһәнин вакууму адланан бу һалын енержиси сыфырдан фәргли галыр вә кифајәт гәдәр бөјүк гијмәт алыр. Бу бөјүк енержи саһәнин сыфырынчы рәгсләринин, јахуд вакуум һалында електромагнит саһәсинин флүктуасијаларынын енержиси кими баша дүшүлүр. Вакуум һалында саһәнин флүктуасијалары дедикдә енержинин фәзанын һәр һансы бир нөгтәсиндә баш верән флүктуасијасы һесабына фотонун јараныб, дикәр нөгтәсиндә удулмасы баша дүшүлүр. Фотонларын белә бурахылыб удулмасы просесиндә маддәләрин атомундакы електронлар да иштирак едә биләр вә бу да саһәнин вакууму илә електронлар арасында гаршылыглы тә'сирин мејдана чыхмасына сәбәб олур.

Беләликлә, атомун електрону јалныз онун нүвәси илә јох, електромагнит саһәсинин сыфырынчы (вакуум) рәгсләри илә дә гаршылыглы тә'сирдә олур вә бу ахырынчысы електронун орбитдә "титрәмәсинә" кәтирир. Бунун нәтичәсиндә електронун радиус-вектору (координатлары) флүктуасијаја уғрајыр вә о, орбитин јахын әтрафындакы фәзада "јајылыр", јә'ни бахылан анда електрон јалныз орбитин үзәриндәки нөгтәләрдән бириндә јох, онун јахын әтрафындакы нөгтәләрдә дә мүшаһидә олуна биләр. Бу сәбәбдән електронун нүвә илә гаршылыглы тә'сири зәифләјир вә стасионар һалларын енержи сәвијјәләри јухарыја доғру сүрүшүр. Бу сүрүшмәјә *Лемб сүрүшмәси* дејилир.

Лемб сүрүшмәсинин там нәзәријјәси квант електродинамикасынын көмәји илә гурула биләр. Буна бизим имканымыз јохдур, бурада һадисәнин маһијјәтини анламаға имкан верән, онун Велтон тәрәфиндән тәклиф олунмуш јарым классик гејри-релјативистик нәзәријјәсинин шәрһи илә кифајәтләнәчәјик.

Фәрз едәк ки, вакуумун сыфырынчы рәгсләринә ујғун електромагнит саһәси $\vec{\mathcal{E}}_{\text{вак}}$ вә $\vec{H}_{\text{вак}}$ интенсивлик векторлары илә сәчијјәләнир. Бу саһәнин електрона тә'сири нәтичәсиндә онун $\vec{r}$ радиус-вектору $\delta\vec{r}$ гәдәр артым алыр. Бу һәрәкәтин Нјутон тәнлији

$$m\delta\ddot{\vec{r}} = e\vec{\mathcal{E}}_{\text{вак}} + \frac{e}{c}\left[\delta\dot{\vec{r}}\,\vec{H}_{\text{вак}}\right] \qquad (80.1)$$

олар, бурада m –классик електрон күтләси, e–онун електрик јүкүдүр. Магнит саһәсинин тә'сири електрик саһәсинин тә'сиринә нисбәтән $\frac{\delta\dot{\vec{r}}}{c} = \frac{\vec{\upsilon}}{c}$ тәртибиндә кичик кәмијјәт олдуғундан, ону нәзәрә алмамаг олар. Онда һәрәкәт тәнлији

$$m\delta\ddot{\vec{r}} = e\vec{\mathcal{E}}_{\text{вак}} \qquad (80.2)$$

олур.

Вакуум һалынын $\vec{\mathcal{E}}_{\text{вак}}(\vec{r},t)$ интенсивлик векторуну Фурје сырасына ајыраг:

$$\vec{\mathcal{E}}_{\text{вак}} = \sum_{\vec{k},\lambda}\vec{\mathcal{E}}_{\vec{k},\lambda}\, e^{i(\omega_{k\lambda}t - \vec{k}\vec{r})}, \qquad (80.3)$$

бурада $\vec{k}$ –далға вектору ($\omega=ck$), λ=1,2 –саһәнин ики мүмкүн полјарлашма истигамәтини кәстәрән вуругдур. $\vec{\mathcal{E}}_{\text{вак}}$-ун физики маһијјәтә малик һәгиги һиссәсини сахлајыб, биринчи јахынлашмада онун координатлардан асылылығыны нәзәрә алмасаг (kr<<1 гәбул етмәклә)

$$\vec{\mathcal{E}}_{\text{вак}} = \sum_{\vec{k},\lambda}\vec{\mathcal{E}}_{\vec{k},\lambda}\cos\omega_{k\lambda}t \qquad (80.4)$$

олар. (80.4)-ү (80.2)-дә јеринә јазандан сонра ондан t-јә көрә интеграл көтүрүлдүкдә

$$\delta\vec{r} = -\frac{e}{m}\sum_{\vec{k},\lambda}\vec{\mathcal{E}}_{\vec{k},\lambda}\frac{\cos\omega_{k\lambda}t}{\omega_{k\lambda}^2} \qquad (80.5)$$

олур. Бахылан һалда електронун $\vec{r}$ радиус-векторунун дәјишмәси флуктатив (тәсадүфи) характер дашыдығына көрә онун орта гијмәти $\overline{\delta\vec{r}} = 0$ олар. (80.5) ифадәсиндә бу шәрт $\cos\omega t$-нин замана көрә орта гијмәтинин $\overline{\cos\omega t} = 0$ олмасы һесабына өдәнилир. Онда адәтән белә кәмијјәтләрин квадратик орта гијмәти һесабланыр:

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{e^2}{m^2} \sum_{\vec{k}\vec{k}'\lambda\lambda'} \vec{\mathcal{E}}_{k'\lambda'} \vec{\mathcal{E}}_{k\lambda} \frac{\overline{\cos\omega_{k'\lambda'}t \cos\omega_{k\lambda}t}}{\omega^4_{k\lambda}}.$$

Бурада

$$\overline{\cos\omega_{k'\lambda'}t \cos\omega_{k\lambda}t} = \frac{1}{2}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

олдуғундан

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{e^2}{m^2} \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\mathcal{E}^2_{k\lambda}}{\omega^4_{k\lambda}} \qquad (80.6)$$

алыныр.

§50-дә електромагнит саһәсинин вакуум һалынын енержиси үчүн $E_o = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\hbar\omega_{k\lambda}}{2}$ гијмәти алынмышды. Дикәр тәрәфдән классик електродинамикада һәмин енержи $\frac{1}{8\pi} \int \mathcal{E}^2_{\text{вак}}(\vec{r},t)(d\vec{r})$ бәрабәрдир:

$$\frac{1}{8\pi} \int \mathcal{E}^2_{\text{вак}}(\vec{r},t)(d\vec{r}) = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\hbar\omega_{k\lambda}}{2}. \qquad (80.7)$$

$\mathcal{E}_{\text{вак}}$-ун (80.3) илә верилмиш ифадәси (80.7)-дә јазылса,

$$\frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\lambda\lambda'} \vec{\mathcal{E}}_{k'\lambda'} \vec{\mathcal{E}}_{k\lambda} e^{-i(\omega_{k'\lambda'}-\omega_{k\lambda})t} \int e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}}(d\vec{r}) = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\hbar\omega_{k\lambda}}{2}.$$

Бурада

$$\frac{1}{L^3} \int e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}}(d\vec{r}) = \delta_{\vec{k}'\vec{k}}$$

δ-символун хассәсиндән истифадә едәрәк, $\vec{k}'$ үзрә чәми көтүрсәк,

$$\frac{L^3}{8\pi} \sum_{\vec{k},\lambda} \mathcal{E}^2_{k\lambda} = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\hbar\omega_{k\lambda}}{2}$$

вә бурадан $\mathcal{E}^2_{k\lambda}$ үчүн

$$\mathcal{E}^2_{k\lambda} = \frac{4\pi\hbar\omega_{k\lambda}}{L^3} \qquad (80.8)$$

алыныр. $\mathcal{E}^2_{k\lambda}$-ын бу ифадәсини (80.6)-да јаздыгда

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{2\pi\hbar e^2}{m^2 L^3} \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{1}{\omega^3_{k\lambda}}. \qquad (80.9)$$

Бу бәрабәрликдә $\vec{k}$-ја көрә чәми

$$\frac{1}{L^3}\sum_{\vec{k}} = 2\frac{1}{8\pi^3}\int d\vec{k} = \frac{2}{8\pi^3}\int k^2 dk d\Omega = \frac{1}{4\pi^3 c^3}\int \omega^2 d\omega d\Omega = \frac{1}{\pi^2 c^3}\int \omega^2 d\omega$$

кечидиндән истифадә едәрәк тезликләрә көрә интегралла әвәз етмәк олар. Онда

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{2}{\pi}\frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \int \frac{d\omega}{\omega}. \qquad (80.10)$$

Көрүндүјү кими ахырынчы интеграл логарифмик дағылыр. Лакин, електронун һәрәкәтинин гејри-релјативистик олдуғуну нәзәрә алараг бу интегралда јығылан (сонлу галан) һиссәни ајырд етмәк олар. Һәрәкәтин гејри-релјативистик олмасындан чыхыр ки, вакуум рәгсләринин тә'сири нәтичәсиндә електронун алдығы $\hbar\omega$ енержиси електронун mc^2 мәхсуси енержисиндән кичик олмалыдыр:

$$\hbar\,\omega < \hbar\omega_{\max} = mc^2.$$

Демәли,

$$\omega < \omega_{\max} = \frac{mc^2}{\hbar} \qquad (80.11)$$

(бахылан гејри-релјативистик һәрәкәт үчүн $m=m_o$ көтүрүлмүшдүр) шәрти јухарыдакы интегралын јухары сәрһәддини тә'јин едәр.

Електронун вакуум рәгсләри илә гаршылыглы тә'сири онун енержи сәвијјәләринин јухары сүрүшмәсинә кәтирдијиндән, електронун орбитдә титрәмә тезлији, јәгин ки, онун атомдакы рабитә енержисинә ујғун тезликдән кичик ола билмәз:

$$\omega > \omega_{min} = \frac{|E|}{\hbar} = \frac{me^4 Z^2}{2n^2\hbar^3}, \qquad (80.12)$$

бурада eZ –нүвәнин јүкүдүр.

(80.10)-дакы интеграл $\omega_{\min}$ вә $\omega_{\max}$ сәрһәдләриндә көтүрүлсә,

$$\int_{\omega_{min}}^{\omega_{max}} \frac{d\omega}{\omega} = \ln\frac{\omega_{\max}}{\omega_{min}} = \ln\frac{2(\hbar c)^2 n^2}{Z^2 e^4} = \ln\frac{2n^2}{(Z\alpha)^2}$$

олар вә онда

$$\overline{(\delta\vec{r})^2} = \frac{2}{\pi}\alpha(\frac{\hbar}{mc})^2 \ln\frac{2n^2}{(Z\alpha)^2}\,, \qquad (80.13)$$

бурада $\alpha = \dfrac{e^2}{\hbar c}$ – инчә гурулуш сабитидир.

(80.13)-дән көрүнүр ки, вакуум рәгсләринин тә'сири алтында електронун "јајылма" областынын өлчүләри $r_{вак}$, електронун $r_k = \dfrac{e^2}{mc^2}$ классик радиусу илә онун $\Lambda = \dfrac{\hbar}{mc}$ Комптон далға узунлуғу арасына дүшүр:

$$r_{вак} = \sqrt{\overline{(\delta\vec{r})^2}} \approx \sqrt{\alpha}\,\frac{\hbar}{mc} = \sqrt{\frac{e^2}{mc^2}\cdot\frac{\hbar}{mc}} = \sqrt{r_{\text{кл}}\Lambda}\,.$$

Бурада јухарыда kr һасилинин үзәринә гојулан $kr<<1$ шәрти доғрудан да өдәнилир:

$$kr_{вак} = \frac{mc}{\hbar}r_{вак} \approx \sqrt{\alpha} <<1.$$

Електронун орбитдә бу чүр "јајылмасы" нәтичәсиндә онун нүвә илә гаршылыглы тә'сири дәјишир вә $V=-e\varphi(r)$ әвәзинә

$$V + \delta V = -e\varphi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = -e\left[1 + \delta\vec{r}\vec{\nabla} + \frac{1}{2}(\delta\vec{r}\vec{\nabla})^2 + \ldots\right]\varphi(r)$$

олур, φ– нүвәнин Кулон саһәсинин потенсиалыдыр. Бу ифадәдән електронун титрәмәси үзрә орта гијмәт көтүрүлсә, титрәмә флүктуасија характерли олдуғундан

$$\overline{\delta\vec{r}} = 0,\ \overline{(\delta x)^2} = \overline{(\delta y)^2} = \overline{(\delta z)^2} = \frac{1}{3}\overline{(\delta r)^2}$$

алынар вә електронун вакуум рәгсләри илә гаршылыглы тә'сир енержиси

$$\delta V_{вак} = -\frac{e^2}{6}\overline{(\delta\vec{r})^2}\nabla^2\varphi(r)\,. \qquad (80.14)$$

Нүвәнин Кулон саһәсинин потенсиалы

$$\nabla^2\varphi(r) = -4\pi Ze\delta(\vec{r})\,. \qquad (80.15)$$

Пуассон тәнлијини өдәдијиндән

$$\delta V_{вак} = \frac{2\pi Ze^3}{3}\overline{(\delta\vec{r})^2}\delta(\vec{r}) \qquad (80.16)$$

олар. Беләликлә, електронун вакуум рәгсләри илә гаршылыглы тә'сир енержисинин орта гијмәти (80.13) вә (80.16)-дан

$$\delta E_{\text{вак}} = \int\Psi^*(r)\delta V_{\text{вак}}\Psi(\vec{r})(d\vec{r}) = \frac{4}{3}Ze^2\alpha(\frac{\hbar}{mc})|\Psi(0)|^2 \ln\frac{2n^2}{(Z\alpha)^2} \qquad (80.17)$$

кими тә'јин олунар.

Електронун енержи сәвијјәләринә олан $\delta E_{вак}$ әлавәси *Лемб сүрүшмәси* адланыр вә атомун далға функсијасынын онун мәркәзиндәки гијмәти илә тә'јин олунур. $|\Psi_{nlm}(0)|^2$ кәмијјәти јалныз l=0-а ујғун s- һаллары үчүн сыфырдан фәргли дир вә бүтүн башга l=1,2,... һаллар үчүн исә сыфра бәрабәрдир. Бахылан атомун һидрокенәбәнзәр атом олдуғуну гәбул етсәк, § 40-дан (бах (40.40))

$$|\Psi_{nlm}(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi n^3 a^3}$$

олар, бурада n –баш квант әдәди, $a = \dfrac{\hbar^2}{me^2}$ – Борун биринчи орбитинин радиусудур. Буну (80.17)-дә јазсаг, s - сәвијјәләринин сүрүшмәси

$$\delta E_{\text{вак}} = \frac{8}{3\pi}\alpha^3\frac{Z^4}{n^3}R\hbar \ln\frac{2n^2}{(Z\alpha)^2} \qquad (80.18)$$

ифадәси алынар, бурада $R = \dfrac{me^4}{2h^3}$ – *Ридберг сабитидир*. (80.18) ифадәси 1947-чи илдә Һанс Бете тәрәфиндән алынмышды.

Лемб сүрүшмәсинин һидрокенәбәнзәр атомларын һәјәчанланмамыш сәвијјәләрин енержисинә нисбәти

$$\frac{\delta E_{\text{вак}}}{|E|} \approx \frac{\alpha^3 Z^4 R\hbar}{R\hbar Z^2} = \alpha^3 Z^2$$

тәртиблидир. Дикәр тәрәфдән $\delta E_{\text{вак}}$ сүрүшмәси атомун енержи сәвијјәләринин инчә гурулушуна ујғун парчаланмаја кәтирән ΔE_{nlj} сүрүшмәсиндән α дәфә кичикдир.

Һидрокен атомунун Дирак нәзәријјәсиндә (бах: §75) $2p_{1/2}$ вә $2s_{1/2}$ сәвијјәләринин бир-биринин үзәринә дүшдүјүнү, јә'ни онларын ејни енержијә малик олдуғуну көстәрмишдик. Јухарыда көрдүк ки, $2p_{1/2}(l=1, j=\frac{1}{2})$ сәвијјәси Лемб сүрүшмәсинә уғрамыр (онун үчүн

$\delta E_{\text{вак}}$=0-дыр), $2s_{1/2}(l=0, j=\frac{1}{2})$ сәвиііәси үчүн исә $\delta E_{\text{вак}}$ сыфырдан фәргли олдуғундан 0, $2p_{1/2}$ сәвиііәсиндән јухарыда јерләшәчәкдир. Бу иддиа 1947-чи илдә Лемб вә Резерфорд тәчрүбәләриндә тәсдиг олунмушдур.

(80.18)-дән $2s_{1/2}(n=2, l=0, j=\frac{1}{2})$ сәвиііәсинин Лемб сүрүшмәси үчүн $\delta E_{\text{вак}}^{\text{нәз}} = 17{,}8R = 1040$ $M\hbar c$ гијмәти алынмышды. Јухарыдакы тәчрүбәләрдә алынан гијмәт исә $\delta E_{\text{вак}}^{\text{тәч}} = 1057$ $M\hbar c$ олмушду (бах: шәкил 32). Мүгајисәдән көрүнүр ки, нәзәри вә тәчрүби нәтичәләр бир-биринә хејли јахындыр. Релјативистик квант нәзәриііәсиндә $\delta E_{\text{вак}}$-нин нәзәри вә тәчрүби гијмәтләри арасындакы фәрг исә 10^{-3} $M\hbar c$ тәшкил едир.

IV һиссә

ЧОХСАЈЛЫ ЗӘРРӘЧИКЛӘРДӘН ИБАРӘТ СИСТЕМЛӘР

Х ф ә с и л

ЕЈНИ ЗӘРРӘЧИКЛӘРДӘН ИБАРӘТ СИСТЕМЛӘР

§ 81. ЕЈНИ ЗӘРРӘЧИКЛӘР ҮЧҮН СЕЧИЛМӘЗЛИК ПРИНСИПИ

Биз индијә гәдәр јалныз бир зәррәчикдән ибарәт квант механики системләрин мүхтәлиф саһәләрдәки һәрәкәтини тәдгиг етмәклә мәшғул олмушдуг. Инди дә чохлу зәррәчикләрдән ибарәт системләрин тәдгигинә кечәк. Бу ахырынчы системләр арасында ејни зәррәчикләрдән тәшкил олунмуш системләр хүсуси јер тутур. Ејни зәррәчикләр дедикдә елә зәррәчикләр баша дүшүлүр ки, онларын күтләси m, јүкү e, спини s_z вә башга характеристикалары ејни олсун. Ејни зәррәчикләрдән ибарәт системләрин квант хассәләри, мүхтәлиф нөв зәррәчикләрдән тәшкил олунмуш системләрин хассәләриндән кәскин фәргләнир. Мәсәлән, систем протон, нејтрон, електрон вә и.а. кими мүхтәлиф зәррәчикләрдән ибарәтдирсә, системин тәркибиндә онлары һәм классик вә һәм дә квант механикасында бир-бириндән һәмишә фәргләндирмәк олур.

Систем ејни зәррәчикләрдән тәшкил олундугда исә мәсәлә мүрәккәбләшир. Классик механикада, зәррәчикләрин физики характеристикаларынын ејни олмасына бахмајараг, системдә онлары һәмишә бирини дикәриндән фәргләндирмәк олур. Доғрудан да, һәр һансы бир анда зәррәчикләри нөмрәләјиб трајекторијалары боју һәрәкәтини изләсәк, истәнилән сонракы анда һәр һансы нөмрәли зәррәчијин фәзанын һансы нөгтәсиндә олачағыны дәгиг демәк олур. Башга сөзлә, классик механикада зәррәчик өз фәрдилијини итирмир.

Квант механикасында исә мәсәлә тамамилә башгадыр. Квант механикасында гејри-мүәјјәнлик принсипинә көрә трајекторија үзрә һәрәкәт мүмкүн дејилдир. Мүәјјән анда зәррәчијин вәзијјәти дәгиг мә'лумдурса, сонракы анда онун вәзијјәти тамамилә гејри-мүәјјән галыр. Зәррәчикләри бахылан анда нөмрәләсәк, сонракы анда фәзанын верилмиш нөгтәсиндә һансы нөмрәли зәррәчијин мүшаһидә олуначағы һаггында һеч нә дејә билмәрик. Беләликлә, квант механикасында ејни зәррәчикләр системи тәркибиндә зәррәчик, һәрәкәти заманы, өз фәрдилијини сахламыр вә онлар бир-бириндән гәти сечилмир. Бу иддиа ејни зәррәчикләр системи үчүн *сечилмәзлик принсипи* адланыр. Бу принсип ејни зәррәчикли системләрин тәдгигиндә әсас рол ојнајыр вә мүһүм физики нәтичәләрә кәтирир.

Тутаг ки, систем гаршылыглы тә'сирдә олан ејни зәррәчикләрдән тәшкил олунмушдур. Зәррәчикләрин сүр'әтләринин јалныз ишыг сүр'әтиндән кифајәт гәдәр кичик гијмәтиндә системин классик Һамилтон функсијасы ону тәшкил едән зәррәчикләрин координат вә импулслары- нын функсијасы шәклиндә көстәрилә биләр. Сүр'әтләр кичик олдуғундан зәррәчикләр арасында гаршылыглы тә'сирин дашынмасына сәрф олунан мүддәтдә системдә баш верән дәјишикликләр о гәдәр чүзи олур ки, системин гаршылыглы тә'сир енержиси онун һәрәкәт тарихиндән јох, зәррәчикләрин координатларынын бахылан андакы гијмәтиндән асылы олур. Зәррәчикләрин сүр'әти ишыг сүр'әти тәртибиндә ($\upsilon\sim c$) оланда исә гаршылыглы тә'сири дашыјан електромагнит саһәсинин варлығыны да нәзәрә алмаг лазым олур. Бу һалда систем сәрбәстлик дәрәчәси сонсуз олан системә чеврилир.

Биз јалныз $\upsilon << c$ шәртини өдәјән системләрин өјрәнилмәси илә мәшғул олачағыг. $\upsilon\sim c$ шәрти өдәнилән системләрин тәдгиги исә квант механикасы курсу чәрчивәсиндән кәнарда галыр вә квант електродинамикасы курсунун әсас мәзмуну тәшкил едир.

Бахдығымыз һалда ујғунлуг принсипинә көрә N ејни зәррәчикли системин Һамилтон оператору

$$\breve{H} = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + U(x_i,t)\right) + \sum_{i\neq j} U(x_i,x_j) + W \qquad (81.1)$$

шәклиндә олар. Бурада $x_i(x_i,y_i,z_i)$ – i-чи зәррәчијин координатлары, $U(x_i,t)$ – онун харичи саһә илә, $U(x_i,x_j)$ – зәррәчикләрин бир-бири илә гаршылыглы тә'сир операторлары, W исә спин-спин вә спин-орбитал гаршылыглы тә'сир операторудур. W оператору зәррәчикләрин спин дәјишәнләриндән $s_{1z}, s_{2z},\ldots,s_{Nz}$ вә импулс операторларындан асылыдыр. Бурада зәррәчикләрин спинә малик олмасы факты нәзәрә алыначаг. Спин-спин вә спин-орбитал гаршылыглы тә'сирләрә кәлдикдә исә онлар јалныз бөјүк ($\upsilon\sim c$) сүр'әтләрдә өзләрини бүрузә верир, гејри-релјативистик сүр'әтләрдә исә мүһүм рол ојнамыр. Дирак нәзәријјәсинә һәср олунмуш фәслин §74-дә биз бу мәсәләјә тохунмушуг.

§4-дә гејд етмишдик ки, N зәррәчикдән ибарәт системин далға функсијасы зәррәчикләрин координатларындан, онларын спин дәјишәнләриндән вә замандан асылыдыр: $\Psi(x_1,x_2,\ldots,x_N,s_{1z},s_{2z},\ldots,s_{Nz},t)$. Шәрти олараг зәррәчикләрин фәза вә спин дәјишәнләринин чохлуғуну, мәсәлән, $x_1,s_{1z}\rightarrow(1)$, $x_2,s_{2z}\rightarrow(2)$ вә и.а. кими ишарә етсәк, онда системин Шредингер тәнлији

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(1,2,\ldots,N,t) = \breve{H}(1,2,\ldots,N,t)\Psi(1,2,\ldots,N,t) \qquad (81.2)$$

олар.

Зәррәчикләрин гаршылыглы тә'сир оператору онларын арасындакы нисби мәсафәнин мүтләг гијмәтиндән асылы олдуғундан системдә ики ихтијари i вә k зәррәчијин гаршылыглы јерини дәјишдикдә $\breve{H}$-ын ифадәсинә дахил олан ујғун топлананларын јери дәјишмиш олур. Бу да $\breve{H}$ операторуну дәјишмир. Она көрә $\Psi_1(1,2,\ldots,N,t)$ функсијасы (81.2) тәнлијинин $\breve{H}$-ын мүәјјән E мәхсуси гијмәтинә ујғун һәллидирсә, ондан зәррәчикләрин (координатларынын) јердәјишмәси илә фәргләнән бүтүн $\Psi_2(2,1,\ldots,N,t)$, $\Psi_3(1,3,2,\ldots,N,t)$ кими функсијалар да (81.2) тәнлијинин һәмин E мәхсуси гијмәтинә ујғун һәлләри олар. Белә функсијаларын сајы зәррәчикләрин јердәјишмәләри сајы – $N!$-а бәрабәрдир. Сечилмәзлик принсипинә көрә иддиа едә биләрик ки, истәнилән ики зәррәчијин јердәјишмәси нәтичәсиндә алынан һал системин јени һалы олмур (классик механиканын зиддинә) вә бүтүн бу $N!$ сајда далға функсијалары системин ејни бир һалыны тә'јин едир. Квант механикасында бу вәзијјәт *мүбадилә чырлашмасы* адланыр. Беләликлә системин һалы зәррәчикләрдән һәр биринин координатларыны ејни заманда өлчмәклә тә'јин олунарса, онун һалы јәгин ки, јалныз мүбадилә чырлашмасы дәгиглији илә тә'јин олуна биләр, беләки, бу функсијалардан һансынын системин өлчүлән һалына ујғун кәлдијини дәгиг демәк мүмкүн дејилдир.

Дикәр тәрәфдән јухарыдакы функсијаларын ихтијари хәтти комбинасијасы олан

$$\Psi(1,2,\ldots,N,t) = \sum_k C_k\Psi_k(1,2,\ldots,N,t) \qquad (81.3)$$

функсијасы да системин мүмкүн олан һалларындан бирини характеризә едир. Лакин C_k-ларын сечилмәси илә алынан бүтүн бу хәтти комбинасијалардан һансынын системин бахылан һалына ујғун кәлдијини дә биласитә демәк мүмкүн дејилдир.

Бу суаллара чаваб алмаг үчүн ашағыдакы кими һәрәкәт едәк. Квант механикасында һәр бир әмәлијјат мүәјјән оператор илә апарылыр. Зәррәчикләрин јердәјишмә әмәлијјатыны да операторун көмәјилә апармаг олар. Ихтијари ики i вә k нөмрәли зәррәчикләрин јердәјишмә операторуну $\breve{P}_{ik}$ илә ишарә едәк. Онда зәррәчикләрин ејнилик шәрти ријази олараг $\breve{P}_{ik}$ илә $\breve{H}$ операторларынын коммутасијасы кими ифадә олунар:

$$\breve{P}_{ik}\breve{H} - \breve{H}\breve{P}_{ik} = 0\,. \qquad (81.4)$$

Бурадан $\breve{P}_{ik}$ вә $\breve{H}$ үмуми мәхсуси функсијалара малик олдуғундан (81.2) тәнлијинин һәлли олан $\Psi(1,2,\ldots,N,t)$ функсијасы P_{ik} операторунун да мәхсуси функсијасы олар:

$$P_{ik}\Psi(1,2,\ldots,N,t) = \lambda\Psi(1,2,\ldots,i,k,\ldots,N,t)\,., \qquad (81.5)$$

Бурада λ $-\breve{P}_{ik}$-нын мәхсуси гијмәтидир. $\breve{P}_{ik}$ ермит олдуғундан λ – һәгигидир. Дикәр тәрәфдән P_{ik} -нын тә'рифиндән

$$\breve{P}_{ik}\Psi(1,2,\ldots,i,\ldots,k,\ldots,N,t)=\Psi(1,2,\ldots,k,\ldots,i,\ldots,N,t) \quad (81.6)$$

олар. (81.5) вә (81.6) тәнликләриндә бир дә солдан $\breve{P}_{ik}$ илә тә'сир етсәк,

$$\breve{P}^2_{ik}\Psi=\lambda\breve{P}_{ik}\Psi=\lambda^2\Psi(1,2,\ldots,i,\ldots,k,\ldots,N,t) \quad (81.5')$$

$$\breve{P}^2_{ik}\Psi=P_{ik}\Psi(1,2,\ldots,k,\ldots,i,\ldots,N,t)=\Psi(1,2,\ldots,i,\ldots,k,\ldots,N,t) \quad (81.6')$$

алынар. (81.5′) вә (81.6′) -ын мүгајисәсиндән

$$\lambda^2=1,\ \lambda=\pm1$$

алыныр. Бурадан чыхыр ки, $\breve{P}_{ik}$ јердәјишмә оператору ики мәхсуси гијмәтә маликдир. $\lambda=1$ мәхсуси гијмәтинә ујғун функсија зәррәчикләрин јердәјишмәсинә көрә *симметрик функсија* адланыр вә

$$\breve{P}_{ik}\Psi^s=+1\Psi^s(1,2,\ldots,i,\ldots,k,\ldots,N,t) \quad (81.7)$$

тәнлијини өдәјир. $\lambda=-1$ мәхсуси гијмәтинә ујғун функсија исә *антисимметрик* функсија адланыр вә

$$\breve{P}_{ik}\Psi^A=-1\Psi\ (1,2,\ldots,i,\ldots,k,\ldots,N,t) \quad (81.8)$$

тәнлијини өдәјир.

Бурадан чыхыр ки, ејни зәррәчикләрдән ибарәт системләр үчүн (81.3) илә верилән бүтүн мүмкүн олан (C_κ-ларын сечилмәси илә фәргләнән) хәтти комбинасијалардан јалныз еләләри сечилмәлидир ки, онлар зәррәчикләрин јердәјишмә әмәлијјатына көрә ја симметрик вә ја да антисимметрик олсун.

Демәли, ејни зәррәчикләрдән ибарәт системләрин һалынын далға функсијасынын тә'јининдәки јухарыда гејд олунан гејри-мүәјјәнлик симметрија постулатынын дахил едилмәси илә арадан галдырылмыш олур: N ејни зәррәчикдән тәшкил олунмуш системин һаллары ја симметрик вә ја да антисимметрик функсијаларла тәсвир олунур. Беләликлә, симметрија принсипи дахил едилдикдә мүбадилә чырлашмасы тамамилә арадан галдырылмыш олур.

$\breve{P}_{ik}$ јердәјишмә оператору ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығындан вә системин $\breve{H}$ Һамилтон оператору илә коммутасија етдијиндән системин далға функсијасынын симметрија хассәси ***һәрәкәт интегралы*** олур. Башга сөзлә, систем һәр һансы башланғыч анда симметрик (антисимметрик) далға функсијалары илә тәсвир олунан һалда оларса, системин бүтүн сонракы һаллары да симметрик (антисимметрик) функсијалар илә тәсвир олунар.

Демәли, ејни зәррәчикләрдән тәшкил олунмуш системләр јалныз ики мүхтәлиф тәбиәтли ола биләр. Бу системләрин тәбиәтләри еләдир ки, онлардан бир гисми јалныз симметрик дalғa функсијалары, дикәр гисми исә јалныз антисимметрик далға функсијалары илә тәсвир олунур. Системин симметрија хассәси һәрәкәт интегралы олдуғундан бир симметрија харичи тә'сир нәтичәсиндә вә ја системин еволјусијасы (һалын замана көрә дәјишмәси) заманы дикәр симметријаја кечә билмир.

Системин һалынын симметрик вә ја антисимметрик далға функсијалары илә тәсвири мәсәләси системи тәшкил едән зәррәчикләрин нөвүндән асылыдыр. Тәчрүбәләр көстәрир ки, спини јарым там олан зәррәчикләр системи антисимметрик функсијаларла тәсвир олунур. Белә зәррәчикләр *фермионлар* адланыр вә онлар *Ферми–Дирак статистикасына* табедир. Спини там олан зәррәчикләр системинин һаллары исә симметрик функсијаларла тәсвир олунур. Белә зәррәчикләр *бозонлар* адланыр вә онлар *Бозе–Ејнштејн статистикасына* табе олур. Беләликлә, зәррәчикләрин статистикасы онларын спинләринин гијмәти илә тә'јин олунур.

Мүрәккәб зәррәчикләрин вә ејни мүхтәлиф зәррәчикләрдән тәшкил олунмуш системләрин далға функсијасы онларын тәркибинә дахил олан елементар фермионларын сајы илә тә'јин олунур. Мүрәккәб зәррәчикләр тәк сајда елементар фермионлардан тәшкил олунубса, белә системләрин далға функсијасы ики мүрәккәб зәррәчијин јердәјишмәсинә көрә антисимметрик олмалыдыр. Беләки, ики белә зәррәчијин јердәјишмәси тәк сајда фермионларын јердәјишмәсинә еквивалент олдуғундан, далға функсијасы ишарәсини дәјишир. Буна охшар олараг, мүрәккәб зәррәчикләр чүт сајда елементар фермионлардан тәшкил олунмуш оларса, белә системләрин һалы симметрик далға функсијалары илә тәсвир олунур. Систем гисмән тәк сајда вә гисмән дә чүт сајда елементар фермионлардан ибарәт мүрәккәб зәррәчикләрдән тәшкил олунубса, белә системин далға функсијасы биринчи нөв мүрәккәб зәррәчикләрин јердәјишмәсинә көрә антисимметрик, икинчи нөв мүрәккәб зәррәчикләрин јердәјишмәсинә көрә исә симметрик олмалыдыр.

N зәррәчикдән ибарәт квант механики систем үчүн (81.2) тәнлијинин үмуми шәкилдә дәгиг һәлләрини тапмаг мүмкүн дејилдир. Лакин бир чох мәсәләләрин һәлли үчүн (81.2) тәнлијинин зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмајан һала ујғун һәлләрини тапмаг лазым кәлир. Белә һәлләрә (81.2) тәнлијинин сыфырынчы јахынлашмасы дејилир.

Беләликлә, ејни зәррәчикләр системиндә ајрылыгда көтүрүлмүш зәррәчијин Һамилтон операторуну

$$\breve{H}(x_i)=\frac{\breve{p}_i^2}{2m}+U(x_i,t)=\breve{H}(i) \quad (81.9)$$

кими ишарә етсәк, бахылан јахынлашмада системин Һамилтон оператору онларын аддитив чәми олар:

$$\breve{H}(1,2,\ldots,N)=\breve{H}(1)+\breve{H}(2)+\ldots+\breve{H}(N). \quad (81.10)$$

(81.9)-да $\breve{U}(x_i, t)$ – i-чи зәррәчијин харичи саһәдәки потенсиал енержи операторудур.

$\breve{H}$ операторунун ашкар шәкилдә замандан асылы олмадығыны фәрз етсәк, (81.2) тәнлијинин стасионар һаллары

$$\Psi(1,2,\ldots,N,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(1,2,\ldots,N)$$

вә (81.2) тәнлији

$$\left[\ (\breve{H}(1)+\breve{H}(2)+\ldots+\breve{H}(N)\ \right]\Psi(1,2,\ldots,N) = E\Psi(1,2,\ldots,N) \qquad (81.11)$$

шәклинә дүшәр, бурада E–системин там енержисидир.

(81.9) операторунун мәхсуси функсијаларыны $\Psi_n(i)$ илә ишарә етсәк,

$$\breve{H}(i)\Psi_n(i) = E_n\Psi_n(i) \qquad (81.12)$$

вә асанлыгла көстәрмәк олар ки, (81.11) тәнлијинин һәллини

$$\Psi(1,2,\ldots,N) = \Psi_{n1}(1)\Psi_{n2}(2)\ldots\Psi_{nN}(N) \qquad (81.13)$$

шәклиндә ахтармаг олар вә системин там енержиси ону тәшкил едән зәррәчикләрин там енержиләринин аддитив чәминә бәрабәр олар:

$$E = E_{n1} + E_{n2} + \ldots + E_{nN},$$

бурада n_i-лә зәррәчијин квант һалыны тә'јин едән квант әдәдләри чохлуғу ишарә олунмушдур.

Сечилмәзлик принсипинә көрә (81.13) ифадәсиндә истәнилән ики зәррәчијин (координатларынын) јердәјишмәси нәтичәсиндә алынан функсијалар да (81.11) тәнлијинин һәмин E мәхсуси гијмәтинә ујғун һәлләри олдуғундан, бозонлардан ибарәт систем үчүн бахылан һала ујғун (81.13) һәлләр чохлуғундан јалныз зәррәчикләрин јердәјишмәсинә көрә симметрик дalға функсијасы сечилир. Белә функсија (81.13) нөвлү һәлләрин ашағыдакы чәми шәклиндә јазылыр:

$$\Psi^S = \Psi_1(1,2,\ldots,N) + \Psi_2(2,1,\ldots,N) + \Psi_3(1,2,3,\ldots,N) + \ldots \qquad (81.14)$$

вә ја

$$\Psi^S = \sum_k \Psi_k = \left(\frac{N_1!N_2!\ldots}{N!}\right)^{1/2} \sum_{n_1 n_2 \ldots} \Psi_{n_1}(1)\Psi_{n_2}(2)\ldots\Psi_{n_N}(N), \qquad (81.15)$$

бурада чәм $n_1, n_2, \ldots, n_N$ –индексләринин бүтүн мүмкүн олан мүхтәлиф јердәјишмәләри үзрә көтүрүлүр, N_i-ләр көстәрир ки, бу индексләрдән нечәси E_i һалына кәтирир (*Бозе-Ејнштејн* статистикасына көрә системин бахылан E_n һалында зәррәчикләрин сајы истәнилән ола биләр). (81.15) илә верилмиш Ψ-нин модулунун квадратындан системдәки бүтүн зәррәчикләрин координатлары үзрә интеграл алындыгда чәмин һәр һәддинин модулунун квадратындан башга јердә галан һәдләринин интегралы сыфра бәрабәр олур. $\Psi_n(i)$ функсијалары ортонормаланмыш функсијалар олдуғундан (81.15) чәминдәки һәдләрин сајы $\dfrac{N!}{N_1!N_2!\ldots}$ бәрабәрдир, бурадан да (81.15) ифадәсиндәки нормалајычы вуруг ортаја чыхыр.

Фермионлардан тәшкил олунмуш системләрин һалларынын тәсвири үчүн исә (81.13) һәлләр чохлуғундан антисимметрик функсија сечилир. Белә функсија (81.13) нөвлү һәлләрин антисимметрик комбинасијасы кими верилир. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, антисимметрик функсија Ψ^A (81.13) һасилинә дахил олан $\Psi_n(i)$ функсијаларындан дүзәлмиш ашағыдакы детерминант (*Слетер детерминанты*) шәклиндә јазыла биләр:

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \Psi_{n_1}(1)\Psi_{n_1}(2)\ldots\Psi_{n_1}(N) \\ \Psi_{n_2}(1)\Psi_{n_2}(2)\ldots\Psi_{n_2}(N) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \Psi_{n_N}(1)\Psi_{n_N}(2)\ldots\Psi_{n_N}(N) \end{vmatrix} \qquad (81.16)$$

Доғрудан да, (81.16)-да ики ихтијари зәррәчијин координатларынын јердәјишмәси детерминантын ики сүтунунун јердәјишмәсинә кәтирир. Бунун нәтичәсиндә детерминант ишарәсини дәјишир, јә'ни (81.16) илә верилмиш $\Psi(1,2,\ldots,N)$ функсијасы зәррәчикләрин јердәјишмәсинә көрә антисимметрик олур.

Инди дә фәрз едәк ки, ики (вә ја икидән чох) фермион ејни бир һалдадыр, јә'ни мәсәлән, $n_1 = n_2$-дир. Бу заман детерминантын ики сәтри (вә ја сүтуну) бир-биринин ејни олдуғундан детерминант сыфра бәрабәр олур. Бурадан чыхыр ки, бахылан һалы ики вә икидән чох фермион тута билмәз. Башга сөзлә, системин верилмиш Ψ_n һалында ја бир фермион олар, јахуд да һәмин һал бош галар. Бу ахырынчы иддиа исә *Паули принсипинин* ифасыдыр. Беләликлә, Паули принсипи, сечилмәзлик принсипинин гаршылыглы тә'сирдә олмајан фермионлардан ибарәт системләр үчүн сөјләнмиш хүсуси һалыдыр.

Ејни зәррәчикли системдә зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сир нәзәрә алындыгда системин $\breve{H} = \breve{H}_o + \sum_{i\neq j} U(x_i, x_j)$ Һамилтон операторунун симметријасы дәјишмәдијиндән системин дәгиг далға функсијасы суперпозисија принсипинә әсасән, $\breve{H}_o$-ын мәхсуси функсијасы олан

(81.15) симметрик вә ја (81.16) антисимметрик функсијаларын суперпозисијасы шәклиндә көстәрилә биләр:

$$\Psi = \sum C_i(t)\Psi_i^s,$$
$$\Psi = \sum_k C_k(t)\Psi_k^A,$$

бурада $C_i(t)$ вә $C_k(t)$ – системин i-чи симметрик вә k-чы антисимметрик һалларынын еһтимал амплитудларыдыр. Зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сир системин бир һалдан башга һала кечмәсинә сәбәб ола биләр. Лакин, һалын симметријасынын јухарыда гејд олунан сахланма ганунуна әсасән, истәнилән тә'сир нәтичәсиндә системин кечдији јени һалын симметријасы башланғыч һалынын симметријасы үзәринә дүшмәлидир. Беләликлә, системин далға функсијаларынын симметријасы нә зәррәчикләр арасындакы гаршылыглы тә'сирин тәбиәтиндән вә нә дә харичи саһәләрин олуб олмамасындан асылы олмур, о јалныз системи тәшкил едән ејни зәррәчикләрин тәбиәти илә мүәјјән олунур.

Гејри-релјативистик ($\upsilon \ll c$) һалда спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сирләрә ујғун енержиләр, зәррәчикләрин електрик гаршылыглы тә'сир енержисинә нисбәтән нәзәрә алынмајачаг дәрәчәдә кичик олур. Електрик гаршылыглы тә'сирдә олан зәррәчикләрин Һамилтон операторуна спин оператору дахил олмур вә о, спин дәјишәнинә тә'сир етмир. Буна көрә дә системин далға функсијасыны јалныз зәррәчикләрин координатларындан вә јалныз спин дәјишәнләриндән асылы функсијаларын һасили шәклиндә көстәрмәк олар:

$$\Psi(1,2,\dots N) = \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)\chi(s_{1z}, s_{2z}, \dots, s_{Nz}) \qquad (81.18)$$

(81.2) Шрединкер тәнлији јалныз координатлардан асылы Ψ функсијасыны тә'јин етмәјә имкан верир, спин функсијасы χ исә ихтијари галыр.

Зәррәчикләрин електрик гаршылыглы тә'сири онларын спининдән асылы олмур. Буна бахмајараг ејни зәррәчикләр системинин енержиси, сечилмәзлик принсипи нәтичәсиндә, онун там спининдән асылы олур (бах §83).

Фермионлардан ибарәт системләр үчүн (81.18) далға функсијасы зәррәчикләрин координат вә спин дәјишәнләринин јердәјишмәсинә көрә антисимметрик олдуғундан, бу јердәјишмәләрә көрә координатлардан асылы $\Psi(x_1,x_2,\dots,x_N)$ функсијасы симметрик олдугда, спин функсијасы мүтләг антисимметрик вә әксинә олмалыдыр:

$$\Psi^A = \Psi^s\chi^A \quad \text{вә ја} \quad \Psi^A = \Psi^A\chi^S. \qquad (81.19)$$

Зәррәчикләрин спини нәзәрә алындыгда спин функсијаларынын ајрыча һесабланмасы тәләб олунур. Онда системин (81.2) Шрединкер тәнлијинә спин функсијаларынын өдәдији тәнликләр дә әлавә олунур.

§ 61-дә көстәрдик ки, спин операторунун квадраты $\breve{S}^2$, онун ихтијари сечилмиш истигамәтдәки (мәсәлән, z истигамәтиндә) $\breve{S}_z$ пројексијасы оператору вә $\breve{H}$ Һамилтон оператору бир-бири илә гаршылыглы коммутасија едир, јә'ни онлар үмуми мәхсуси функсијалара маликдир:

$$\breve{S}^2\chi(s_{1z},\dots,s_{Nz}) = \lambda^2\chi(s_{1z},\dots,s_{Nz}),$$
$$\breve{S}_z\chi(s_{1z},\dots,s_{Nz}) = \lambda_z\chi(s_{1z},\dots,s_{Nz}). \qquad (81.20)$$

Бурада $\breve{\vec{S}} = \sum_i \breve{\vec{S}}^{(i)}$, $\breve{\vec{S}}^{(i)} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}^{(i)}$ – i-чи зәррәчијин спин оператору, $\breve{S}_z = \sum_i S_z^{(i)}$, $S_z^{(i)} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z^{(i)}$ – һәмин зәррәчијин спининин z оху истигамәтиндәки пројексијасы оператору, $\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – Паули матрисаларыдыр.

Кәләчәк 82–83 §-ларда ики ејни зәррәчикдән ибарәт системләрин тәдгиги үзәриндә әтрафлы дајаначағыг. Она көрә дә јухарыда дедикләримизи белә системләр үчүн даһа әјани шәкилдә шәрһ едәк.

§ 82. ИКИ ЕЈНИ ФЕРМИОНДАН ИБАРӘТ СИСТЕМИН ДАЛҒА ФУНКСИЈАСЫ

Спини 1/2 олан ики ејни зәррәчикдән ибарәт системә бахаг. Онун гејри-релјативистик һалда Шрединкер тәнлији

$$\left[E - \breve{H}_1 - \breve{H}_2 - V(\vec{r}_1,\vec{r}_2) + W(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\breve{\vec{p}}_1,\breve{\vec{p}}_2,s_{1z},s_{2z})\right]\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{1z},s_{2z}) = 0 \quad (82.1)$$

олар. Бурада E–системин там енержиси, $\breve{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + V(\vec{r}_i)$ ајрылыгда көтүрүлмүш зәррәчијин (81.9) илә верилмиш Һамилтон оператору, $V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ – зәррәчикләр арасындакы електрик гаршылыглы тә'сир оператору, W–спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сир операторудур. Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадығы һалларда (82.1) тәнлијинин һәллини

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{1z},s_{2z}) = \Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi(s_{1z},s_{2z}) \qquad (82.2)$$

кими көстәрмәк олар. Фермионлар системи үчүн $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{1z},s_{2z})$ функсијасы антисимметрик олмалыдыр. Онда $X(s_{1z},s_{2z})$ функсијасы симметрик (антисимметрик) олдугда $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ –антисимметрик (симметрик) көтүрүлмәлидир. Бахылан јахынлашмада (82.2) вә (82.1)-дән координатлардан асылы $\Psi(\vec r_1,\vec r_2)$ функсијасы

$$\left[E-\breve H_1-\breve H_2-V(\vec r_1,\vec r_2)\right]\Psi(\vec r_1,\vec r_2)=0 \tag{82.3}$$

тәнлијинин һәлли олар. Лакин (82.3) тәнлији дәгиг һәлл олунмур.

(82.3) тәнлијини тәхмини методлардан бири олан һәјәчанланма методу илә һәлл етмәк истәсәк, һәјәчанланмамыш системин $\breve H_o=\breve H_1+\breve H_2$ Һамилтон операторунун мәхсуси функсијалар спектри (сыфырынчы јахынлашма) мә'лум олмалыдыр. Бу спектр

$$\breve H_o\Psi^o(\vec r_1,\vec r_2)=E_o\Psi^o(\vec r_1,\vec r_2) \tag{82.4}$$

тәнлијинин һәллиндән тапылыр.

Бир-бириндән асылы олмајараг һәрәкәт едән електронлардан ибарәт системин һал функсијасы (сыфырынчы јахынлашма) онлардан бирини n_1, икинчисини исә n_2 һалында тәсвир едән далға функсијаларынын һасилинә бәрабәр олмалыдыр:

$$\Psi_I^o=\Psi_{n_1}^o(\vec r_1)\Psi_{n_2}^o(\vec r_2). \tag{82.5}$$

Буну (82.4) тәнлијиндә јеринә јазараг асанлыгла көстәрмәк олар ки, бу мәхсуси функсија системин там енержисинин

$$E^o_{n_1n_2}=E^o_{n_1}+E^o_{n_2} \tag{82.6}$$

мәхсуси гијмәтинә ујғундур. Сечилмәзлик принсипинә көрә електронларын јердәјишмә әмәлијјаты заманы $\breve H_o(\vec r_1,\vec r_2)$ оператору инвариант галдығындан, (82.4) тәнлијинин икинчи

$$\Psi^o_{II}=\Psi^o_{n_1}(\vec r_2)\Psi^o_{n_2}(\vec r_1) \tag{82.7}$$

һәлли дә $\breve H_o$-ын (82.6) мәхсуси гијмәтинә аиддир.

Системин енержисинин $E^o_{n_1n_2}$ мәхсуси гијмәтинә Ψ^o_I вә Ψ^o_{II} кими ики функсија ујғун кәлдијиндән, системин $E^o_{n_1n_2}$ һалы әлавә олараг (тәсадүфи чырлашмадан әлавә) ики гат чырлашмыш олур. Бу чырлашма там мә'насы илә електронларын сечилмәзлик принсипи һесабына ортаја чыхдығындан о, *мүбадилә чырлашмасы* адланыр.

Суперпозисија принсипинә көрә системин (82.5) вә (82.7) функсијалары илә тәсвир олунан һалларын һәр һансы бириндә олма еһтималы

$$\Psi^o(\vec r_1,\vec r_2)=C_1\Psi^o_I+C_2\Psi^o_{II} \tag{82.8}$$

функсијасы илә тә'јин олунар. Бурада C_1 вә C_2 јалныз

$$\int\Psi^{+o}(\vec r_1,\vec r_2)\Psi^o(\vec r_1,\vec r_2)(d\vec r_1)(d\vec r_2)=1$$

нормаланма шәрти илә әлагәдә олан ихтијари сабитләрдир.

Ејни зәррәчикләрдән ибарәт системләрин квант нәзәријјәсинә әсасән $\Psi^o(\vec r_1,\vec r_2)$ функсијасы зәррәчикләрин јердәјишмә әмәлијјатына көрә ја симметрик ($C_1=C_2=C_o$),

$$\Psi^S(\vec r_1,\vec r_2)=C_o(\Psi^o_I+\Psi^o_{II})=C_o\left[\Psi_{n_1}(\vec r_1)\Psi_{n_2}(\vec r_2)+\Psi_{n_1}(\vec r_2)\Psi_{n_2}(\vec r_1)\right], \tag{82.9}$$

ја да антисимметрик функсија олмалыдыр

$$\Psi^A(\vec r_1,\vec r_2)=C_o(\Psi^o_I-\Psi^o_{II})=C_o\left[\Psi_{n_1}(\vec r_1)\Psi_{n_2}(\vec r_2)-\Psi_{n_1}(\vec r_2)\Psi_{n_2}(\vec r_1)\right], \tag{82.10}$$

бурада n_1 вә n_2 илә ујғун һалы тә'јин едән квант әдәдләри чохлуғу ишарә олунур.

Инди дә ики зәррәчикли системин спин функсијаларыны тапаг. Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда спин илә орбитал һәрәкәт мигдары моментләри һәр бири ајрылыгда сахланыр вә ики зәррәчикли системин спин функсијасы (81.20) тәнликләринин һәлли олмалыдыр. Бурада

$$\begin{aligned}\breve S^2&=(\breve{\vec S}_1+\breve{\vec S}_2)^2=\breve S_1^2+\breve S_2^2+2\breve{\vec S}_1\breve{\vec S}_2,\\ \breve S_z&=\breve S_{1z}+\breve S_{2z}.\end{aligned} \tag{82.11}$$

$S^{*(i)}=\frac{\hbar}{2}\sigma_1^{(i)},(i=1,2)$ –i-чи зәррәчијин спин оператору, σ_x, σ_y, σ_z *Паули* матрисаларыдыр. (82.11)-дә $\breve{\vec S}_1$ вә $\breve S_{1z}$ операторлары јалныз s_{1z}; $\breve{\vec S}_2$, $\breve S_{2z}$ операторлары исә јалныз s_{2z} дәјишәнинә тә'сир едир.

s_z дәјишәнләри спинин мүмкүн ики мүхтәлиф пројексијасына ујғун олараг $s_z=\pm\frac{\hbar}{2}$ гијмәтләрини алыр.

Спин һәрәкәт мигдары моменти тәбиәтинә малик олдуғундан (81.20)-дә $\breve S^2$ вә $\breve S_z$ операторларынын мәхсуси гијмәтләри

$$\lambda^2=\hbar^2S(S+1),\qquad \lambda_z=\hbar S_z \tag{82.12}$$

бәрабәр олур, бурада S вә S_z системин там спининин вә онун пројексијасынын гијмәтләрини тә'јин едән спин квант әдәдләридир. Моментләрин (бах §73) топланма гајдасына көрә ики зәррәчикли системин там спини $S=1$ вә ја $S=0$ олар, онун пројексијасы исә ујғун олараг $S_z=-1,\ 0,\ 1$ вә

S_z=0 гијмәтләрини алыр. Беләликлә, ики зәррәчикли систем дөрд мүхтәлиф һалда ола биләр. Бу һалларын спин функсијаларыны тапаг.

$\breve{\breve{S}}$ вә $\breve{S}_z$ -ин јухарыдакы ифадәләрини вә $S^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_x^2+\sigma_y^2+\sigma_z^2) = = \frac{3\hbar^2}{4}$ олдуғуну нәзәрә алсаг, (82.11)-ә көрә (81.20) тәнликләри

$$\frac{1}{2}(3+\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)\chi = S(S+1)\chi,$$
$$\frac{1}{2}(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})\chi = S_z\chi \qquad (82.13)$$

шәклиндә јазмаг олар.

Спин-спин гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда (82.13) системинин һәлли

$$\chi(s_{1z}, s_{2z}) = \chi_\alpha(s_{1z})\chi_\beta(s_{2z}) \qquad (82.14)$$

шәклиндә ахтарыла биләр, бурада $\alpha=\pm$, $\beta=\pm$ ишарәләри гәбул олунмушдур. $\chi_+(s_z)$—спинин проjексиjасы мүсбәт $(s_z=\frac{\hbar}{2})$, $\chi_-(s_z)$ – спинин проjексиjасы мәнфи $(s_z=-\frac{\hbar}{2})$ олан һалын спин функсиjасыдыр. Онларын ифадәси (61.25) илә верилмишдир. σ_x, σ_y, σ_z Паули матрисаларынын бу функсиjалара тә'сири

$$\sigma_x\chi_\pm(s_z) = \chi_\mp(s_z), \quad \sigma_y\chi_\pm(s_z) = \pm i\chi_\mp(s_z), \qquad (82.15)$$
$$\sigma_z\chi_\pm(s_z) = \pm\chi_\pm(s_z)$$

кими тә'јин олунур.

Ики фермионлу системин (82.14) спин функсиjасы ашағыдакы дөрд мүхтәлиф шәкилдә ола биләр.

а) һәр ики зәррәчиjин спинләринин проjексиjалары мүсбәтдир

$$\chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z}), \qquad (82.16)$$

б) мәнфидир

$$\chi_-(s_{1z})\chi_-(s_{2z}), \qquad (82.17)$$

в) "биринчи" зәррәчиjин спин проjексиjасы мүсбәт, "икинчи"нинки исә мәнфидир

$$\chi_+(s_{1z})\chi_-(s_{2z}) \qquad (82.18)$$

вә г) әскинә

$$\chi_-(s_{1z})\chi_+(s_{2z}). \qquad (82.19)$$

Бундан габагкы параграфда көстәрдик ки, системин спин функсиjалары спин дәјишәнләринин јердәјишмәсинә көрә ја симметрик вә ја да антисимметрик олмалыдыр. (82.16) вә (82.17) функсиjалары бу тәләби өдәјир, онлар симметрик функсиjалардыр. (82.18) вә (82.19) функсиjалары исә белә јердәјишмәјә көрә нә симметрик вә нә дә антисимметрикдир. Она көрә онларын да симметриjа тәләбини өдәјән комбинасиjаларыны көтүрмәк лазымдыр. Белә комбинасиjалардан бири симметрик, дикәри исә антисимметрик функсиjаја кәтирир. Беләликлә, ики зәррәчикли систем үч симметрик

$$\chi_1 = \chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z}), \qquad S=1,\ S_z=1$$
$$\chi_2 = \chi_-(s_{1z})\chi_-(s_{2z}), \qquad S=1,\ S_z=-1 \qquad (82.20)$$
$$\chi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(s_{1z})\chi_-(s_{2z}) + \chi_+(s_{2z})\chi_-(s_{1z}), \qquad S=1,\ S_z=0$$

вә бир антисимметрик

$$\chi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(s_{1z})\chi_-(s_{2z}) - \chi_+(s_{2z})\chi_-(s_{1z})), \quad S=0,\ S_z=0 \qquad (82.21)$$

спин функсиjалары илә тәсвир олунур, бурада $\frac{1}{\sqrt{2}}$ вуруғу χ_3 вә χ_4 функсиjаларынын нормаланма шәртини өдәмәләри үчүн дахил едилмишдир.

Паули матрисаларынын $\chi_\pm$ -спин функсиjаларына (82.15) тә'сир ганунундан истифадә едәрәк көстәрмәк олар ки, (82.20) вә (82.21) функсиjалары $\breve{S}^2$ вә $\breve{S}_z$ операторларынын мәхсуси функсиjаларыдыр. Доғрудан да, мәсәлән χ_1-и (82.13)-дә јазсаг,

$$\frac{1}{2}(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})\chi_1 = \frac{1}{2}\{\ \chi_+(s_{2z})\sigma_{1z}\chi_+(s_{1z}) + \chi_+(s_{1z})\sigma_{2z}\chi_+(s_{2z})\ \} =$$
$$= \chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z}) = S_z\chi_1 = \chi_1$$

бурадан S_z=1 олар.

$$\frac{1}{2}(3+\vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2)\chi_1 = \frac{1}{2}\{\ 3\chi_1 + \sigma_{1x}\chi_+(s_{1z})\sigma_{2x}\chi_+(s_{2z}) +$$
$$+\sigma_{1y}\chi_+(s_{1z})\sigma_{2y}\chi_+(s_{2z}) + \sigma_{1z}\chi_+(s_{1z})\sigma_{2z}\chi_+(s_{2z})\ \} =$$
$$= \frac{1}{2}\{3\chi_1 + \chi_2 + i^2\chi_2 + \chi_1\} = 2\chi_1 = S(S+1)\chi_1$$

алынар. Бурадан көрүнүр ки, $\chi_1 = \chi_+(s_{1z})\chi_+(s_{2z})$ функсијасы $\hat{S}^2$ вә $\hat{S}_z$ операторларынын $S=1$ вә $S_z=1$ мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијадыр. Бу һалда системин спини ваһидә бәрабәр олуб (зәррәчикләрин спинләри бир-биринә парарел). z охуна парарел јөнәлмишдир. Ејнилә бунун кими көстәрмәк олар ки, χ_2 вә χ_3 функсијалары да һәмин операторларын $S=1$, $S_z=-1$ вә $S=1$, $S_z=0$ мәхсуси гијмәтләринә ујғун мәхсуси функсијаларыдыр:

$$\hat{S}^2\chi_{2,3} = 2\hbar^2\chi_{2,3} = \hbar^2 S(S+1)\chi_{2,3}$$

$$\hat{S}_z\chi_2 = -\hbar\chi_2, \quad \hat{S}_z\chi_3 = 0, \qquad (82.22)$$

јә'ни χ_2 вә χ_3-ә ујғун һалларда системин там спини ваһидә бәрабәр олуб, χ_2 һалында z охунун әксинә, χ_3 һалында исә z охуна перпендикулјар јөнәлир.

χ_4 функсијасына кәлдикдә исә о,

$$\hat{S}^2\chi_4 = 0, \quad \hat{S}_z\chi_4 = 0 \qquad (82.23)$$

тәнликләрини өдәјир. Бу һалда системин там спини вә онун z охуна пројексијасы сыфра бәрабәр олур ($S=0$, $S_z=0$), башга сөзлә, зәррәчикләрин спинләри бир-биринә антипарарел јөнәлмиш олур.

§ 83. ҺЕЛИУМ АТОМУНУН ГЕЈРИ-РЕЛЈАТИВИСТИК КВАНТ НӘЗӘРИЈЈӘСИ

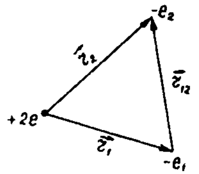
§81–82-дә көстәрдик ки, ики ејнизәррәчикли квант системләрдә сечилмәзлик принсипи вә зәррәчикләрин спин хассәләри мүһүм рол ојнајыр. Сечилмәзлик принсипи мүбадилә чырлашмасына, онунла әлагәдар вә классик аналогу олмајан мүбадилә енержисинин (зәррәчикләр арасында әлавә гаршылыглы тә'сирин) мејдана чыхмасына (бах 83.15), белә системләрин ја јалныз симметрик вә ја да јалныз антисимметрик һаллара малик олмасына кәтирир. Спинин варлығы исә системин енержисини там спинин гијмәтиндән асылы едир. Бүтүн бунлар нә классик нәзәријјәдә вә нә дә Бор нәзәријјәсиндә олмадығындан, әлбәттә онларын көмәјилә һелиум атомунун вә ја башга чохелектронлу атомларын нәзәријјәсини гурмаг мүмкүн олмазды.

Чох сајда ејни зәррәчикләрдән ибарәт системләрин квант нәзәријјәсинин маһијјәтини вә онун хүсусијјәтләрини ајдын көрмәк үчүн һелиум вә һелиума охшар (Li^+, Be^{++} вә и.а.) атомларын квант нәзәријјәси илә таныш олаг.

Чохелектронлу атомларын релјативистик квант нәзәријјәсини гурмаг мәсәләсини һәлл етмәк принсипиал мүмкүн олса да, о, олдугча мүрәккәб ријази чәтинликләрә кәтирир вә бу курсун чәрчивәсиндән кәнарда

дурур. Она көрә бурада чохелектронлу атомларын гејри-релјативистик квант нәзәријјәсинин шәрһи илә кифајәтләнәчәјик, беләки бу јахынлашма кејфијјәтчә ејнизәррәчикли системләрин квант нәзәријјәсинин бүтүн хүсусијјәтләрини өзүндә әкс етдирир.

Чохелектронлу атомлардан ән садәси һелиум атомудур. Онун нүвәси ики протондан ($Z=2$) вә ики нејтрондан ибарәтдир ($A=4$). Нүвәнин әтрафында ики електрон һәрәкәт едир (шәкил 37). Нүвәјә ваһид бир зәррәчик кими бахсаг, һелиум атому үч чисим проблеми олур. Үч чисим проблеми нәинки квант механикасында, һәтта классик механикада белә өз там һәллини тапмамышдыр. Она көрә бурада бир нечә јахынлашмадан истифадә олунур. Фәрз олунур ки, нүвә електронлара көрә сүкунәтдәдир (координат башланғычы нүвәдә јерләшир), нөгтәвидир вә әтрафында сферик симметрик електрик саһәси јарадыр. Бу фәрзијјәләр чәрчивәсиндә һелиум атому сферик симметрик електрик саһәсиндә һәрәкәт едән икиелектронлу квант системлә әвәз олунур.



Шәкил 37. Һелиум атомунда гаршылыглы тә'сир схеми.

Белә системин Шрединкер тәнлији (82.1) илә верилир.

$$(E - H_1 - H_2 - V(\vec{r}_1,\vec{r}_2) - W(\vec{p}_1,\vec{p}_2,\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{s}_1,\vec{s}_2))\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{1z},s_{2z}) = 0 \qquad (83.1)$$

Һәр истәнилән чохелектронлу атомда спин-орбитал гаршылыглы тә'сир, електронлар арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сирдән һәмишә кифајәт гәдәр кичик олмур. Она көрә бахылан атом үчүн (83.1) тәнлији һәлл олунанда спин-орбитал гаршылыглы тә'сирин нәзәрә алынмамасынын нә дәрәчәдә гануну олмасы мәсәләси әввәлчәдән дәгигләшдирилмәлидир.

Икиелектронлу системин там моментини тапмаг үчүн, јәгин ки, електронларын $\vec{L}_1$ вә $\vec{L}_2$ орбитал, $\vec{S}_1$ вә $\vec{S}_2$ спин моментләрини топламаг лазымдыр. Классик физикада онларын топланма ардычыллығынын мә'насы јохдур. Квант механикасында исә бу мәсәлә бөјүк әһәмијјәтә маликдир.

Бу дөрд момент ики јолла топлана биләр. Биринчи дәфә ики орбитал вә ики спин моментләрини топлајыб

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2,$$

там моменти онларын чәми кими тапмаг олар:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \qquad (83.2)$$

Бу һалда системин там моменти, онун там орбитал моменти илә там спин моментинин адитив чәминә бәрабәр олур. Бу јалныз о заман доғру олар ки, спин-орбитал гаршылыглы тә'сир електронларын нүвә илә гаршылыглы тә'сириндән кифајәт гәдәр зәиф олсун. Бу заман системин орбитал вә спин моментләри ајрылыгда сахланыр. Спин илә орбит арасындакы белә рабитәјә *Рессел-Саундерс* рабитәси дејилир.

Икинчи дәфә, әввәлчә һәр зәррәчик үчүн орбитал вә спин моментләрини топлајыб

$$\vec{J}_1 = \vec{L}_1 + \vec{S}_1, \ \vec{J}_2 = \vec{L}_2 + \vec{S}_2,$$

там моменти онларын чәми кими тапмаг олар.

$$\vec{J}_1 = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \qquad (83.3)$$

Белә рабитә *(jj) рабитә* адланыр. Бу һалда спин-орбитал рабитә күчлү (Кулон гаршылыглы тә'сир тәртибиндә) олур вә системин орбитал вә спин моментләри јох, там моменти сахланыр.

Биринчи вә икинчи јолла топланан векторлар арасындакы бучаглар мүхтәлиф олдуғундан, бу ики јолла тапылмыш системин там моментләри, үмумијјәтлә, бир-биринә бәрабәр олмур.

Атомда бу рабитәләрдән һансынын мөвчуд олмасы мәсәләси ики електрон арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сир енержиси илә спин-орбитал гаршылыглы тә'сир енержисинин нисби гијмәтләриндән асылыдыр. Бахылан атомда електронларын Кулон гаршылыглы тә'сир енержиси $K \sim Z^2 R\hbar$ (бах (75.1)) спин-орбитал гаршылыглы тә'сир енержиси исә (75.10)-дан $E^{c.o.} \sim Z^4 R\hbar\alpha^2$ олдуғундан Z-ин кичик гијмәтләриндә (јүнкүл атомлар) Кулон гаршылыглы тә'сир енержиси $E^{c.o.}$ -дан хејли бөјүк олур. Z-ин бөјүк гијмәтләриндә исә, әксинә $E^{c.o.}$ –спин ортибал гаршылыглы тә'сири Кулон гаршылыглы тә'сирә нисбәтән даһа мүһүм рол ојнајыр.

Һелиум атомунда (Z=2), јәгин ки, *Рессел-Саундерс* рабитәси мөвчуддур. Онун үчүн (83.1) тәнлијини һәлл етдикдә спин-орбитал гаршылыглы тә'сири нәзәрә алмасаг, һелиум атомунун енержиси, спинин орбитал моментинә көрә һансы истигамәтдә јөнәлмиш олдуғундан асылы олмајачаг вә бу һалда тәнлијин һәлли (82.2) ифадәси, јә'ни координат вә спин функсијаларынын һасили шәклиндә ахтарыла биләр. Сыфырынчы јахынлашмада фәза координатларындан асылы функсија (82.4), спин функсијалары исә (82.11) тәнликләрини өдәјир вә ахырынчылар үчүн (82.20) вә (82.21) ифадәләри гүввәдә галыр.

Беләликлә, Рессел-Саундерс рабитәси мөвчуд олдугда, орбитал вә спин моментләри ајрылыгда топландығындан (83.1) тәнлијинин һәллини јалныз фәза координатларындан вә јалныз спин дәјишәнләриндән асылы олан функсијаларын

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{1z},s_{2z}) = \Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)X(s_{1z},s_{2z})$$

һасили шәклиндә ахтармаг олар. Буну (83.1)-дә јеринә јазсаг, $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ үчүн

$$(\breve{H}_1 + \breve{H}_2 + V(\vec{r}_1,\vec{r}_2))\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \qquad (83.1')$$

тәнлијин алыныр. Бу тәнлик исә дәгиг һәлл олунмур. Һелиум атому үчүн ону әввәлчә һәјәчанланма нәзәријјәсинин көмәјилә һәлл едәк.

Ики електрон арасындакы $V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ Кулон гаршылыглы тә'сир енержисини һәјәчанланма енержиси гәбул едәк. Бу енержи зәррәчикләрин там енержисиндән кифајәт гәдәр кичик олмаса да, бу јолла алынан нәзәри нәтичәләр квант системин бүтүн хүсусијјәтләрини кејфијјәтчә өзүндә әкс етдирир, кәмијјәтчә исә тәчрүбәдән алынан ујғун нәтичәләрдән 15–20% фәргләнир.

Һәјәчанланма нәзәријјәсиндә әввәлчә һәјәчанланмамыш системин, јә'ни V=0 һала ујғун сыфырынчы јахынлашмада Шрединкер тәнлијинин һәлләри мә'лум олмалыдыр. Бу јахынлашмада (83.1') тәнлији (82.4) тәнлијинин үзәринә дүшдүјүндән онун хүсуси һәлләри (82.5) вә (82.7) илә верилмиш $\Psi_I^o(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ вә $\Psi_{II}^o(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ функсијаларынын үзәринә дүшүр. Һәр ики һәлл системин енержисинин (82.6) илә верилмиш

$$E^o = E^o_{n_1,n_2} = E^o_{n_1} + E^o_{n_2}$$

ејни бир мәхсуси гијмәтинә аиддир. Бурадан чыхыр ки, һелиум атомунун квант һалларынын мүбадилә чырлашма тәртиби икијә бәрабәрдир.

Һелиум атомунда електронлардан биринин дикәриндән асылы олмајан һәрәкәти Ze јүклү нөгтәви зәррәчијин јаратдығы мәркәзи саһәдәки һәрәкәти кими гәбул едилә билдијиндән, (82.5) вә (82.7)-јә дахил олан $\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)$ вә $\Psi_{n_{21}}(\vec{r}_2)$ функсијалары һидрокенәбәнзәр атомларын далға функсијасы үзәринә дүшүр (бах §40) вә бахылан јахынлашмада һелиум атомунун енержиси

$$E^o_{n_1n_2} = -R\hbar Z^2\left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (83.4)$$

олар. Бурада $n_1(n_1, l_1, m_1)$ вә $n_2(n_2, l_2, m_2)$ – електронларын ујғун һалларынын квант әдәдләридир.

Беләликлә, сыфырынчы јахынлашмада (83.1') тәнлијинин үмуми һәлли (82.8) илә вериләр:

$$\Psi^o(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = C_1\Psi^o_I + C_2\Psi^o_{II}. \qquad (83.5)$$

Һелиум атому һалында C_1 вә C_2 әмсаллары арасындакы әлагәни вә C_o әмсалыны тапмаг үчүн (83.1') тәнлијинә, јухарыда дедијимиз кими, һәјәчанланма методуну тәтбиг едәк.

Системин һалларынын чырлашмыш олдуғу һала ујғун стасионар һәјәчанланма методуна көрә (83.5)-ә дахил олан C_1 вә C_2 әмсаллары

$$(E^o_{n_1n_2} - E + V_{\alpha\alpha})C_\alpha + \sum_{\beta\neq\alpha} V_{\alpha\beta}C_\beta = 0 \qquad (83.6)$$

тәнлијини өдәмәлидир.

Һелиум атомунун квант һаллары ики тәртибли мүбадилә чырлашмасына малик олдуғундан бурада α, β индексләри 1, 2 гијмәтләрини алыр вә (83.6) тәнлији C_1 вә C_2 әмсалларына көрә ики тәнликли бирчинс чәбри системә чеврилир:

$$
\begin{aligned}
&(E^o_{n_1n_2} - E + V_{11})C_1 + V_{12}C_2 = 0, \\
&(E^o_{n_1n_2} - E + V_{22})C_2 + V_{21}C_1 = 0.
\end{aligned}
\tag{83.7}
$$

Бурада

$$
V_{\alpha\beta} = \int \Psi^{o*}_{\alpha}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\, V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\Psi^{o}_{\beta}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \tag{83.8}
$$

һәјәчанланма енержи операторунун матриса елементләри, $\Psi^o_\alpha(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ исә $\alpha,\beta = \mathrm{I},\mathrm{II}$ гијмәтләринә ујғун (82.5) вә (82.7) илә верилмиш Ψ^o_I вә Ψ^o_{II} функсијаларыдыр.

(83.7) системинин гејри-тривиал (сыфырдан фәргли) һәлләринин мөвчуд олмасы үчүн C_1 вә C_2-нин әмсалларындан дүзәлмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр:

$$
\begin{vmatrix} V_{11} - \varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \tag{83.9}
$$

бурада

$$
\varepsilon = E - E^o_{n_1n_2} \tag{83.10}
$$

әвәзи көтүрүлмүшдүр.

Ψ^o_I вә Ψ^o_{II} функсијаларыны (82.5) вә (82.7)-дән (83.8)-дә јазсаг,

$$
V_{11} = \int \Psi^{o*}_{I}\frac{e^2}{r_{12}}\Psi^o_I(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2\int\frac{1}{r_{12}}\Psi^*_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi^*_{n_2}(r_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)
$$

$$
\tag{83.11}
$$

$$
V_{22} = \int \Psi^{o*}_{II}\frac{e^2}{r_{12}}\Psi^o_{II}(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2\int\frac{1}{r_{12}}\Psi^*_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi^*_{n_2}(r_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)
$$

вә еләчә дә

$$
V_{12} = \int \Psi^{o*}_{I}\frac{e^2}{r_{12}}\Psi^o_{II}(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2\int\frac{1}{r_{12}}\Psi^*_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1)\Psi^*_{n_2}(r_2)\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)
$$

$$
\tag{83.12}
$$

$$
V_{21} = \int \Psi^{*}_{II}\frac{e^2}{r_{12}}\Psi^o_{I}(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = e^2\int\frac{1}{r_{12}}\Psi^*_{n_2}(\vec{r}_2)\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi^*_{n_1}(r_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)
$$

алынар.

$\vec{r}_1(x_1,y_1,z_1)$ вә $\vec{r}_2(x_2,y_2,z_2)$ дәјишәнләринин интеграллама областы еjни олдуғундан (83.11) вә (83.12)-дә онлары гаршылыглы әвәз етдикдә интегралламанын нәтичәси дәјишмәз, јә'ни

$$
V_{11}=V_{22} \quad \text{вә} \quad V_{12}=V_{21} \tag{83.13}
$$

олар.

(83.11) вә (83.12) ифадәләринин физики маһијјәтини баша дүшмәк үчүн

$$
\begin{aligned}
&\rho_{n_1n_1}(\vec{r}_1) = \Psi^*_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_1}(\vec{r}_1) \qquad \rho_{n_2n_2}(\vec{r}_2) = \Psi^*_{n_2}(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2) \\
&\rho_{n_1n_2}(\vec{r}_1) = \Psi^*_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1) \qquad \rho_{n_2n_1}(\vec{r}_2) = \Psi^*_{n_2}(\vec{r}_2)\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)
\end{aligned}
\tag{83.14}
$$

ишарәләрини дахил едәк. Бурада $\rho_{n_1n_1}(\vec{r}_1)$ вә $\rho_{n_2n_2}(\vec{r}_2)$ ујғун олараг $\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)$ вә $\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)$ һалларында олан електронларын фәзада пајланма еһтимал сыхлыгларыны, $\rho_{n_1n_2}(\vec{r}_1)$ вә $\rho_{n_2n_1}(\vec{r}_2)$ исә гисмән Ψ_{n_1} вә гисмән дә Ψ_{n_2} вә әксинә һалларда олан електронларын фәзада пајланма еһтимал сыхлыгларыны ифадә едир. Бу ахырынчылар *мүбадилә сыхлыглары* адланыр.

(83.14)-ә әсасән (83.10) вә (83.11) ифадәләрини

$$
K = V_{11} = V_{22} = e^2\int\frac{1}{r_{12}}\rho_{n_1n_1}(\vec{r}_1)\rho_{n_2n_2}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)
$$

$$
\tag{83.15}
$$

$$
A = V_{12} = V_{21} = e^2\int\frac{1}{r_{12}}\rho_{n_1n_2}(\vec{r}_1)\rho_{n_2n_1}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)
$$

кими јазмаг олар. (83.15)-ә дахил олан K интегралы, әјани олараг, фәзада $\rho^c_{n_1n_1} = e\rho_{n_1n_1}$ вә $\rho^c_{n_2n_2} = e\rho_{n_2n_2}$ сыхлыглары илә пајланмыш ики електрик јүкү арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сир енержисини ифадә едир. Бурадакы A интегралыны исә белә әјани шәкилдә мә'наландырмаг мүмкүн дејилдир. Формал шәкилдә исә она, јүкләри $e\rho_{n_1n_2}$ вә $e\rho_{n_2n_1}$ сыхлыглары илә пајланмыш ики електрик јүкүнүн гаршылыглы тә'сир енержиси кими бахмаг олар. Бу енержи електронларын әталәт мәркәзләринин координатларынын јердәјишмәси (мүбадиләси) нәтичәсиндә мејдана чыхдығындан она *мүбадилә енержиси* дејилир.

Гејд едәк ки, мүбадилә енержисинин классик аналогу јохдур. Онун мөвчуд олмасы квант механикасынын ән әсас вә јени нәтичәләриндән биридир. Дикәр тәрәфдән мүбадилә енержисинә һеч дә зәррәчикләр арасындакы јалныз Кулон гаршылыглы тә'сирин нәтичәси кими бахмаг олмаз.

Кулон гаршылыглы тә'сир енержиси јериндә истәнидән башга бир тәбиәтли классик $V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ гаршылыглы тә'сир енержиси дурмуш олсајды да мүбадилә енержиси мејдана чыхарды. Беләликлә, мүбадилә енержиси квант механикасынын әсас принсипләриндән бири олан сечилмәзлик принсипиндән билаваситә чыхан нәтичәдир, она көрә дә, о јалныз квант тәбиәтлидир.

(83.15) әвәзләри әсасында (83.9) детерминанты

$$\begin{vmatrix} K-\varepsilon & A \\ A & K-\varepsilon \end{vmatrix} = 0 \qquad (83.9')$$

шәклиндә јазаг. Онда

$$(K-\varepsilon)^2-A^2=0; \qquad \varepsilon = K \pm A \qquad (83.16)$$

олар. Електронларын гаршылыглы тә'сиринин һелиум атомунун енержисинә вердији әлавә үчүн $\varepsilon=\varepsilon_1=K+A$ вә $\varepsilon=\varepsilon_2=K-A$ кими ики гијмәт алыныр. ε-нун бу гијмәтләринә ујғун C_1 вә C_2 әмсаллары арасындакы әлагәни тапмаг үчүн (83.7) тәнликләрини

$$\begin{aligned}(K-\varepsilon)C_1 + AC_2=0 \\ (K-\varepsilon)C_2 + AC_1=0\end{aligned} \qquad (83.7')$$

кими јазаг. (83.7′) системиндә ε-нун әвәзиндә онун ε_1 вә ε_2 көкләрини јазсаг, $\varepsilon=\varepsilon_1$-дә $C_1=C_2=C_o$, $\varepsilon=\varepsilon_2$ исә $C_1=-C_2=C_o$ олар. Бунлара ујғун олараг биринчи һалда (83.5) вә (83.10)-дан

$$\Psi^S(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=C_o(\Psi_I^o+\Psi_{II}^o), \qquad E^S=E^o_{n_1n_2}+\varepsilon_1 \qquad (83.17)$$

икинчи һалда исә

$$\Psi^A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=C_o(\Psi_I^o-\Psi_{II}^o), \qquad E^A=E^o_{n_1n_2}+\varepsilon_2 \qquad (83.18)$$

олар. C_o әмсалыны тапмаг үчүн Ψ^S вә Ψ^A функсијаларынын нормаланма шәртиндән истифадә олунур:

$$\int \Psi^{*S}\Psi^S(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=\int \Psi^{*A}\Psi^A(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=1$$

бурадан $2C_o^2=1$, вә $C_o=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$ олур. Беләликлә

$$\begin{aligned}\Psi^S &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)+\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1)\Big), \\ \Psi^A &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)-\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1)\Big).\end{aligned} \qquad (83.19)$$

Сечилмәзлик принсипиндән алыныр ки, ејни фермионлардан тәшкил олунмуш системин һаллары зәррәчикләрин вә спин координатларынын јердәјишмәсинә көрә антисимметрик функсија илә тәсвир олунмалыдыр, јә'ни $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{1z}s_{2z})$ функсијасы үчүн

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2 s_{1z}s_{2z})=\chi\Psi=-\chi(s_{2z},s_{1z})\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=-\chi(s_{1z}s_{2z})\Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)= \\ =-\Psi(s_{2z}s_{1z}\vec{r}_1,\vec{r}_2)$$

бәрабәрлији өдәнмәлидир.

Һелиум атому ики фермионлу (нүвәнин тәркиби нәзәрә алынмадыгда) систем олдуғундан онун мүмкүн квант һалларыны тәсвир едән үмуми функсија $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ вә s_{1z}, s_{2z} дәјишәнләринин јердәјишмәсинә көрә антисимметрик олмалыдыр.

Бу ики һалда мүмкүндүр: а) електронларын әталәт мәркәзинин координатларындан асылы функсија симметрик, спин функсијасы исә антисимметрик:

$$\Psi_1^A=\Psi^S(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi^A(s_{1z},s_{2z}), \qquad E^s=E^o_{n_1n_2}+K+A \qquad (83.20)$$

б) Координатлардан асылы функсија антисимметрик, спин функсијасы исә симметрик:

$$\Psi_2^A=\Psi^A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\chi^S(s_{1z},s_{2z}), \qquad E^A=E^o_{n_1n_2}+K-A \qquad (83.21)$$

Бундан габагкы параграфда көстәрмишдик ки, (82.20) антисимметрик спин функсијасы $\chi_4=\chi^A$ ики фермионлу системин там спининин вә онун z оху бојунчакы пројексијасынын сыфра бәрабәр олдуғу һала ујғундур. Демәли, һелиум атомунун Ψ_1^A функсијасы илә тәсвир олунан һалларда електронларын спинләри антипаралел јөнәлмиш олур. Белә һаллара малик һелиум атому *параһелиум* адланыр.

Ејнилә бунун кими, (82.2[1]) симметрик спин функсијалары ики фермионлу системин спининин ваһидә бәрабәр олан һала ујғундур. Јәгин ки, һелиум атомунун Ψ_2^A илә тәсвир олунан һалларында електронларын спинләри паралел олуб, там спин ваһидә бәрабәрдир: S=1; $\chi^S=\chi_1$-ә ујғун һалда там спинин z оху үзрә пројексијасы мүсбәт ваһид (S_z=1); $\chi^S=\chi_2$ һалында мәнфи ваһид (S_z=–1) вә $\chi^S=\chi_3$ һалында исә сыфра (S_z=0) бәрабәрдир. Ахырынчы һалда атомун спини z охуна перпендикулјар јөнәлмиш олур. Белә һаллара малик һелиум атому *ортоһелиум* адланыр.

Параһелиум һалында фәза координатларындан асылы симметрик функсија јеканә бир χ_4 спин функсијасына вурулур. Атомун $\vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$ там моментинә ујғун J квант әдәди, моментләрин топланма гајдасына көрә (§ 73) $J=L+S$, $J=L+S-1,\ldots$, $J=L-S$ гијмәтләрини алдығындан, $S=0$ оланда $J=L$ кими јеканә бир гијмәт алыр. Она көрә дә спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сирләр нәзәрә алындыгда белә (83.17) илә верилмиш E^s сәвијјәси парчаланмыр. Һелиум атомунун белә һаллары *синглет һаллар* адланыр вә харичи магнит саһәсинин интенсивлијинин истәнилән гијмәтиндә параһелиум үчүн нормал Зејеман еффекти (бах §77) мүшаһидә олунур.

Ортоһелиумун һалларында исә атомун спини $S=1$ олдуғундан J квант әдәди $J=L+1$, L, $L-1$ кими үч гијмәт алыр. L-ин верилмиш гијмәтиндә ортоһелиумун сәвијјәси чырлашмыш олур. Спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сирләр нәзәрә алындыгда бу чырлашма үмумијјәтлә гисмән (релјативистик еффектләр нәзәрә алынмадыгда) ортадан көтүрүлүр вә ортоһелиумун E^A сәвијјәси үч сәвијјәјә парчаланыр. Һелиум атомунун белә һаллары *триплет һаллар* адланыр.

Лакин гејд едәк ки, белә парчаланма елә ортоһалларда баш верир ки, онларда атом орбитал моментә малик олсун. Ортоһелиумун електронлары $(n_1s)^1$ $(n_2s)^1$ кими һалларда оланда атом орбитал моментә малик олмур. Атомда мүәјјән (фиксә едилмиш) истигамәт олмадығындан спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сирләр белә һалларын парчаланмасына кәтирмир. $(1s)^1$ $(2p)^1$ вә бунун кими орбитал моментә малик бүтүн башга һалларда атомда мүәјјән истигамәт мејдана чыхыр вә онун спин моментинин бу истигамәтдәки пројексијасынын мүхтәлиф гијмәтләринә (L-ин верилмиш гијмәтиндә) енержинин дә мүхтәлиф гијмәтләри уйғун кәлир вә бахылан сәвијјә парчаланыр. Ортоһелиумун $(n_1s)^1$ $(n_2s)^1$ һаллара малик олмасына бахмајараг, зәиф магнит саһәсиндә ортоһелиум үчүн аномал Зејеман еффекти мүшаһидә олунур (бах § 78).

Беләликлә, јухарыда дедикләримиздән чыхыр ки, електронларын гаршылыглы тә'сири нәтичәсиндә һелиум атомунун енержисинә олан дүзәлиш, спинин гијмәт вә истигамәтиндән асылы олур. Спинин гијмәтиндән вә онун орбитал моментә нәзәрән јөнүндән асылы олараг атом ја синглет (параһелиум) вә ја да триплет (ортоһелиум) һаллара малик олур.

Мүхтәлиф һаллар үчүн апарылан һесабламалар K вә A интегралларынын һәмишә мүсбәт олдуғуну көстәрир. Зәррәчикләрин Кулон гаршылыглы тә'сири нәтичәсиндә енержијә олан ε_1 вә ε_2 дүзәлишләри исә јалныз A-нын габағындакы ишарә илә фәргләнир. Енержинин (83.20) вә (83.21)-дә верилмиш ифадәләриндән көрүнүр ки, електронларын (n,l,m) квант әдәдләри илә тә'јин олунан ејни бир һалында пара- вә ортоһелиумун енержиләри мүхтәлифдир. Бу $(1s)^1$ $(2p)^1$ һалы үчүн апарылмыш һесабламалардан даһа ајдын көрүнүр.

Доғрудан да, ортоһелиумун $\Psi^A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ координат функсијасы $\vec{r}_1=\vec{r}_2$-дә сыфра бәрабәр олур. Демәли, електронлар ортоһелиумда параһелиумундакына нисбәтән бир-бириндән даһа узаг мәсафәдә јерләшир. Бу исә електронлар арасындакы дәф гүввәсинин зәифләмәсинә, јә'ни енержинин азалмасына сәбәб олур. Демәли, спинләри парал(е)л олан електронлар арасында мејдана чыхан гаршылыглы тә'сир спинләри антипаралел олан һаллакына нисбәтән зәифдир. Бу да јәгин да, сечилмәзлик принсипиндән чыхан әсас нәтичәләрдән биридир.

Гејд едәк ки, һәр ики нөв һелиум ганалы систем тәшкил едир, јә'ни онлар бири дикәринә кечә билмир.

§ 81-дә исбат етмишдик ки, ејни зәррәчикләрдән тәшкил олунмуш системин Һамилтон оператору зәррәчикләрин әталәт мәркәзинин координатларынын јердәјишмәсинә көрә симметрик галдыгда, башланғыч анда систем симметрик (антисимметрик) функсија илә тәсвир олунарса, истәнилән сонракы анда да о, симметрик (антисимметрик) функсија илә тәсвир олуначагдыр.

Бахылан һалда спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сирләр нәзәрә алынмыр. Һелиум атомунун $\hat{H}$ Һамилтон оператору нәинки харичи саһә олмадыгда, һәтта харичи шүаланма (електромагнит) саһәси олдугда белә симметриклик шәртини сахлајыр, чүнки харичи шүаланма саһәси електронлара ејни шәкилдә тә'сир едир.

Доғрудан да, шүаланма саһәсинин електронун јүкү илә гаршылыглы тә'сир енержиси $E^e=ea\mathcal{E}$ бәрабәрдир (бурада a–атомун өлчүсү, e–електрик јүкү, $\mathcal{E}$ – шүаланма саһәсинин електрик векторудур). Һәмин саһәнин електронун спин магнит моменти илә тә'сир енержиси исә $E^м=-\mu H=\dfrac{e\hbar}{2mc}H$-дыр. Шүаланма саһәси үчүн $|\mathcal{E}|=|H|$ олдуғундан

$$\frac{E^м}{E^e}\sim\frac{\hbar}{2mca}$$

олар (m –електронун күтләси, c–ишығ сүр'әтидир). Атомда електронун импулсунун тәртиби $p=m\upsilon=\hbar k\sim\dfrac{\hbar\omega}{c}\sim\dfrac{2\pi\hbar}{\lambda c}$, λ– атомда електронун де-Бројл далғасынын узунлуғудур. λ атомун өлчүсү тәртибиндә (λ~a) олдуғундан $m\upsilon\sim\dfrac{\hbar}{a}$ вә бурадан $\upsilon\sim\dfrac{\hbar}{ma}$ електронун атомдакы сүр'әти олур. Буну јухарыда нәзәрә алсаг,

$$\frac{E^м}{E^e}\sim\frac{\upsilon}{c}\sim\frac{1}{100}.$$

Шүаланма саһәсинин спин магнит моменти илә гаршылыглы тә'сири, онун електрик јүкү илә олан гаршылыглы тә'сириндән тәхминән јүз дәфә кичик олмасы көстәрир ки, шүаланма саһәсинин спинин истигамәтини дәјишә билмәси еһтималы олдугча кичикдир. Демәли, шүаланма саһәсинин тә'сири илә ортоһелиуму параһелиума вә әксинә чевирмәк, демәк олар ки, мүмкүн дејилдир.

Инди дә һелиум атомунун әсас һалынын орто- вә параһаллар групунун һансына аид олдуғуну мүәјјән едәк. Бунун үчүн фәрз едәк ки, електронларын һәр икиси ејни бири $n_1=n_2$ һалындадыр. $\Psi^A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ координат функсијасы

$$\Psi^A(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=-\Psi^A(\vec{r}_2,\vec{r}_1) \qquad (83.22)$$

шәртини өдәдијинә көрә $\vec{r}_1=\vec{r}_2=\vec{r}$ нәтичәсиндә $\Psi^A=0$ олур. Башга сөзлә, Ψ^A үчүн $\vec{r}_1=\vec{r}_2$ нөгтәси дүјүн нөгтәсидир. Билдијимиз кими, квант механики системин әсас һалынын далға функсијасы дүјүн нөгтәсинә малик дејилдир. Демәли, һелиумун әсас һалы ортоһаллар групуна јох, параһаллар групуна аиддир. Параһалларда електронларын спинләри антипаралел олдуғундан електронлар (n,l,m) квант әдәдләри ејни олан һалда ола биләр (онларын һалы дөрдүнчү $m_S=\pm\dfrac{1}{2}$ квант әдәди илә фәргләнир).

(n,l,m) һалларындан ән кичик енержијә малик олан һал (1,0,0), јахуд $1s$ һалыдыр. Демәли, һелиумун әсас һалы $(1s)^1$ $(1s)^1$ һалы олмалыдыр. Јәгин ки, бу һал $\Psi_{11}^S=\Psi_{1S}(\vec{r}_1)\Psi_{1S}(\vec{r}_2)$ функсијасы илә тәсвир олунар.

Ортоһелиумун һәр ики електрону һелиум атомунун $(1s)^1$ $(1s)^1$ әсас һалында ола билмир (онларын бүтүн дөрд n,l,m,m_S квант әдәдләри ејнидир). Она көрә дә ортоһелиумун бүтүн һаллары һәјәчанланмыш һаллар олур. Онлардан минимум енержијә малик оланы (1,0,0) вә (2,0,0) ујғун вә $\Psi^A=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_{1S}(\vec{r}_1)\Psi_{2S}(\vec{r}_2)-\Psi_{1S}(\vec{r}_2)\Psi_{2S}(\vec{r}_1)\right)$ функсијасы илә тәсвир олунан $(1s)^1$ $(2s)^1$ һалыдыр. Һелиум атому узун мүддәт бу һалда гала билир, беләки, јухарыда гејд етдијимиз кими, атомун бу һалдан $(1s)^1(1s)^1$ әсас һалына кечмәси үчүн електронлардан биринин спини истигамәтини дәјишмәлидир, белә кечидин еһтималы исә харичи тә'сирсиз олдугча чүзидир. Буна көрә һелиум атомунун ортоһалларда јашама мүддәти кифајәт гәдәр бөјүкдүр вә онлар *метастабил һаллар* адланыр. Беләликлә, *синглет* вә *триплет* һалларда олан һелиум атомларына ики мүхтәлиф нөв газ кими бахмаг олар.

Синглет һалларда олан һелиум атомлары спин магнит моментинә малик олмадығына көрә онлар *диамагнит газ*, триплет һалларда олан атомлар спин магнит моментинә малик олдуғуна көрә исә – *парамагнит газ* әмәлә кәтирир.

Лакин харичи тә'сир васитәсилә, мәсәлән, һелиум газыны кифајәт гәдәр бөјүк енержили електронлар дәстәси илә бомбардман етдикдә, јәгин ки, параһелиуму ортоһелиума вә әксинә чевирмәк олар. Бу һалда дүшән електронлардан бири һелиумун ики електрону илә ејни үч фермионлу систем тәшкил едир. Белә системә сечилмәзлик принсипини тәтбиг етсәк, дүшән електрон спини онун спининин әксинә јөнәлмиш ато-

мун електронларындан бирини вуруб чыхараражг, атомда онун јерини тута биләр вә бу да параһелиумун ортоһелиума вә әксинә чеврилмәсинә кәтирәр.

§ 84. ҺЕЛИУМ АТОМУНУН ӘСАС ҺАЛЫ

Һелиум атомунун һәр ики електрону онун $(1s)^1$ $(1s)^1$ әсас һалында оларса, (82.5) вә (82.7) илә верилмиш Ψ_I^o вә Ψ_{II}^o функсијалары бир-биринин үзәринә дүшүр вә бу һал $\Psi^S=\Psi_{1S}(\vec{r}_1)\Psi_{1S}(\vec{r}_2)$ симметрик функсија илә тәсвир олунур. Ики фермионлу системин антисимметрик $\Psi^A(\vec{r}_1,\vec{r}_2,s_{1z},s_{2z})$ функсијасыны алмаг үчүн $\Psi^S(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$-и (82.21) илә верилмиш антисимметрик $\chi_4(s_{1z},s_{2z})$ – спин функсијасына вурмаг лазымдыр. χ_4 исә системин там спини сыфра бәрабәр олан параһала ујғундур. $(1s)^1(1s)^1$ һалдан фәргли дикәр һалларда електронлар олмадығындан (83.15)-ә дахил олан $\rho_{n_1n_2}$ вә $\rho_{n_2n_1}$ еһтимал сыхлыглары сыфра бәрабәр олур, мүбадилә енержиси ортаја чыхмыр вә һелиум атомунун әсас һалынын енержиси (83.20) вә ја (83.21)-дән

$$E^S=E^A=E_{1S}^o+E_{1S}^o+K \qquad (84.1)$$

ифадәси илә тә'јин олунур.

Електронлар арасындакы гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда електронларын һәр биринин ајрылыгда һәрәкәтинә һидрокенәбәнзәр атомдакы һәрәкәти кими бахмаг олар вә онун $1s$ һалынын енержиси (75.1)-ә әсасән

$$E_{1S}^o=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}=-\frac{Z^2e^2}{2a}, \qquad (84.2)$$

далға функсијасы исә (40.40)-дан

$$\Psi_{1S}^o(\vec{r})=\left(\frac{4Z}{a}\right)^{3/2}e^{-\frac{Zr}{a}}Y_{oo}(\theta,\varphi)=R_{10}(r)Y_{oo} \qquad (84.3)$$

олар, $a=\dfrac{\hbar^2}{me^2}$ – Борун биринчи орбитинин радиусудур.

Ики електрон арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сир енержисинә кәлдикдә исә, о, (83.15)-дән

$$K=e^2\int\left|\Psi_{1S}(r_1)\right|^2\left|\Psi_{1S}(\vec{r}_2)\right|^2\frac{(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)}{r_{12}} \qquad (84.4)$$

кими тə'јин олунар. (84.4) интегралыны һесабламаг үчүн $\frac{1}{r_{12}}$ -ни сферик функсијалар үзрə сыраја ајыраг.

$$\frac{1}{r_{12}}=\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}=\begin{cases}\frac{4\pi}{r_1}\sum_{l,m}\frac{1}{2l+1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l Y_{lm}(\theta_1,\varphi_1)Y^*_{lm}(\theta_2,\varphi_2) & r_1>r_2\\ \frac{4\pi}{r_2}\sum_{l,m}\frac{1}{2l+1}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l Y^*_{lm}(\theta_1,\varphi_1)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2) & r_2>r_1\end{cases} \tag{84.5}$$

бурада θ_1,φ_1 вə θ_2,φ_2 – ујғун олараг $\vec{r}_1$ вə $\vec{r}_2$ векторларынын полјар бучагларыдыр. (84.3) вə (84.5) ифадəлəрини (84.4)-дə јеринə јазыб, бучаглар үзрə интеграллар алсаг, $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ функсијаларынын орто-нормаллама шəртиндəн $l=0$, $m=0$-а ујғун һəдлəрдəн башга сыранын бүтүн һəдлəри сыфра бəрабəр олар. Онда (84.4)

$$K=\frac{4e^2}{\pi}\left(\frac{Z}{a}\right)^6\int_0^\infty e^{-\frac{2Zr_1}{a}}\left[\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1}e^{-\frac{2Zr_2}{a}}r_2^2dr_2+\int_{r_1}^\infty e^{-\frac{2Zr_2}{a}}r_2^2dr_2\right]r_1^2dr_1 \tag{84.6}$$

шəклə дүшəр.

Бу интеграллары һиссə-һиссə ачараг, електронларын Кулон гаршылыглы тə'сир енержиси үчүн

$$K=\frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a} \tag{84.7}$$

гијмəтини аларыг. (84.2) вə (84.7)-ни (84.1)-дə јеринə јазанда, һəјəчанланма нəзəријјəсинин биринчи јахынлашмасында һелиум атомунун əсас һалынын енержиси үчүн

$$E=-\frac{Z^2e^2}{a}+\frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a}=-\frac{Ze^2}{a}\left(Z-\frac{5}{8}\right) \tag{84.8}$$

гијмəти алыныр.

Инди дə һелиум атомунун ионизасија енержисини, јə'ни атомун биринчи орбитиндəн ($1s$ һалындан) електрону гопарыб чыхармаг үчүн лазым олан енержини тапаг. Бир дəфə ионизасија олунмуш һелиум атому һидрокенəбəнзəр атома чеврилир. һидрокенəбəнзəр атомда əсас һалда олан електронун нүвə илə рабитə енержиси E^o_{1S}-а (бах (84.2)) бəрабəрдир. Һелиум атомунун əсас һалынын E енержиси исə (84.8) илə верилир. Ионизасија енержиси I атома кəнардан верилдијиндəн о мүсбəт вə онун гијмəти E^o_{1S} илə E-нин фəргинə бəрабəр олмалыдыр:

$$I=E^o_{1S}-E=\frac{Ze^2}{2a}\left(Z-\frac{5}{8}\right). \tag{84.9}$$

Һелиум атомунда Z=2 олдуғундан онун ионизасија енержиси үчүн нəзəри алынмыш

$$I^{\text{нз}}=0{,}75\frac{e^2}{a} \tag{84.10}$$

гијмəти, тəҹрүбəдə јахшы мə'лум олан

$$I^{\text{тҹ}}=0{,}9\frac{e^2}{a} \tag{84.11}$$

гијмəтиндəн хејли фəрглəнир. Бунун сəбəби K һəјəчанланма енержисинин E^o_{1S} енержисиндəн кифајəт гəдəр кичик олмамасыдыр $\left(\frac{K}{E_{1S}}\approx\frac{1}{3}\right)$. Буна көрə дə һəјəчанланма нəзəријјəсинин бахылан һала тəтбиги кобуд характер дашыјыр.

Һəјəчанланма нəзəријјəсинин методуна нисбəтəн даһа дəгиг методлар һəјəчанланмамыш һалын тəнлијиндə електронларын гаршылыглы тə'сирини нəзəрə алмаға имкан верир вə бу тəнлик елə сечилир ки, онда сыфырынҹы јахынлашмада дəјишəнлəрə ајырмаг əмəлијјатыны апармаг мүмкүн олсун.

Белə методлардан бири *Ритсин вариасија* методудур (бах §36). Вариасија методу васитəсилə алынан нəтиҹəлəр о заман даһа дəгиг олур ки, гаршылыглы тə'сир нəтиҹəсиндə ортаја чыхан əлавə енержи сыфырынҹы јахынлашмаја ујғун енержи тəртибиндə олсун. Һелиум атомунда (83.15) илə верилмиш K гаршылыглы тə'сир енержиси (82.6) илə верилмиш E^o енержиси тəртибиндəдир. Она көрə дə һəјəчанланма нəзəријјəси тəҹрүбəјə ујғун нəтиҹəјə кəтирə билмир.

Инди дə вариасија методу васитəсилə һелиум атомунун əсас һалынын енержисини вə онун далға функсијасыны тапаг. Јухарыда гејд етдик ки, һелиум атомунун əсас һалында һəр ики електрон $(1s)^1$, $(1s)^1$ һалында олур. Сыфырынҹы јахынлашмада електронларын ајрылыгда һəрəкəти һидрокенəбəнзəр атомлардакы һəрəкəти хатырлатдығындан, əсас һалын далға функсијасы $\Psi_{1S}(\vec{r}_1)$ вə $\Psi_{1S}(\vec{r}_2)$ һидрокен атомунун далға функсијаларынын һасили шəклиндə көтүрүлə билəр. Бу һасилə α вариасија параметрини дахил едиб, нормаландырылмыш сынаг функсијасыны (82.3) функсијасына əсасəн

$$\Psi(\alpha)=\Psi_{1S}(\vec{r}_1)\Psi_{1S}(\vec{r}_2)=\frac{\alpha^3}{\pi}e^{-\alpha(r_1+r_2)} \tag{84.12}$$

шәклиндә сечмәк вә $J(\alpha)$ функсионалыны

$$J(\alpha)=\int \Psi^{*}\breve{H}\Psi(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \tag{84.13}$$

интегралындан һесабламаг олар.

Ики фермионлу системин Һамилтон оператору

$$\breve{H}=\breve{H}_1(\vec{r}_1)+H_2(\vec{r}_2)+V(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \tag{84.14}$$

вә

$$\breve{H}_i=\frac{p_i^2}{2\mu}-\frac{Ze^2}{r_i}(i=1,2), \quad V=\frac{e^2}{r_{12}}=\frac{e^2}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}$$

олдуғундан $J(\alpha)$ функсионалы

$$J(\alpha)=\int \Psi^{*}(\vec{r}_1)\breve{H}_1\Psi(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)+\int \Psi^{*}(\vec{r}_2)\breve{H}_2\Psi(\vec{r}_2)(d\vec{r}_2)+$$

$$+e^2\int |\Psi(\vec{r}_1)|^2|\Psi(r_2)|^2\frac{(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|} \tag{84.15}$$

шәклинә дүшәр. (84.15)-нин биринчи һәддиндә $\Psi(\vec{r}_2)$ вә икинчи һәддиндә исә $\Psi(\vec{r}_1)$ функсијалары үчүн нормаланма шәртинин өдәнилдији нәзәрә алынмышдыр. Биринчи вә икинчи интеграллар §36-да һесабланмыш, ахырынчы интегралын гијмәти исә (84.7) илә верилмишдир. Беләликлә $J(\alpha)$ үчүн

$$J(\alpha)=\frac{\hbar^2\alpha^2}{\mu}-2\alpha Ze^2+\frac{5}{8}\alpha e^2 \tag{84.16}$$

ифадәси алыныр.

α параметринин системин енержисинин минимумуна ујғун гијмәти $\frac{dJ(\alpha)}{d\alpha}=0$ екстремаллыг шәртиндән тапылыр:

$$\alpha_o=\frac{\mu e^2}{\hbar^2}(Z-\frac{5}{16})=\frac{1}{a}(Z-\frac{5}{16}) \tag{84.17}$$

вә бурадан һелиум атомунда електрон системинин минимум енержиси

$$E^{min}=J(\alpha_o)=-\frac{e^2}{a}\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2 \tag{84.18}$$

вә ујғун далға функсијасы

$$\Psi=\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z^*}{a}\right)^3 e^{-\frac{Z^*(r_1+r_2)}{a}} \tag{84.19}$$

олур, бурада

$$eZ^*=e(Z-\frac{5}{16}) \tag{84.20}$$

нүвәнин еффектив јүкү адланыр.

E^{min} илә һәјәчанланма нәзәријјәсиндә һелиумун әсас һалынын E енержиси үчүн (84.8) гијмәти арасындакы фәргин мејдана чыхмасына сәбәб, јәгин ки, електронлардан биринин дикәринә тә'сири нәтиҹәсиндә нүвәнин мүсбәт јүкүнүн екранлашдырылмасы олар.

Вариасија методунда I ионизасија енержиси үчүн, (84.9)-ја охшар олараг, (84.2) вә (84.18)-дән

$$I=E_{1S}-E^{min}=\frac{e^2}{2a}(Z^2-\frac{5}{4}Z+\frac{25}{128}) \tag{84.21}$$

гијмәти алыныр. (84.21)-дән һелиум атомунун (Z=2) ионизасија енержисинин нәзәри гијмәти

$$I\approx 0{,}85\frac{e^2}{a} \tag{84.22}$$

олар. Бу гијмәт (84.11) илә верилмиш тәҹрүби гијмәтә хејли јахындыр.

§ 85. ҺЕЛИУМ АТОМУНУН ҺӘЈӘҸАНЛАНМЫШ ҺАЛЛАРЫ

Нејтрал һелиум атомунун електронлардан биринин $1s$ һалында, икинчисинин исә ихтијари (n,l) һәјәҹанланмыш һалда олдуғуну фәрз едәк. Дикәр тәрәфдән гәбул едәк ки, $1s$ һалында олан електрон нүвәнин бир јүкүнү там екранлашдырыр. Беләликлә сыфырынҹы јахынлашмада $1s$ електрону нүвәнин $+2e$ јүкү саһәсиндә, (n,l) һалында олан електрон исә нүвәнин бир $+e$ јүкү саһәсиндә һәрәкәт едәҹәкдир. Онда $1s$ һалындакы електрон үчүн

$$\breve{H}_1\Psi_{1S}(\vec{r}_1)=E_{1S}\Psi_{1S}(\vec{r}_1), \quad \breve{H}_1=\frac{\vec{p}_1^2}{2\mu}-\frac{2e^2}{r_1} \tag{85.1}$$

(n, l) һалындакы електрон үчүн исә

$$\breve{H}_2\Psi_{nlm}(\vec{r}_2)=E_n\Psi_{nlm}(\vec{r}_2), \quad \breve{H}_2=\frac{\vec{p}_2^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r_2} \tag{85.2}$$

тәнликләри өдәниләр, һәр ики тәнлик һидрокенәбәнзәр атомларын тәнликләри олдуғундан, онларын һәлләри § 40-а көрә

$$\Psi_{1S} = R_{10}(r_1)Y_{oo}(\theta_1,\varphi_1) \qquad (85.3)$$
$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r_2)Y_{lm}(\theta_2,\varphi_2)$$

олар. Белә һелиум атомунун

$$\left(\frac{\vec{p}_1^2}{2\mu}-\frac{2e^2}{r_1}+\frac{\vec{p}_2^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}}\right)\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=E\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) \qquad (85.4)$$

тәнлијинин сыфырынҹы јахынлашмада һәлли олан Ψ функсијасы (85.3)-дәки ики функсијанын симметрикләшдирилмиш һасилинә бәрабәр олар:

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_{1S}(r_1)\Psi_{nlm}(r_2)+\eta\Psi_{1S}(\vec{r}_2)\Psi_{nlm}(\vec{r}_1)\right) \qquad (85.5)$$

Параһелиум үчүн η=1, ортаһелиум үчүн исә η=−1 -дир. Ψ_{1S} вә Ψ_{nlm} функсијалары ваһидә нормаллашдырылмышдыр:

$$\int\Psi_{1S}^{*}\Psi_{1S}(d\vec{r}_1)=1\,; \qquad \int\Psi_{nlm}^{*}\Psi_{nlm}(d\vec{r}_2)=1\,. \qquad (85.6)$$

$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ функсијасынын (85.4) тәнлијини нисбәтән јахшы өдәмәси үчүн E енержиси лазыми шәкилдә тә'јин олунмалыдыр. Бунун үчүн (85.4) тәнлијини солдан $\frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(\vec{r}_2)$ функсијасына вуруб, зәррәҹикләрин фәзалары үзрә интеграллајаг, (85.6) мүнасибәтләрини нәзәрә алсаг,

$$E=\int\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(\vec{r}_2)(\breve{H}_1+\breve{H}_2-\frac{e^2}{r_2}+V(\vec{r}_1,\vec{r}_2))\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)(d\vec{r}_1 d\vec{r}_2) \qquad (85.7)$$

бурада $V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{e^2}{r_{12}}=\frac{e^2}{|\,\vec{r}_1-\vec{r}_2\,|}$ електронлар, $-\frac{e^2}{r_2}$ исә екранлашдырылмыш нүвә илә икинҹи електрон арасындакы гаршылыглы тә'сир енержисидир.

Бурада Ψ онун (85.5) ифадәси илә әвәз едиләндән сонра алынан интеграллар (85.1), (85.2) тәнликләри вә (85.6) шәртләри әсасында гијмәтләндирилә биләр:

$$\int\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(r_2)\breve{H}_1\Psi_{1S}\Psi_{nlm}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=\int\Psi_{1S}^{+}\breve{H}_1\Psi_{1S}(d\vec{r}_1)=E_{1S} \qquad (85.8а)$$
$$\int\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(r_2)\breve{H}_2\Psi_{nlm}(\vec{r}_2)\Psi_{1S}(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=\int\Psi_{nlm}^{+}(\vec{r}_2)\breve{H}_2\Psi_{nlm}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_2)=E_n \qquad (85.8б)$$

$$\int\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(r_2)\frac{e^2}{r_2}\Psi_{1S}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=\int\Psi_{nlm}^{+}(\vec{r}_2)\frac{e^2}{r_2}\Psi_{nlm}(d\vec{r}_2)=\bar{E}^{hat}, \qquad (85.8в)$$
$$\int\Psi_{1S}^{+}\Psi_{nlm}^{+}(r_2)V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\Psi_{1S}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}(\vec{r}_2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=K \qquad (85.8г)$$
$$\int\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(\vec{r}_2)\breve{H}_1\Psi_{1S}(\vec{r}_2)\Psi_{nlm}(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=$$
$$=\int\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(\vec{r}_2)\breve{H}_2\Psi_{1S}(\vec{r}_2)\Psi_{nlm}(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=0\,, \qquad (85.8д)$$
$$\int\Psi_{1S}^{+}(\vec{r}_1)\Psi_{nlm}^{+}(r_2)V(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\Psi_{1S}(\vec{r}_2)\Psi_{nlm}(\vec{r}_1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)=A\,. \qquad (85.8е)$$

Бурада K–електронлар арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сир енержиси, A исә мүбадилә енержисидир. Бир електронлу һаллар үчүн вириал теореми (бах § 18)

$$\bar{E}^{пот}=2E_n \qquad (85.9)$$

мүнасибәтинә кәтирдијиндән системин там енержиси үчүн

$$E=E_{1S}+3E_n+K+\eta A \qquad (85.10)$$

ифадәси алыныр.

(85.1) вә (85.2) тәнликләри һидрокенәбәнзәр атомларын тәнликләридир. (85.1)-дә нүвә јүкү eZ=$2e$-јә, (85.2)-дә исә eZ=e-јә бәрабәрдир. Белә атомларын енержи сәвијјәләринин $E_n=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}$ ифадәсиндән E_{1S} вә (85.8б)-дәки E_n үчүн ујғун олараг

$$E_{1S}=-\frac{4me^4}{2\hbar^2}=-\frac{2e^2}{a} \qquad (85.11)$$
$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2}=-\frac{e^2}{2n^2a}$$

гијмәтләри алыныр. E_{1S} вә E_n-ин гијмәтләрини E-нин (85.10) ифадәсиндә јеринә јазсаг,

$$E=-\frac{2e^2}{a}-\frac{3e^2}{2\hbar^2a}+K+\eta A \qquad (85.12)$$

аларыг. Бура дахил олан K вә A интегралларыны һесабламаг үчүн $\frac{1}{r_{12}}$-нин (84.5) илә верилмиш сырасындан истифадә едәк.

K-нын (85.8г) ифадәсиндә бучаглар үзрә көтүрүлмүш интеграллар l' вә m'-ин јалныз $l'=0$, $m'=0$ гијмәтләриндә сыфырдан фәргли галыр. Сыранын буна ујғун һәдди

$$K = 4\pi\int_0^\infty |R_1(r_1)|^2 r_1^2 dr_1\left(\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} r_2^2|R_{nl}(r_2)|^2 dr_2 + \int_{r_1}^\infty r_2|R_{nl}(r_2)|^2 dr_2\right) \qquad (85.13)$$

Ејни шәкилдә A-ја дахил олан бучаглара көрә интеграллар исә јалныз $l' = l$ вә $m' = m$ гијмәтләриндә сыфырдан фәргли галыр вә ҹәмин буна ујғун һәдди үчүн

$$A = \frac{4\pi}{2l+1}\int_0^\infty r_1^2 dr_1 R_{10}(r_1)R_{nl}(r_2)\left(\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} r_2^2\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l R_{10}(r_2)R_{nl}(r_2)dr_2 + \right.$$

$$\left. + \int_{r_1}^\infty r_2\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l R_{10}(r_2)R_{nl}(r_2)dr_2\right) \qquad (85.14)$$

ифадәси алыныр.

Һелиум атомунун биринчи һәјәҹанланма сәвијјәси n=2 вә l=0-а ујғун $2s$ вә ја $(1s)^1(2s)^1$ сәвијјәсидир, икинҹи һәјәҹанланма сәвијјәси исә $(1s)^1(2p)^1$-дир. n вә l квант әдәдләринин гијмәти бөјүдүкҹә, бирелектронлу функсијаларын бир-бирини өртмә областы кичилир вә бахылан јахынлашма даһа дәгиг нәтиҹәләрә кәтирир.

Һелиум атомунун $(1s)^1(2s)^1$ сәвијјәсиндә бирелектронлу функсијаларын бир-бирини өртмә областы һисс олунаҹаг дәрәҹәдә бөјүк олдуғундан тәҹрүбәјә јахын нәтиҹәләрин алынмасы үчүн һесабламаларда ону нәзәрә алмаг лазым кәлир*. Лакин һесабламалар һәҹмҹә кифајәт гәдәр бөјүк олдуғундан биз онун үзәриндә дајанмајаҹағыг.

Мисал олараг $(1s)^1(2p)^1$ һәјәҹанланмыш һалынын енержисини һесаблајаг. Бу һалда функсијаларын бир-бирини өртмә областы $(1s)^1(2s)^1$-дәкинә нисбәтән нәзәрә алынмајаҹаг дәрәҹәдә кичик олур. Бу хүсуси һалда истифадә етдијимиз метод нисбәтән јахшы нәтиҹәләрә кәтирәрсә, даһа јүксәк һәјәҹанланмыш һаллар үчүн дә онун јарарлылығына зәмин вермәк олар. Бизи марагландыран һалда нормаланмыш радиал функсијалар

$$R_{10}(r) = \left(\frac{8}{a}\right)^{3/2} e^{-\frac{2r}{a}},$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{1}{6a}\right)^{3/2}\frac{r}{2a}e^{-\frac{r}{2a}}. \qquad (85.15)$$

* Мәсәлән, З.Флүгге: "Задачи по квантовой механике", том 2, сәһ. 81.

R_{10} вә R_{21} -ин бу гијмәтләрини (85.13) вә (85.14) интегралларында јеринә јазыб, һиссә-һиссә интеграллсаг,

$$K = 0{,}25\frac{e^2}{a}; \quad A = 0{,}004\frac{e^2}{a} \qquad (85.16)$$

гијмәтләрини алырыг. K вә A-ны (85.12)-дә јеринә јаздыгда бахылан һалын енержиси

$$E = (-2{,}126 + \eta\ \ 0{,}004)\frac{e^2}{a}. \qquad (85.17)$$

Бурадан $(1s)^1(2p)^1$ һалында олан пара- вә ортоһелиумун енержиләри үчүн

$$E_{пар}^{нәз} = -2{,}122\frac{e^2}{a}; \quad E_{ор}^{нәз} = -2{,}130\frac{e^2}{a} \qquad (85.18)$$

гијмәтләри алыныр. Бу һәјәҹанланмыш һалларын енержиләринин тәҹрүби гијмәтләри исә ујғун олараг,

$$E_{пар}^{тәҹ} = -2{,}124\frac{e^2}{a}; \quad E_{ор}^{тәҹ} = -2{,}133\frac{e^2}{a}. \qquad (85.19)$$

$(1s)^1(2p)^1$ һәјәҹанланмыш һалдакы атомун $2p$ һалында олан електронуну гопармаг үчүн лазым кәлән ионизасија енержиси He^+ ионунун әсас һалынын E_{1S} енержиси илә E енержисинин фәргинә бәрабәрдир:

$$I = E_{1S} - E = (0{,}126 - \eta 0{,}004)\frac{e^2}{a} \qquad (85.20)$$

јахуд

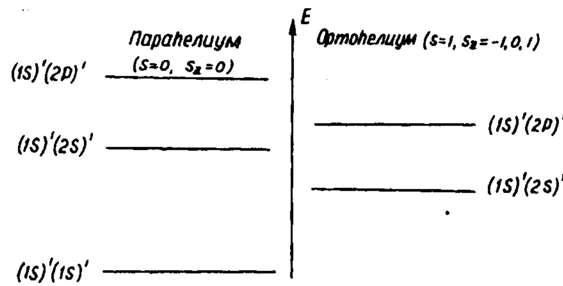
$$I_{пар}^{нәз} = 0{,}122\frac{e^2}{a}, \quad I_{ор}^{нәз} = 0{,}130\frac{e^2}{a}. \qquad (85.21)$$

Ујғун тәҹрүби гијмәтләр исә

$$I_{пар}^{тәҹ} = 0{,}124\frac{e^2}{a}, \quad I_{ор}^{тәҹ} = 0{,}133\frac{e^2}{a}. \qquad (85.22)$$

$E_{пар}$ илә $E_{ор}$ енержиләринин мүгајисәси көстәрир ки, симметрик функсија илә тәсвир олунан параһелиумун енержи сәвијјәләри антисимметрик функсија илә тәсвир олунан ортоһелиумун енержи сәвијјәләриндән јухарыда јерләшир. Бу, електронларын бир-бирини дәф етмәси һесабына мејдана чыхан мүбадилә енержисинин мүсбәт олмасы илә изаһ олунур.

$(1s)^1(2p)^1$ һалында олан пара- вә ортоһелиум атомлары енержиләринин вә еләчә дә ујғун ионизасија енержиләринин нәзәри вә тәчрүби гијмәтләри бир-биринә хејли јахындыр, јә'ни һәјәчанланма нәзәријјәси һәтта белә дәрин јерләшмиш сәвијјәләр һалында тәчрүбәјә кифајәт гәдәр јахын гијмәтә кәтирир (шәкил 38).



Шәкил 38. Һелиум атомунун ән ашағы енержи сәвијјәләринин јерләшмә схеми.

Беләликлә гејри-релјативистик һалда һелиум атомунун Һамилтон операторунун спин дәјишәнләриндән асылы олмамасына бахмајараг, електронлар арасындакы електрик гаршылыглы тә'сир онун енержи сәвијјәләринин спинин гијмәтиндән асылылығына кәтирир. Бу асылылыг һеч дә спинлә әлагәдар олан магнит гаршылыглы тә'сирин нәтичәси дејилдир. О, билаваситә атомун координат далға функсијасынын спин һаллары (гијмәти) илә тә'јин олунан симметрија (симметрик вә ја антисимметрик) хассәсиндән асылыдыр. Бу ахырынчы исә енержинин гијмәтини тә'јин едир.

§ 86. ХАРТРИ-ФОК МЕТОДУ. ӨЗҮНӘ УЗЛАШАН САҺӘ МЕТОДУ

§ 40-да көрдүк ки, јалныз бир електрона малик атом үчүн Шрединкер тәнлијини дәгиг һәлл етмәк олур. Ики електронлу һелиум атомунун Шрединкер тәнлијини һәлл етмәк үчүн исә артыг тәхмини һәлл методларындан биринә – һәјәчанланма методуна мүрачиәт етмәли олдуг. Мүрәккәб атомлара ујғун тәнлијин һәлли исә бизи даһа тәкмилли тәхмини методлардан истифадә етмәјә вадар едир. Онлардан ән мүһүмү Хартринин тәклиф етдији вә Фокун тәкмилләшдирдији *өзүнә узлашан саһә методудур* (метод самосогласованного поля).

Бу методун әсасыны чохелектронлу атомда һәр бир електрона јалныз она мәхсуси фәрди бир функсија аиддир вә ја атомун һәр бир електрону нүвә вә дикәр електронларын јаратдығы еквивалент саһәдә һәрәкәт едир иддиасы (идејасы) тәшкил едир.

Хартри методунда биринчи јахынлашма олараг фәрз олунур ки, чохелектронлу системдә електронлар бир-бириндән асылы олмајараг һә-

рәкәт едир вә Z електронлу атомун үмуми далға функсијасы електронларын далға функсијаларынын һасилинә бәрабәрдир:

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_Z)=\Psi_1(\vec{r}_1)\Psi_2(\vec{r}_2)\ldots\Psi_Z(\vec{r}_Z). \qquad (86.1)$$

Електронлар арасындакы гаршылыглы тә'сир исә бу функсијаларын өдәдији тәнликләрдә өз әксини тапыр. Беләликлә, атомун үмуми далға функсијасынын тапылмасы $\Psi_i(\vec{r}_i)$ функсијаларынын һесабланмасына кәтирилир. Она көрә дә илк нөвбәдә $\Psi_i(\vec{r}_i)$ функсијаларынын өдәдији тәнлијин тапылмасы үзәриндә дајанаг.

Спин- орбитал вә спин- спин (магнит) гаршылыглы тә'сирләр нәзәрә алынмадыгда, нүвә илә бағлы координат системиндә атомун Һамилтон оператору

$$\breve{H}=\sum_i \breve{H}_i+\sum_{i\neq k}V_{ik}(\vec{r}_{ik}) \qquad (86.2)$$

шәклиндә олур. Бурада

$$\breve{H}_i=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2+U(\vec{r}_i); \quad i,k=1,2,\ldots,Z \qquad (86.3)$$

Ze јүкүнә малик нүвәнин саһәсиндә һәрәкәт едән i-чи електронун Һамилтон оператору, $U(\vec{r}_i)$ –нүвә илә бахылан електрон, $V_{ik}=\dfrac{e^2}{r_{ik}}$ исә ики електрон арасындакы гаршылыглы тә'сир операторларыдыр. (86.2) - дәки икинчи һәддә чәм $i\neq k$ шәрти алтында апарылыр.

$\Psi_i(\vec{r}_i)$ функсијаларынын өдәјә биләчәји тәнлији илк дәфә Хартри тәклиф етмишдир. Хартри, атомун дахилиндә електронларын јаратдығы үмуми орта саһәдәки һәрәкәтә даир физики мүлаһизәләр әсасында буна мүвәффәг олмушду. Фок һәмин тәнлији вариасија принсипиндән истифадә едәрәк чыхармышдыр. Биз бурада икинчи јолдан истифадә едәчәјик.

Атомун әсас һалынын енержисини һесабламаг үчүн, §36-да көрдүјүмүз кими, вариасија методундан истифадә етмәк әлверишлидир. Бу һалда атомун далға функсијасы

$$\delta J=\delta\int\Psi^{+}\breve{H}\Psi(d\vec{r}) \qquad (86.4)$$

бәрабәрлијиндән тә'јин олунур. Бу заман фәрз олунур ки, далға функсијасы

$$\int\Psi^{+}\Psi(d\vec{r})=1 \qquad (86.5)$$

шәртини өдәјир.

Вариасија методунун әсас шәртләриндән бири сынаг функсијасынын сечилмәси проблемидир. Чохелектронлу атомлар һалында сынаг функсиjасы (86.1) ифадәси шәклиндә сечилдикдә еjнизәррәчикли системин далға функсиjасынын зәррәчикләрин (фәза вә спин координатларынын) jердәjишмәсинә көрә jа симметрик (бозонлар) вә jа да антисимметрик (фермионлар) олмасы тәләби өдәнилмир. Башга сөзлә, зәррәчикләрин һәрәкәтиндә далға функсиjасынын симметриjасы илә әлагәдар олан тә'сир өз әксини тапмыр. Көрдүjүмүз кими (бах §83–85), бу тә'сир мүбадилә енержисинин ортаjа чыхмасына кәтирир.

Функсиjанын дүзкүн симметриjасыны нәзәрә алмагла Хартри методу Фок тәрәфиндән тәкмилләшдирилмиш вә вариасиjа принсипинин көмәjилә Хартринин $\Psi_i(\vec{r}_i)$ функсиjалары үчүн jаздығы тәнлиjи ала билмишди.

Биз әввәлчә сынаг функсиjасы үчүн (86.1) ифадәсини сахлаjыб, $\Psi_i(\vec{r}_i)$-нин өдәдиjи тәнлиjи чыхарачағыг. Ондан сонра исә Ψ– функсиjанын симметриjасы илә әлагәдар мәсәлә үзәриндә даjаначағыг.

(86.1) илә верилмиш функсиjаны

$$J = \int \Psi^+ \breve{H} \Psi (d\vec{r}_1)\dots(d\vec{r}_Z) \qquad (86.6)$$

интегралында jазыб, (86.2)-дәки $\breve{H}_i$ операторунун i-чи електронун, V_{ik} операторунун исә i вә k електронларынын кооординатларына тә'сир етдиjини вә електронларын $\Psi_k(\vec{r}_k)$ функсиjалары үчүн

$$\int \Psi_k^+ \Psi_k (d\vec{r}_k) = 1 \qquad (86.7)$$

нормаланма шәртинин өдәдиjини гәбул етсәк,

$$J = \sum_i \Psi_i^+ \breve{H}_i \Psi_i (d\vec{r}_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,k} \int \Psi_k^+ \Psi_i^+ V_{ki} \Psi_k \Psi_i (d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k) \qquad (86.8)$$

олар. Ψ_i функсиjасынын өдәдиjи тәнлиjи алмаг үчүн (86.7) вә (86.8) ифадәләриндән Ψ_i^+-jә көрә вариасиjа алыб

$$dJ = \sum_i \int \delta\Psi_i^+ \left\{ \breve{H}_i + \sum_k \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) \right\} \Psi_i(\vec{r}_i)(d\vec{r}_i) = 0, \qquad (86.9)$$

$$\int \delta\Psi_i^+ \Psi_i (d\vec{r}_i) = 0 \qquad (86.10)$$

системиндәки һәр бир бәрабәрлиjи E_i Лагранж вуруғуна вурандан сонра (86.9)-дан (86.10)-у чыхсаг,

$$dJ = \sum_i \int \delta\Psi_i^+ \left\{ \breve{H}_i + \sum_k{}' \int \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) - E_i \right\} \Psi_i (d\vec{r}_i) = 0 \qquad (86.11)$$

алынар. $\delta\Psi_i^+$ вариасиjалары ихтиjари олдуғундан, (86.11) бәрабәрлиjи

$$\left\{ \breve{H}_i + \sum_k \int \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) - E_i \right\} \Psi_i(\vec{r}_i) = 0 \qquad (86.12)$$

шәрти дахилиндә өдәниләр.

$\Psi_i(\vec{r}_i)$ бирелектронлу функсиjаларын вә уjғун стасионар һалларын E_i енержисинин һесабланмасы үчүн алынмыш (86.12) системи геjри-хәтти интеграл-диференсиал системдир.

(86.12) тәнликләр системи електронларын jаратдығы орта саһә һаггындакы физики мүлаһизәләр әсасында Хартри тәрәфиндән илк дәфә тәклиф олунмуш системдир. Бу системи һәлл етмәк үчүн о, ардычыл jахынлашма методуну тәтбиг етмишди. i-чи електронун атомун дикәр електронлары илә гаршылыглы тә'сир енержисини характеризә едән

$$V_i(\vec{r}_i) = \sum_k{}' \int \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) \qquad (86.13)$$

чәмини һесабламаг үчүн Хартри сыфырынчы jахынлашма олараг $\Psi_k(\vec{r}_k)$ функсиjалары әвәзиндә һидрокен атомунун $\Psi_k^o = \Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ функсиjаларыны көтүрүр:

$$V_i^o(\vec{r}_i) = \sum_k{}' \int \Psi_k^{o+} \breve{V}_{ki} \Psi_k^o (d\vec{r}_k).$$

Бурадан һесабланан $V_i^o(\vec{r}_i)$ потенсиал енержи функсиjасыны (86.12)-дә jеринә jазараг алынан

$$(\breve{H}_i + V_i^o(\vec{r}_i) - E_i)\Psi_i^1(\vec{r}_i) = 0$$

тәнликләр системиндән биринчи jахынлашмада $\Psi_i^1(\vec{r}_i)$ далға функсиjасы һесабланыр. Белә тапылмыш Ψ_i^1 –далға функсиjалары васитәсилә jенидән

$$V_i^1(\vec{r}_i) = \sum_k{}' \int \Psi_k^{+1} V_{ki} \Psi_k^1 (d\vec{r}_k)$$

потенсиал енержи функсиjасы тапылыр вә ону jенидән (86.12)-дә jазмагла

$$(\breve{H}_i + V_i^1(\vec{r}_i) - E_i)\Psi_i^{(2)} = 0$$

системиндән икинчи jахынлашмада $\Psi_i^{(2)}$ функсиjасы тапылыр.

Бу ардычыллыг топланырса, ону о вахта гәдәр давам етдирирләр ки, бу шәкилдә ахырынчы дәфә һесабланмыш

$$V_i(\vec{r}_i) = \sum_k{}' \int \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_k (d\vec{r}_k) \qquad (86.14)$$

потенсиал енержи функсијасыны

$$(\breve{H}_i + V_i(\vec{r}_i) - E_i)\Psi_i = 0 \qquad (86.15)$$

системиндә јаздыгдан сонра системин һәллиндән алынан $\Psi_i(\vec{r}_i)$ далға функсијалары бундан габагкы һалда $V_i(\vec{r}_i)$-нин һесабланмасы үчүн истифадә олунан далға функсијаларынын үзәринә дүшсүн, јә'ни $\Psi_i(\vec{r}_i)$-нин ахырынчыдан әввәлки гијмәти тәкрар олунмуш олсун. Бу шәкилдә алынан (86.14) потенсиал функсија *өзүнә узлашан саһә* адланыр.

Гаршылыглы тә'сирдә олан Z сајда зәррәчикләр системи үчүн јазылмыш (86.12) Хартри–Фок тәнликләр системи үч өлчүлү фәзада верилмиш ән чоху Z тәнликдән ибарәтдир. Һәр бир функсија јалныз үч x, y, z координатдан асылыдыр. Z зәррәчикли системин Шрединкер тәнлији исә $3N$ өлчүлү фәзада верилир. Бурада далға функсијасы $3N$ дәјишәндән асылыдыр. Бу мә'нада дејирләр ки, Хартри –Фок методунда чохзәррәчикли мәсәлә бирзәррәчикли мәсәләјә кәтирилир. Бу заман атомун һалы тәхминән бирелектронлу һалларын топлусу кими тә'јин олунур. Бу јахынлашма атомун үмуми функсијасынын (86.1) һасили шәклиндә көтүрүлмәси илә әлагәдардыр. Әслиндә атомун далға функсијасыны (86.1) һасили шәклиндә көтүрмәк доғру дејил, чүнки бу, там гаршылыглы тә'сири јох, јалныз онун әсас һиссәсини – Кулон гаршылыглы тә'сири нәзәрә алмаға имкан верир. Функсијанын симметријасы илә әлагәдар олан мүбадилә гаршылыглы тә'сир исә кәнарда галыр.

Хартри–Фок методунун практик тәтбигләриндә әлавә бир јахынлашмадан да истифадә олунур. $V_i(\vec{r}_i)$ потенсиал функсијасында $\vec{r}_i$ радиус-векторун истигамәтләри үзрә орта гијмәт көтүрүлүр:

$$V_i(|\vec{r}_i|) = \frac{1}{4\pi}\int V_i(\vec{r}_i)d\Omega_i$$

Белә потенсиал функсија сферик симметријаја малик олур, бу исә өз нөвбәсиндә $\Psi_i(\vec{r}_i)$ далға функсијаларыны $\Psi_i(\vec{r}_i) = R_i(r_i)Y_i(\theta_i,\varphi_i)$ кими јалныз радиус-векторун мүтләг гијмәтиндән вә јалныз бучаглардан асылы олан функсијаларын һасили кими көтүрмәјә имкан верир.

(86.12) системиндә E_i ајрыча көтүрүлмүш електронун енержисини тә'јин едир. E_i -ни тапмаг үчүн (86.12) тәнлијини солдан Ψ_i^+ функсијасына вуруб, $(d\vec{r}_i)$ үзрә интеграллмаг лазымдыр:

$$E_i = \int \Psi_i^+ \breve{H}_i \Psi_i (d\vec{r}_i) + \sum_k{}' \int \Psi_i^+ \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_i \Psi_k (d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k). \qquad (86.16)$$

Атомун там енержиси исә (86.8)-дән

$$E = \sum_i \int \Psi_i^+ \breve{H}_i \Psi_i (d\vec{r}_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,k}{}' \int \Psi_i^+ \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_i \Psi_k (d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k). \qquad (86.17)$$

(86.17) илә (86.16)-нын мүгајисәсиндән чыхыр ки, атомун E там енержиси бир зәррәчикли һалларын енержиси чәминә бәрабәр дејил. $\sum E_i$ чәминдә електростатик гаршылыглы тә'сир ики дәфә нәзәрә алындығындан

$$E = \sum_i E_i - \frac{1}{2}\sum_{i,k}{}' \int \Psi_i^+ \Psi_k^+ V_{ki} \Psi_i \Psi_k (d\vec{r}_i)(d\vec{r}_k) \qquad (86.18)$$

олур.

Јухарыда гејд етдик ки, Хартри методунда сынаг функсијасы зәррәчикләрин фәрди далға функсијаларынын һасили шәклиндә сечилир. Ејни зәррәчикләрдән ибарәт системин функсијаларына хас олан симметрија һесабына зәррәчикләрин һәрәкәтләриндә мејдана чыхан әлагә нәзәрә алынмыр. Белә әлагәни нәзәрә алмаға имкан верән өзүнә узлашан саһәни Хартри методуна Фок дахил етмишди. Бунун үчүн о, ејни фермионлардан ибарәт системдә зәррәчикләрин јердәјишмәсинә көрә антисимметрик олан далға функсијасыны сынаг функсијасы кими көтүрмүшдү.

Фок, сынаг функсијаны фәза вә спин дәјишәнләриндән асылы олан $\Psi_i(x_i, s_i)$ кими фәрди функсијалардан тәшкил олунмуш антисимметрик функсија кими сечир.

(x_i, s_i) чохлуғуну шәрти олараг (i) кими ишарә етсәк, нормаланмыш сынаг функсија:

$$\Psi(1,2,\ldots,Z) = \frac{1}{\sqrt{Z!}}\begin{vmatrix} \Psi_1(1) & \Psi_1(2) \ldots \Psi_1(Z) \\ \Psi_2(1) & \Psi_2(2) \ldots \Psi_2(Z) \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \Psi_Z(1) & \Psi_Z(2) \ldots \Psi_Z(Z) \end{vmatrix} \qquad (86.19)$$

$\Psi_i(i)$ функсијалары һәм фәза координатларына вә һәм дә спин дәјишәнләринә нәзәрән орта-нормаланма шәртини өдәјир.

Атомда електрон системинин һалыны характеризә едән (86.19) функсијасы (86.1)-дән фәргли олараг, бахылан електронун мүәјјән һалда јох, мүмкүн һаллардан бириндә (фәрги јохдур һансында) олдуғуну тәсвир едир. Јухарыда олдуғу кими, бурада да фәрз олунур ки, һәр бир електрон ајрылыгда сферик симметрик өзүнә узлашан саһәдә һәрәкәт едир, она көрә дә һәр бир електронун һалы (n, l, m,m_s) квант әдәдләри чохлуғу илә тә'јин олунур.

Бу методла атомун енержи сәвијјәләрини вә ујғун далға функсијаларыны һесабламаг олдугча мүрәккәб бир мәсәләдир. Јалныз һесаблама машынларынын көмәјилә әдәди нәтичәләрә кәлмәк олур.

Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда електронун далға функсијасыны јалныз координатлардан вә јалныз спин дәјишәниндән асылы функсијаларын һасили шәклиндә көтүрүлә биләр.

$$\Psi_i(x_i, s_i) = \Psi_i(x_i) S_\alpha(s_i)$$

Координат функсијасынын симметријасы исә системин там спининин гијмәтиндән асылыдыр вә бу симметрија електронларын һәрәкәтләри арасындакы әлагәни (корреләсијаны) тә'јин едир. Она көрә дә системин там спининин мүхтәлиф гијмәтләринә Фок методунда мүхтәлиф өзүнә узлашан саһә ујғун кәлир. Бүтүн бу дедикләримизи артыг квант нәзәријјәси илә таныш олдуғумуз һелиум атому мисалында нүмајиш етдирәк.

Һелиум атому ики електронлу систем олдуғундан онун үмуми функсијасы

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \Psi_i(1) & \Psi_i(2) \\ \Psi_k(1) & \Psi_k(2) \end{vmatrix} \tag{86.20}$$

шәклиндәдир, бурада i, k електронларын һалынын индексидир вә онларын һәр бири n, l, m, m_s квант әдәдләр чохлуғуну ифадә едир. Електронларын спинләринин нисби истигамәтләринә көрә һелиум атому параһелиум (там спини $S=0$), ортоһелиум (там спини $S=1$) һалларында ола биләр. Параһелиум һалында координат функсијасы симметрик

$$\Psi^S = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_i(1')\Psi_k(2') + \Psi_i(2')\Psi_k(1')), \tag{86.21}$$

ортоһелиум һалында исә антисимметрик

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_i(1')\Psi_k(2') - \Psi_i(2')\Psi_k(1')) \tag{86.22}$$

олур, бурада $1'$ вә $2'$ илә x_1, y_1, z_1 вә x_2, y_2, z_2 јалныз фәза координатлары ишарә олунмушдур.

Һелиум атомунун $\breve{H}$ Һамилтон оператору

$$\breve{H} = \breve{H}_1 + \breve{H}_2 + V_{12}\left(\left|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right|\right). \tag{86.23}$$

$\breve{H}_1$ –биринчи електронун, $\breve{H}_2$ исә икинчи електронун координатларына тә'сир едир.

$$V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}$$

исә ики електрон арасындакы гаршылыглы тә'сир операторудур.

Әввәлчә һелиум атомунун пара һалыны тәсвир едән тәнлији тапаг. Садәлик үчүн фәрз едәк ки, Ψ_i вә Ψ_k функсијалары ики мүхтәлиф һалын функсијаларыдыр, јә'ни онлар үчүн

$$\int \Psi_\alpha^+ \Psi_\beta (dr) = \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 1,2 \tag{86.24}$$

орта-нормаланма шәрти өдәнилир.

Јухарыда олдуғу кими, ахтарылан тәнлик

$$J = \int \Psi^{+S} \breve{H} \Psi^S (d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)$$

интегралын вариасијасындан (86.24) ифадәсини E_i-јә вурулмуш вариасијасыны чыхмагла алынан

$$\delta(J - E_i \int \Psi_i^+ \Psi_i (d\vec{r}_i) - E_k \int \Psi_k^+ \Psi_k (d\vec{r}_2)) = 0 \tag{86.25}$$

бәрабәрлијиндән тапылыр.

(86.25)- дән Ψ_i^+ вә Ψ_k^+ функсијаларына көрә вариасија көтүрсәк,

$$\delta(J - E_i \int \Psi_i^+ \Psi_i (d\vec{r}_1) - E_k \int \Psi_k^+ \Psi_k (d\vec{r}_2)) =$$
$$= \int \delta\Psi_i^+(1) \Big\{ \breve{H}_i \Psi_i(1)(d\vec{r}_1) + \int \Psi_k^+(2) V_{12} \Psi_k(2) \Psi_i(1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) +$$
$$+ \int \Psi_k^+(2) V_{12} \Psi_i(2) \Psi_k(1)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) - E_i \int \Psi_i(1)(d\vec{r}_1) \Big\} +$$
$$+ \int \delta\Psi_k^+(2) \cdot \Big\{ \breve{H}_2 \Psi_k(2)(d\vec{r}_2) + \int \Psi_i^+(1) V_{12} \Psi_i(1) \Psi_k(2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) +$$
$$+ \int \Psi_i^+(1) V_{12} \Psi_k(1) \Psi_i(2)(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) - E_k \int \Psi_k(2)(d\vec{r}_2) \Big\} = 0$$

алынар. $\delta\Psi_i^+(1)$ вә $\delta\Psi_k(2)$ вариасијалары ихтијари сечилә билдијиндән бу бәрабәрлијин өдәнилмәси үчүн

$$(\breve{H}_1 + V_{kk} - E_i)\Psi_i(1) + V_{ki}\Psi_k(1) = 0, \tag{86.26}$$
$$(\breve{H}_2 + V_{ii} - E_k)\Psi_k(2) + V_{ik}\Psi_i(2) = 0$$

системи өдәнилмәлидир. Бурада

$$V_{ii} = V_{kk} = \int \Psi_k^+ V_{12} \Psi_k (d\vec{r}).$$

Ψ_k һалында олан електронун i һалында олан електронла тәмиз Кулон гаршылыглы тә'сир енержисини,

$$V_{ik} = V_{ki} = \int \Psi_k^+ V_{12} \Psi_i (d\vec{r})$$

исә електронларын мүбадилә енержисини кәстәрир. Әлбәттә мүбадилә енержисинин ортаја чыхмасы функсијанын симметрија хассәси илә әлагәдардыр вә електронларын һәрәкәтләри арасындакы әлагәни (корреләсијаны) характеризә едир.

Ејни ишләри ортоһелиум ($S=1$) үчүн дә көрмәк олар. Онун координат функсијасы антисимметрикдир:

$$\Psi^A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_i(1)\Psi_k(2) - \Psi_i(2)\Psi_k(1)). \quad (86.27)$$

(86.24) шәрти дахилиндә

$$J = \int \Psi^{+A}\breve{H}\Psi^A(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2)$$

ифадәсиндән $\Psi_i^+(1)$ вә $\Psi_k^+(2)$ функсијаларына көрә вариасија көтүрсәк,

$$(\breve{H}_1 + V_{kk} - E_i)\Psi_i(1) - V_{ki}\Psi_k(1) = 0$$
$$(\breve{H}_2 + V_{ii} - E_k)\Psi_k(2) - V_{ik}\Psi_i(2) = 0 \quad (86.28)$$

системи алынар.

(86.26) вә (86.28) системләри мүбадилә енержисинин ишарәси илә фәргләнир. Онлар, јухарыда гејд етдијимиз кими, гејри-хәтти интегро-диференсиал тәнликләр системидир, јалныз әдәди һесаблама методлары илә һәлл олуна биләр.

Функсијаларын симметријасы һесабына ортаја чыхан мүбадилә енержисини нәзәрә алмасаг, һәр ики систем Хартринин тәклиф етдији (86.12) тәнликләр системинин үзәринә дүшүр, јә'ни орто вә пара һаллар бир-бириндән фәргләнмир.

Хартри–Фок өзүнә узлашан саһә методу мүрәккәб атомларын стасионар енержи сәвијјәләрини вә ујғун далға функсијаларыны һесабламаг үчүн кениш тәтбиг олунур.

Атомун далға функсијасынын електронларын далға функсијаларынын һасили шәклиндә көтүрүлмәси мәсәләнин һәллини хејли асанлашдырыр. Лакин, мүрәккәб атомларын енержи сәвијјәләри үчүн Хартри–Фок методу илә алынан нәтичәләрин тәчрүбә илә мүгајисәси көстәрир ки, һесабламаларда бурахылан хәта 5–10% тәртибиндәдир.

§ 87. МҮБАДИЛӘ ЕНЕРЖИСИ

Һәјәчанланма нәзәријјәсинә көрә биринчи јахынлашмада енержијә әлавә һәјәчанланма енержисинин бахылан һалдакы орта гијмәтинә бәрабәрдир. Һелиум атомунда һәјәчанланма енержиси онун ики електрону арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сир енержисидир. Ејни зәррәчикләр системиндә бахылан һалын енержиси системин там спининин гијмәтиндән асылыдыр. Ифадәләри (83.19) илә верилмиш Ψ^{oS} вә Ψ^{oA} функсијаларына ујғун там спинин гијмәтилә фәргләнән һалларда һәјәчанланма енержисинин орта гијмәти

$$\overline{\frac{e^2}{r_{12}}} = \int \Psi^{+oS,A}\frac{e^2}{r_{12}}\Psi^{oS,A}(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) = \frac{1}{2}\int\frac{e^2}{r_{12}}(|\Psi_I|^2 + |\Psi_{II}|^2 \pm \Psi_I\Psi_{II}^+ \pm$$
$$\pm\Psi_I^+\Psi_{II})(d\vec{r}_1)(d\vec{r}_2) \quad (87.1)$$

кими тә'јин едилир. Бурада (82.5), (82.7), (83.11) вә (83.12)-јә көрә биринчи ики интеграл електронлар арасындакы Кулон гаршылыглы тә'сир енержисини, ахырынчы икиси исә мүбадилә енержисини ифадә едир. Онда

$$\overline{\frac{e^2}{r_{12}}} = K \pm A$$

олур вә о, үмуми нәзәријјәдә алынмыш (83.16)-нын үзәринә дүшүр.

Ејни зәррәчикләр системиндә бахылан һалын енержисинин там спининин гијмәтиндән асылылығы зәррәчикләр арасында Кулон гаршылыглы тә'сирдән әлавә башга бир гаршылыглы тә'сирин дә мејдана чыхмасына кәтирир. Бу гаршылыглы тә'сир мүбадилә гаршылыглы тә'сир адланыр. Јухарыда дејилдији кими, мүбадилә гаршылыглы тә'сир тәмиз квант тәбиәтлидир. Доғрудан да, гејри-релјативистик һалда спин ефектләри ортадан чыхыр, спинин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун һаллар арасындакы фәрг силинир вә онларын енержиләри бир-бириндән фәргләнмир.

Мүбадилә енержисинин маһијјәтини даһа јахшы баша дүшмәк үчүн һелиум атомунун һалларынын замандан асылылығы илә марагланаг. Һелиум атомунун һаллары стасионар һаллар олдуғундан Ψ^{oS} вә Ψ^{oA} функсијаларынын замандан асылылығы

$$\Psi^{oS}(r_1, r_2, t) = \Psi^{oS}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)e^{-\frac{i}{\hbar}(E+K+A)t}$$
$$\Psi^{oA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \Psi^{oA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)e^{-\frac{i}{\hbar}(E+K-A)t} \quad (87.2)$$

олур.

$$\omega = \frac{E+K}{\hbar}, \quad \delta = \frac{A}{\hbar} \quad (87.3)$$

әвәзләрини гәбул етсәк, (83.17) вә (83.18)-ә әсасән

$$\Psi^{oS}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_I^o + \Psi_{II}^o)e^{-i\omega t - i\delta t} \quad (87.4)$$
$$\Psi^{oA}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_I^o - \Psi_{II}^o)e^{-i\omega t + i\delta t}$$

Ψ^{oS} вә Ψ^{oA} стасионар һаллары әвәзиндә онларын суперпозисијасы илә верилән

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi^{oS} + \Psi^{oA}) \qquad (87.5)$$

һалына бахаг. Системин бу һалы стасионар һал олмур, чүнки Ψ^{oS} вә Ψ^{oA}-ны (87.4)-дәки ифадәләри илә әвәз етдикдән сонра Ψ функсијасы Ψ_I^o вә Ψ_{II}^o функсијаларынын суперпозисијасына кәтирилдикдә суперпозисија әмсаллары замандан асылы олур вә һалын стасионарлыг шәрти позулур (бах (87.6)). Дикәр тәрәфдән (87.5)-дәки симметрик вә антисимметрик һалларын суперпозисијасы јалныз зәррәҹикләрин спинләри нәзәрә алынмадыгда мүмкүндүр, чүнки бу заман биз онларын арасындакы физики фәрги кәстәрә билмирик. Спинләр нәзәрә алындыгда симметрик һал атомун там спининин сыфыр, антисимметрик һал исә ваһид гијмәтинә ујғун кәлир. Онларын биринин дикәринә кечмә еһтималы исә, демәк олар ки, сыфра јахындыр. Демәли, (87.5) мүнасибәти әслиндә формал характер дашыјыр, буна бахмајараг о, мүбадилә енержисинин физики маһијјәтинин ашкар едилмәсиндә мүәјјән рол ојнајыр.

Ψ^{oS} вә Ψ^{oA} функсијаларынын (87.4) ифадәләрини (87.5)-дә јазыб, алынан ифадәни Ψ_I^o вә Ψ_{II}^o функсијаларына нәзәрән групладшыраг:

$$\Psi = C_1(t)\Psi_I^o + C_2(t)\Psi_{II}^o = C_1(t)\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(r_2) + C_2(t)\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)\Psi_{n_2}(\vec{r}_1) \qquad (87.6)$$

алынар. Бурада

$$C_1(t) = e^{-i\omega t}\cos\delta t, \quad C_2(t) = ie^{-i\omega t}\sin\omega t. \qquad (87.7)$$

Суперпозисијаја дахил олан әмсалларын статистик мә'насына кәрә $|C_1|^2$ зәррәҹикләрин Ψ_I^o һалында, $|C_2|^2$ исә онларын Ψ_{II}^o һалында олма еһтималыдыр. (87.6) вә (87.7) мүнасибәтләриндән чыхыр ки, $t=0$ анында

$$|C_1(0)|^2 = 1, \quad |C_2(0)|^2 = 0.$$

олдуғундан, биринҹи електрон $\Psi_{n_1}^o(\vec{r}_1)$ һалында, икинҹи електрон исә $\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)$ һалында олурса,

$$t = \tau = \frac{\pi}{2\delta} = \frac{\hbar\pi}{A} \qquad (87.8)$$

мүддәтиндән сонра

$$C_1(\frac{\pi}{2\delta}) = 0, \quad C_2(\frac{\pi}{2\delta}) = 1$$

олур вә биринҹи електрон $\Psi_{n_2}^o(\vec{r}_1)$, икинҹи електрон исә $\Psi_{n_1}(\vec{r}_2)$ һалында јерләшир, јә'ни τ-ја бәрабәр заман фасиләсиндә електронларын мүбадиләси баша чатмыш олур вә *τ мүбадилә мүддәти* адланыр. (87.8)-дән көрүнүр ки, мүбадилә мүддәти τ мүбадилә енержиси A илә тәрс мүтәнасибдир: $A \to 0$ јахынлашанда $\tau \to \infty$ јахынлашыр.

Гејд едәк ки, мүбадилә енержиси о заман мүһүм рол ојнајыр ки, зәррәҹикләрин $\Psi_{n_1}^o$ вә $\Psi_{n_2}^o$ далға функсијалары ејни дәјишмә областына малик олсун, јә'ни һәр икиси фәзанын мүәјјән бир областында ејни заманда сыфырдан фәргли галсын. Һәмин функсијалар фәзанын мүхтәлиф областларында сыфырдан фәргли галдыгда исә мүбадилә енержиси сыфра бәрабәр олур. Демәли, мүбадилә енержисинин гијмәти зәррәҹикләрин бахылан һалларынын нә дәрәҹәдә бир-биринә јахын вә ја узаг јерләшмәсиндән, јахуд онлара ујғун далға функсијаларын бир-бирини нә дәрәҹәдә өртүб өртмәмәсиндән асылыдыр. (87.8)-дән чыхыр ки, мүбадилә енержиси бөјүк олдугҹа електронларын мүбадилә мүддәти кичик вә әксинә олур. Мәсәлән, $1s$ вә $2s$ һалларында олан електронларын мүбадилә мүддәти $\tau \sim 10^{-15}$ *сан*-дир, лакин $1s$ вә дејәк ки, $5s$ һалларында олан електронлар үчүн бахылан һаллар бир-бириндән хејли узагда јерләшдијиндән онларын мүбадилә мүддәти ај вә илле өлчүлә биләр.

Електронларын "мүбадиләси" дедикдә ону һәрфи мә'нада баша дүшмәк лазым дејил, чүнки һәгиги мә'нада мүбадилә ола билсин ки, һеч баш вермәсин. Бурада мүбадилә сөзү виртуал мә'нада баша дүшүлмәлидир. Чүнки ејни зәррәҹикләрин сечилмәзлик принсипинә көрә бахылан системдә електронлары һеч ваҹһлә бир-бириндән фәргләндирмәк мүмкүн дејилдир вә мүбадиләнин баш вериб вермәдији һагтында һеч бир мүсбәт һөкм верә билмәрик. Она көрә дә виртуал мүбадилә дедикдә јалныз системин башланғыҹ вә сон һалларынын физики мә'наја малик олдуғуну баша дүшәк лазымдыр.

§ 88. МҮРӘККӘБ АТОМЛАРЫН ЕЛЕКТРОН ГУРУЛУШУ

Резерфордун тәҹрүбәләриндә мүәјјән олунду ки, атом онун мәркәзиндә јерләшән мүсбәт јүклү нүвәдән вә әтрафында фырланан мәнфи јүклү електронлардан ибарәтдир.

Иваненко вә Резерфордун фикринҹә нүвә, күтләси M_p=938,3 *MeV* олан мүсбәт јүклү протонлардан вә күтләси M_n=939,5 *MeV* олан, електрик јүкүнә малик олмајан нејтронлардан тәшкил олунмушдур.

Сонралар мүәјјән олунду ки, нүвәдә протонларын сајы кимјәви елементин Менделејев ҹәдвәлиндәки Z сыра нөмрәсинә, протон вә нејтронларын үмуми сајы исә елементин A атом әдәдинә бәрабәрдир. Онда нејтронларын сајы $N=A-Z$ олар. Атом нејтрал (јүксүз) систем олдуғундан онун тәркибиндәки електронларын сајы да Z-ә бәрабәрдир.

Гејри-релјативистик нәзәријјәдә атомун стасионар һаллары, нүвәнин статик Кулон саһәсиндә һәрәкәт едән вә бир-бирилә електрик гаршылыглы тә'сирдә олан електрон системи үчүн јазылмыш Шрединкер тәнлији илә тә'јин олунур.

Нүвәдән вә онун статик саһәсиндә һәрәкәт едән електронлардан тәшкил олунмуш чохелектронлу гапалы систем үчүн, һидрокен атомуна охшар олараг, енержинин, онун һәрәкәт мигдары моментинин вә онун мүәјјән истигамәтдәки пројексијасынын сахланмалы олдуғуну фәрз едәрәк, сахланан кәмијјәтләрин гијмәтини тә'јин едән квант әдәдләри дахил етмәк олар. Бу квант әдәдләри, јәгин ки, бүтөв гапалы системи характеризә етмәлидир, белә ки, мүрәккәб атомларда ајры-ајры електронларын енержиси, һәрәкәт мигдары моменти вә онун пројексијасы әслиндә сахланмыр.

Беләликлә, мүрәккәб атом кими гапалы системин һалларыны тә'јин етмәк мәсәләси олдугча мүрәккәб бир проблемдир. Лакин § 86-да көрдүк ки, Хартри–Фок методу атомун һәр бир електронунун һәрәкәтини нүвәнин вә галан електронларын јаратдығы өзүнә узлашан саһәдә гејри-асылы зәррәчијин һәрәкәти кими тәсвир етмәјә, јә'ни електронлар системинин далға функсијасыны ајры-ајры електронларын далға функсијалары һасилинә бәрабәр көтүрмәјә имкан верир.

Өзүнә узлашан саһәдәки һәрәкәт мәркәзи саһәдәки һәрәкәти хатырлатдығындан, нәинки бүтөвлүкдә атомун, һәтта ону тәшкил едән електронларын һәр биринин енержиси, һәрәкәт мигдары (орбитал) моменти, онун сечилмиш истигамәтдәки пројексијасы сахланмалыдыр. Бу кәмијјәтләрин гијмәтини, һидрокен атомунда олдуғу кими n, l, m квант әдәдләри илә тә'јин етмәк вә онлар үчүн әввәлки адлары сахламаг олар: n–баш, l–орбитал, m– магнит квант әдәди.

Електронун спин мәхсуси моментинә малик олдуғуну нәзәрә алсаг, там тәсвир үчүн, спинин мүәјјән истигамәтдәки пројексијасыны характеризә едән m_s спин квант әдәди дә онлара әлавә едилә биләр.

Өзүнә узлашан саһә там Кулон саһәси олмадығындан, спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда белә, електронун E_{nl} енержиси n вә l квант әдәдләриндән асылы олур (бах § 89).

Сферик симметрик саһәдә сечилмиш истигамәт олмадығындан онун енержиси m вә m_s квант әдәдләриндән асылы олмур вә һәр бир E_{nl} сәвијјәси m вә m_s -ә көрә чырлашмыш олур.

Өзүнә узлашан саһә јахынлашмасы бир чох тәчрүби фактлары кифајәт гәдәр дәгиг изаһ етмәјә имкан верир. Буна бир оптик електронлу атомларда електронун һәрәкәтини мисал көстәрмәк олар (бах §89). Бу јахынлашмада иддиа олунур ки, Li, Na, K, Rb вә и.а. кими бир оптик електронлу елементләрин (гәләви металларын) харичи електрону тә'сирсиз газларын електрон өртүјүнү хатырладан дахили өртүкдә јерләшән електронларын вә нүвәнин јаратдығы өзүнә узлашан саһәдә һәрәкәт едир. Өзүнә узлашан саһә тәхмини сферик симметрик саһә олдуғундан, гәләви металларын бир чох хассәләри һидрокенин хассәләринә охшар олмалыдыр. Мәсәлән, гәләви металларын спектриндә спектр хәтләринин

дүзүлүшү һидрокен спектриндәки кими олуб, дублет гурулуша маликдир. Онлар бирвалентлидир вә и.а. Беләликлә, бу јахынлашма васитәси илә бу вә бир сыра башга тәчрүби фактлар кифајәт гәдәр дәгиг изаһ олунур.

Өзүнә узлашан саһә јахынлашмасында мүрәккәб атомун һалыны характеризә етмәк үчүн онун һәр бир електронунун һалы тә'јин олунмалыдыр. Һидрокен атомунда олдуғу кими, бурада да n–баш квант әдәди ејни олан һаллар чохлуғу *тәбәгә* адланыр. n=1-дә K, n=2-дә L, n=3- дә M, n=4-дә N тәбәгә вә и.а. Тәбәгә l орбитал квант әдәдинин гијмәти илә тә'јин олунан *өртүкләрдән* тәшкил олунур. l-ин гијмәти ејни олан һаллар чохлуғу *өртүк* адланыр: l=0-да s - өртүјү, l=1 -дә p, l=2 -дә d, l=3-дә f, l=4 -дә g өртүјү вә и.а.

n баш квант әдәдинин верилмиш гијмәтиндә l әдәди 0, 1, 2,...,n-1 кими мүхтәлиф гијмәт алдығындан (n, l) һалы $n\chi(\chi=s, p, d, f, g, ...)$ кими көстәрилир. Мәсәлән, n=1 олдугда l=0-а ујғун өртүк 1s (K тәбәгә); n=2 олдугда (L тәбәгә) l=0 вә l=1- ә ујғун өртүкләр 2s вә 2p кими ишарә олунур вә и.а. (n, l) һалда бир нечә електрон оларса, бу һал $n\chi^k$ кими көстәрилир. (k–(n, l) һалындакы електронларын сајыны көстәрир), башга сөзлә, l -ә ујғун һәрфи солунда n баш квант әдәдинин ујғун гијмәти, χ өртүјүндәки електронларын сајы исә онун үстү кими јазылыр.

Бахылан атомун һәр өртүјүндәки електронларын сајы көстәрилмәклә бүтүн тәбәгә, она дахил олан өртүкләр топлусу илә бирликдә *електрон конфигурасијасы* адланыр. Башга сөзлә, електрон конфигурасијасы дедикдә ејни (n, l) квант әдәдләринә малик електронлар чохлуғу баша дүшүлүр. Мәсәлән, оксикен атомунун әсас һалы вә јахуд онун електрон конфигурасијасы $1s^22s^22p^4$ - дүр.

χ өртүјүндә јерләшә биләчәк електронларын максимум сајы ашағыдакы кими тә'јин олунур: l-ин верилмиш гијмәтиндә m магнит квант әдәди $-l$ -дән $+l$ -ә кими $2l+1$ сајда мүхтәлиф гијмәт алыр. Мүтләг гијмәти $\frac{\hbar}{2}$-јә бәрабәр спин моменти исә сечилмиш истигамәтдә $+\frac{\hbar}{2}$ вә $-\frac{\hbar}{2}$ кими икичә пројексијаја маликдир. Беләликлә, χ- өртүјүнү тәшкил едән квант һалларын сајы $2(2l+1)$ бәрабәр олур. Паули принсипинә көрә исә бахылан фермионлар системиндә n, l, m, m_s дөрд квант әдәди ејни олан ики фермион ола билмәз. Демәли, χ-өртүјүндә јерләшә биләчәк електронларын максимум сајы да $2(2l+1)$ олар. l =0-а ујғун s -өртүјүндә 2, l =1 -ә ујғун p-өртүјүндә 6, l=2-јә ујғун d өртүјүндә 10 електрон вә и.а. ола биләр.

Ејнилә бунун кими, верилмиш тәбәгәдә јерләшә биләчәк електронларын максимум сајыны да тапмаг олар. Верилмиш n -дә l квант әдәди

0, 1, ..., $n-1$ гијмәтләрини алдығындан n тәбәгәдәки електронларын максимум сајы јәгин ки, өртүкләр үзрә чәм апарылмагла тә'јин олунар:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2(1+3+5+\ldots+2n-1) = 2n^2 .$$

Бурадан көрүнүр ки, K–тәбәгәдә (n=1) максимум 2, L-тәбәгәдә (n=2)–8, M – тәбәгәсиндә (n=3)–18, N – тәбәгәсиндә (n=4)–32 електрон вә и.а. ола биләр.

Мүрәккәб атомун һалыны там тә'јин етмәк үчүн бүтүн бу мә'луматлар кифајәт дејилдир. Бунлардан башга, бахылан атомда електронларын орбитал вә спин моментләринин нә чүр топландығыны вә атомун бүтөвлүкдә өзүнүн орбитал, спин вә там моментләринин нәјә бәрабәр олдуғуну билмәк лазымдыр.

Електронларын орбитал вә спин моментләри ики мүхтәлиф јолла топлана биләр. Бахылан атомда спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмајачаг дәрәчәдә зәифдирсә (бу адәтән јүнкүл вә нисбәтән ағыр атомларда мүшаһидә олунур), атомда електронларын $\vec{l}$ орбитал вә $\vec{s}$ спин моментләри бир-бириндән асылы олмајараг вектори топланыр вә атомун $\vec{L}$ там механики вә $\vec{s}$ там спин моментләрини әмәлә кәтирир:

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^{Z}\vec{l}_i; \quad \vec{S} = \sum_{i=1}^{Z}\vec{s}_i .$$

Бу һалда атомун спин вә орбитал моментләри ајрылыгда сахланыр. Белә рабитә *нормал* вә ја *Рессел-Саундерс* рабитә адланыр. Бу рабитәдә електронун һалы дөрд: n– баш, l–орбитал, m–магнит, m_s –спин квант әдәдләри илә тә'јин олунур.

Спин орбитал гаршылыглы тә'сир күчлү олан атомларда (бу адәтән ағыр атомларда мүшаһидә олунур) әввәлчә һәр бир електронун $\vec{S}$ спин вә $\vec{l}$ орбитал моментләри топланараг електронун $\vec{j}$ там моментини әмәлә кәтирир, сонра ахырынчылар вектори топланмагла атомун $\vec{J}$ там моментини јарадыр:

$$\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{S}_i, \quad \vec{J} = \sum_{i=1}^{Z}\vec{j}_k .$$

Бу һалда атомун там моменти сахланыр, спин вә орбитал моментләри исә ајрылыгда сахланмыр. Атомда електронун һалы n–баш, l–орбитал, j–дахили (көмәкчи) вә там моментин пројексијасыны тә'јин едән m_j квант әдәдләри илә тә'јин олунур. Әввәлдә олдуғу кими j-нын верилмиш гијмәтиндә $m_j=-j, -j+1, \ldots, j-1, j$ кими $2j+1$ мүхтәлиф гијмәт алыр.

Демәли, мүрәккәб атомун һалыны тә'јин етмәк үчүн онун һәр бир електрону һаггындакы јухарыда көстәриләи мә'луматлардан башга, онун

$\vec{L}$ һәрәкәт мигдары вә $\vec{S}$ спин моментләри вә ја да $\vec{J}$ там моменти мә'лум олмалыдыр.

Сферик симметрик саһәдә сечилмиш истигамәт олмадығындан биринчи нөв атомларда (Рессел-Саудерс рабитәдә) L вә S-ин муәјјән гијмәтинә ујғун олан стасионар һал $\vec{L}$ вә $\vec{S}$ векторларынын фәзада мүмкүн мүхтәлиф јөнәлмә истигамәтләринә көрә чырлашмыш олур. $\vec{L}$ вектору $2L+1$, $\vec{S}$ вектору исә $2S+1$ сајда мүхтәлиф истигамәтдә јөнәлә билдијиндән һалын L-ә көрә чырлашма тәртиби $2L+1$, S-ә көрә чырлашма тәртиби $2S+1$-ә бәрабәрдир. Үмуми чырлашма тәртиби исә $(2L+1)(2S+1)$ олур.

Релјативистик еффектләр, јә'ни спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алыначаг дәрәчәлә бөјүк олан икинчи нөв атомларда орбитал вә спин моментләринин L вә S кими муәјјән гијмәтинә ујғун енержи сәвијјәси $\vec{J}$–там моментин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун сәвијјәләрә парчаланыр. Бу парчаланма сәвијјәнин *инчә гурулушу* вә јахуд *мултиплетлији* адланыр. L вә S -ин муәјјән гијмәтләриндә J кәмијјәти $L+S$ -дән $|L-S|$-ә гәдәр мүхтәлиф гијмәтләр алдығындан бахылан сәвијјә $L>S$ олдугда $2S+1$, $L<S$ олдугда исә $2L+1$ сәвијјәјә парчаланыр.

§ 83-дә көрдүк ки, ејни зәррәчикләр системинин стасионар һалынын координат (вә ја спин) функсијасы зәррәчикләрин јердәјишмә әмәлијјатына көрә мүхтәлиф симметријаја маликдир. Јердәјишмә симметријасынын муәјјән нөвүнә исә системин там спининин муәјјән гијмәти ујғундур. Беләликлә, атомун стасионар һалынын мултиплетлији (мәсәлән, синглетлик вә ја триплетлик) онун S там спин моментинин гијмәти илә тә'јин олунур.

J – нин һәр бир гијмәтинә ујғун сәвијјә $\vec{J}$ там моменти векторунун фәзадакы мүмкүн истигамәтләринин сајы гәдәр чырлашмыш олур. Чырлашма тәртиби $2J+1$-ә бәрабәрдир. Асанлыгла көстәрмәк олар ки, $2J+1$ чырлашма тәртиби $(2L+1)$ $(2S+1)$ -ә бәрабәрдир. Белә системи харичи магнит саһәсинә салдыгда сәвијјәнин чырлашмасы ја там, ја да гисмән ортадан көтүрүлүр (аномал Зејеман еффекти).

Мүрәккәб атомун енержи сәвијјәләри, бир зәррәчикли системләрин енержи һалларына охшар олараг, $L=0$ һалы S, $L=1$ һалы P, $L=2$ һалы D, $L=3$ һалы F вә и.а. кими ишарә олунур. Атомун там спининин вә там моментин гијмәтләри илә фәргләнән һаллары тәсвир етмәк үчүн һәрәкәт мигдары моментинин гијмәтинә ујғун һәрфин сағында ашағыда J-нин ујғун гијмәти, солунда јухарыда исә $2S+1$ әдәди јазылыр. Мәсәлән, $L=0$, $S=\frac{1}{2}$-дә $J=\frac{1}{2}$ олур. Бу һал $^2S_{1/2}$; $L=1$, $S=\frac{1}{2}$-дә $J=\frac{1}{2}$ вә $J=3/2$ олдуғундан, ујғун һаллар $^2P_{1/2}$ вә $^2P_{3/2}$ кими јазылыр.

Беләликлә, атомун һалыны там тә'јин етмәк үчүн ајры-ајры електронун (n, l) һалыны вә атомун бүтөвлүкдә L, S вә J кәмијјәтләрини билмәк лазымдыр. Мәсәлән, һелиум атомунун ики електронундан бири $n_1=1$, $l=0$, $s=\frac{1}{2}$, јә'ни $1s$ һалында, икинчиси исә $n_2=2$, $l=1$, $s=\frac{1}{2}$ илә верилән $2p$ һалында оларса, онун бүтөвлүкдә һалыны тә'јин етмәк үчүн $L=l_1+l_2$, $S=s_1+s_2$ вә J кәмијјәтләри тапылмалыдыр. Верилмиш L вә S-дә $J=L+S$, $L=S-1$, ... $(L-S)$ гијмәтләрини алдығындан, бахылан һал үчүн $L=1$, $S=1$ вә $J=2,1,0$ олур. Беләликлә һелиум атомунун ујғун һаллары $1s2p\,^3P_2$, $1s2p\,^3P_1$ вә $1s2p\,^3P_0$ олар.

Чох вахт електронларын n, l квант әдәдләри верилдикдә атомун мүмкүн олан һалларынын үмуми сајыны билмәк лазым кәлир. n вә l-ин верилмиш гијмәтләриндә електронун һаллары орбитал вә спин моментләринин сечилмиш (адәтән z оху) истигамәтдәки пројексијаларын мүхтәлиф гијмәти илә сечилә биләр. $m=-l$, $-l+1$, ..., 0, ... $l-1$, l кими $2l+1$ вә $m_s=\pm\frac{1}{2}$ кими ики гијмәт алдығындан n вә l-и ејни олан һалларын сајы $2(2l+1)$ олур. Бу һаллар ***еквивалент һаллар*** адланыр. Паули принсипинә көрә бу һалларын һәр бирини јалныз бир електрон тута биләр. Белә електронлар ***еквивалент електронлар*** адланыр. n вә l-ин верилмиш гијмәтләринә ујғун атомун өртүјү електронларла там долдугда, о, верилмиш нөвлү ***гапалы өртүк*** адланыр.

Атомун електронлары еквивалент сәвијјәләрдә дејилсә, атомун мүмкүн олан һалларынын сајыны тә'јин етмәк асандыр. Електронлар еквивалент сәвијјәләрдә јерләшдикдә мүмкүн олан һалларын сајыны тапмаг үчүн Паули принсипи нәзәрә алынмалыдыр.

Тутаг ки, атомун ики електронундан бири $n_1=3$, $l_1=2$, дикәри исә $n_2=2$, $l_2=1$ еквивалент олмајан һалларда јерләшир. Системин там һәрәкәт мигдары моменти $L=l_1+l_2$, ... (l_1-l_2)-јә гәдәр 3,2,1; там спин моменти исә $S=S_1+S_2,...,(S_1-S_2)$-јә гәдәр 0,1 гијмәтләрини алыр. Белә ики електронлу атом $S=0$ оланда ^1P, ^1D, ^1F һалларында, $S=1$-дә исә ^3P, ^3D, ^3F һалларында ола биләр.

Електронларын еквивалент һалларда јерләшдијини фәрз едәк. Әввәлчә бизә мә'лум олан һелиум атомунун һәр ики електронунун ејни бир һалда, јә'ни $n_1=n_2$ вә $l_1=l_2=0$ һалында олдуғуну гәбул едәк. Билдијимиз кими ики електронлу системин там спини $S=0$ вә 1 гијмәтләрини ала биләр. Лакин Паули принсипинә көрә електронларын спинләринин паралел јөнәлән $S=1$ һалы гадаған олунур вә атом ^3S триплет һалында ола билмәз. Белә систем јалныз ^1S синглет һалына малик ола биләр.

Инди дә фәрз едәк ки, һәр ики електрон $n_1=n_2$ вә $l_1=l_2=1$ һалындадыр. Електронларын орбитал моментләринин пројексијалары $m_1=1$, 0, -1 вә $m_2=1$, 0, -1; спин моментләринин пројексијалары исә

$m_{1s}=\pm\frac{1}{2}$ вә $m_{2s}=\pm\frac{1}{2}$ кими гијмәтләр алдығындан, һәр бир електронун мүмкүн олан һаллары:

$$1)\ m=1,\ m_s=\frac{1}{2},\quad 2)\ m=0,\ m_s=\frac{1}{2},\quad 3)\ m=-1,\ m_s=\frac{1}{2},$$

$$4)\ m=1,\ m_s=-\frac{1}{2},\quad 5)\ m=0,\ m_s=-\frac{1}{2},\quad 6)\ m=-1,\ m_s=-\frac{1}{2}$$

олар.

Белә електронлары олан атомун мүмкүн олан һалларыны тә'јин етмәк үчүн атомун һәрәкәт мигдары вә спин моментләри тапылмалыдыр. Һәрәкәт мигдары моментинин $L=2,1,0$ гијмәтләринә ујғун атом D, P, S һалларында ола биләр. Бу һаллар там спин моментинин гијмәтинә ујғун $S=0$ -да синглет, $S=1$ -дә триплет групу тәшкил едир. Атомун һәрәкәт мигдары вә спин моментләринин $M_z=m_1+m_2$ вә $M_s=m_{1s}+m_{2s}$ пројексијаларынын гијмәтләрини дә нәзәрә алсаг, атом ашағыдакы һалларын бирини тута биләр:

$$\begin{aligned}&1)\ M_z=2,\ S_z=0;\ \ M_z=1,\ S_z=0;\ \ M_z=0,\ S_z=0\rightarrow{}^1D\\&2)\ M_z=1,\ S_z=1;\ \ M_z=1,\ S_z=0;\ \ M_z=0,\ S_z=1,\ M_z=0,\ S_z=0\rightarrow{}^3P\\&3)\ M_z=0,\ S_z=0\rightarrow{}^1S\end{aligned}\tag{A}$$

M_z-ин мәнфи гијмәтләринә ујғун һаллар бурада көстәрилмәмишдир. О, һеч бир јенилијә кәтирмир.

Инди дә атомун енержи сәвијјәләринин һансы ардычыллыгла дүзүлмә гајдасы илә таныш олаг.

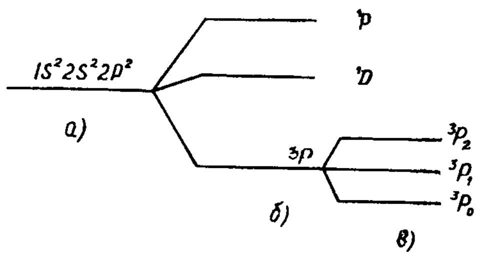
Ејни бир електрон конфигурасијасына (јә'ни n, l-ин мүәјјән гијмәтинә) ујғун, лакин L һәрәкәт мигдары моментинин вә S спин моментинин гијмәтләри илә фәргләнән енержи сәвијјәләри арасындакы фәрг атомун електронларынын електростатик гаршылыглы тә'сиринин нәтичәсидир. Адәтән бу һалларын енержиләри арасындакы фәрг, мүхтәлиф електрон конфигурасијаларына ујғун һалларын енержиләри арасындакы фәргдән бир нечә дәфә кичикдир.

Атомун ејни електрон конфигурасијасына аид, L вә S-ин гијмәтләри илә фәргләнән енержи сәвијјәләринин дүзүлүшү ***Һунд гајдасы*** илә тә'јин олунур. Һунд гајдасына көрә атомун мүәјјән електрон конфигурасијасына аид олан енержи сәвијјәләриндән S там спинин ән бөјүк гијмәтинә ујғун сәвијјә ән кичик енержијә ујғундур. S -ин мүәјјән гијмәтинә аид олан енержи сәвијјәләри арасында исә L-ин ән бөјүк гијмәтинә ујғун сәвијјә ән кичик енержијә маликдир.

Бу гајдалары атомун (А) илә верилмиш һаллар чохлуғуна тәтбиг етсәк, (А)-нын 2) бәндиндә көстәрилән сәвијјәләр чохлуғу S-ин ән бөјүк гијмәтинә ($S=1$) ујғундур. Демәли, ^1S, ^3P вә ^1D сәвијјәләриндән ^3P сәвијјәси ән кичик енержијә маликдир. Спинин $S=0$ гијмәтинә аид ^1S

вə ^1D сəвијјəлəриндəн исə L- ин əн бөјүк гијмəтинə малик ^1D сəвијјəсинин енержиси кичикдир. Бүтүн бу дедиклəримиз Рессел-Саундерс рабитəли атомлара аиддир.

Јухарыда верилəн анализ, јəгин ки, харичи тəбəгəдə ики валент електрону олан нисбəтəн ағыр атомлар үчүн дə доғру галар. Мəркəзи (сферик симметрик) саhə јахынлашмасында атомун hаллары l, m, m_s -ə көрə чырлашмыш олур. Нүвə вə дахили електронларын валент електрона тə'сири нəзəрə алындыгда l-ə көрə чырлашма ортадан көтүрүлүр вə харичи ики електрону (np) hалында олан атом үчүн ^3P , ^1D вə ^1S hаллары мүмкүн олур. Спин-орбитал гаршылыглы тə'сир нəзəрə алындыгда исə ^1D вə ^1S синглет hаллары өз фəрдилијини сахлајыр, ^3P hалы исə $l_1+l_1=2$ вə $M_z=2,\ 1,\ 0$ (M_z-ин мəнфи гијмəтлəри вəзијјəти дəјишмир) олдуғундан ^3P hалы $^3P_2$, $^3P_1$ вə ^3P_o кими үч hала парчаланыр. Шəкил 39-да карбон атому мисалында дедиклəримиз нүмајиш етдирилир.



Шəкил 39.

а) мəркəзи саhə јахынлашмасында,
б) нүвə вə дахили електронларын тə'сири нəзəрə алындыгда,
в) спин-орбитал тə'сир дахил едилдикдə.

(jj) рабитəли атомларын енержи сəвијјəлəринин дүзүлүшү hаггында да ашағыдакы гајдалар доғрудур.

Əввəлчə јадымыза салаг ки, J там момент L вə S-ин верилмиш гијмəтлəриндə $L+S$ -дəн $|L-S|$-ə гəдəр мүхтəлиф гијмəт алыр. ($\breve{J}^2$, $\breve{L}^2$ вə $\breve{S}^2$ операторлары коммутасија етдијиндəн) вə J-нин гијмəти илə фəрглəнəн hаллар чохлуғу исə, јухарыда дедијимиз кими, мултиплетлик адланыр.

Атомун J там моменти бөјүдүкдə мултиплетин енержи сəвијјəси јухары галхырса, белə гурулуш ***нормал гурулуш*** адланыр. Бу заман əн кичик енержијə малик сəвијјə J-нин минимум гијмəтинə ујғун олур. J -нин гијмəти бөјүдүкдə мултиплетин енержи сəвијјəси ашағы дүшүрсə, белə гурулуш ***чеврилмиш гурулуш*** адланыр. Бунда əн кичик енержијə малик сəвијјə J -нин максимум гијмəтинə ујғун олур.

Бахылан атомун нормал вə ја чеврилмиш гурулуша малик олмасы ашағыдакы кими тə'јин олунур. Атомун еквивалент електронларынын сајы мүмкүн олан електронларын сајынын јарысындан чохдурса, атом чеврилмиш, аздырса, нормал гурулуша малик олур.

Јухарыда бахдығымыз ики еквивалент електрон системи $(n_1=n_2,\ l_1=l_2=1)$ hалында мултиплетин гурулушу нормал гурулуш олур. Мəсəлəн, онун $L=1$, $S=1$ сəвијјəси J-ја көрə $J=2,\ 1,\ 0$ кими үч сəвијјəјə парчаланыр. Бу мултиплетдə əн ашағы сəвијјə ^3P_o , сонра $^3P_1$ вə əн јүксəк сəвијјə исə $^3P_2$ олур.

Башга бир мисала бахаг. Оксикенин електрон конфигурасијасы $1s^22s^22p^4$ -дур (бах §91), $2p^4$ сəвијјəсиндə еквивалент електронларын сајы мүмкүн олан сајын (јə'ни 6-нын) јарысындан чохдур. Атомун мултиплети чеврилмиш гурулуша маликдир. Ону ики дəфə ионлашдырдыгда $2p$-дə икичə електрон галыр вə електрон гурулушу $2p^2$ олур. Бу hалда мултиплет нормал гурулуша малик олур.

§ 89. БИР ОПТИК ЕЛЕКТРОНЛУ АТОМЛАРЫН КВАНТ НƏЗƏРИЈЈƏСИ

Мүрəккəб атомларын квант нəзəријјəсиндə алынан нəтичəлəрин нə дəрəчəдə тəчрүби нəтичəлəрлə ујғун олдуғуну гəлəви металлар групу мисалында нүмајиш етдирмəк олар.

Атомун оптик вə кимјəви хассəлəри, билдијимиз кими, нүвəдəн кифајəт гəдəр узагда јерлəшəн харичи тəбəгəдəки електронларын сајы илə тə'јин олунур. Литиум (Li) натриум (Na), калиум (K) вə и.а. гəлəви металларын атомларынын харичи тəбəгəсиндə оптик адланан јалныз бир електрон јерлəшир. Бу електрон нүвəнин вə дахили тəбəгəлəрдə олан електронларын биркə јаратдығы електрик саhəсиндə həрəкəт едир. Дахили електронларын електрик саhəсинин оптик електрона көстəрдији тə'сирин характерини мүəјјəн етмəк үчүн § 88-дə електрон тəбəгəлəри hаггында вердијимиз мə'луматдан вə фермионлардан ибарəт систем үчүн сөјлəнмиш Паули принсипиндəн истифадə едəк. Həмин параграфда гејд етмишдик ки, həр hансы бир атомун K тəбəгəсиндə јалныз ики мүхтəлиф hал вар. Паули принсипинə көрə орада јалныз ики електрон ($1s$ -өртүјү) јерлəшə билəр вə бунунла həмин тəбəгə долмуш олур. L –тəбəгəсинин долмасы үчүн исə сəккиз електрон (икиси $2s$, алтысы $2p$ өртүјүндə) лазымдыр вə и.а.

Мүрəккəб атомларда тəбəгə вə өртүклəрин долма ардычыллығыны мүəјјəн етмəк үчүн електронларын гаршылыглы тə'сирини дə нəзəрə алмаг лазымдыр.

Квант механикасында мүрəккəб атомлар үчүн јазылмыш Шрединкер тəнлијинин тəхмини həлл едилмə методлары инкишаф етдирилмишдир. Онлар атомларын електрон тəбəгə вə өртүклəринин долма гајдасыны мүəјјəн етмəјə вə рабитə енержисини hесабламаға имкан верир.

Бу методлардан ән садәси вариасија методудур (Ритс принсипи, бах § 36). Бу метод јүнкүл атомлара тәтбиг олунур вә онун васитәси илә стасионар сәвијјәләрин далға функсијалары вә енержиләри тә'јин едилә билир.

Икинчи даhа үмуми вә кениш тәтбиг тапмыш метод өзүнә узлашан саhә (Хартри–Фок) методудур (бах § 86). Бу метод мүрәккәб атомлара да тәтбиг олуна билир. Ондан чыхыр ки, мүрәккәб атомларда електронларын пајланмасы тәбәгәли гурулуша маликдир вә нәhајәт о, тәбәгә вә өртүкләрдә електронларын пајланма гајдасыны мүәјјән етмәјә имкан верир. Лакин, гејд едәк ки, бу методун тәтбиги мүрәккәб hесаблама машынлары васитәсилә апарыла билән бөјүк hәчмли hесабламалара кәтирир. Бунун нәтичәсиндә атомун характеристикалары (далға функсијалары вә енержи сәвијјәләри) үчүн аналитик ифадәләр јох, јалныз әдәди чәдвәлләр алыныр.

Мүрәккәб атомлар үчүн нисбәтән аз дәгиглијә малик нәтичәләри Томас–Ферми методу (бах § 92) васитәсилә дә алмаг олур. Буна бахмајараг, метод хејли садә олдуғундан о, мүрәккәб атомларын hесабланмасына даhа тез-тез тәтбиг олунур.

Һидрокен (H) вә hелиум (He) атомларынын әсас hалында hидрокенин бир, hелиумун ики електрону K тәбәгәсиндә јерләшир вә He атомунда K тәбәгә долур. Литиумун (Li) ики електрону K тәбәгәсиндә, үчүнчү електрону исә L тәбәгәсиндә јерләшмәли олур. Онун електрон гурулушу $1s^2 2s^1$ кими јазылыр. Буна охшар hәрәкәт етсәк, онунчу елемент олан неон (Ne) атомунда hәм K вә hәм дә L тәбәгә долур ($1s^2 2s^2 2p^6$). Он биринчи елемент натриум (Na) атомунун он електрону K вә L тәбәгәләриндә, он биринчи електрону исә M тәбәгәсиндә јерләшмәли олур ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$) вә и.а.

Тәбәгәләрарасы мәсафә кифајәт гәдәр бөјүк олдуғундан He, Ne, Ar кими газлары hәјәчанландырмаг үчүн кимјәви реаксијаларда ајрылан енержи кифајәт етмир вә ади шәраитдә онлар кимјәви реаксијаја кирмир. Буна көрә дә онлар *тә'сирсиз газлар* адланыр. Тә'сирсиз газларын бу хассәсини долмуш тәбәгәләрдә електрик јүкүнүн сферик симметрик шәкилдә пајланмасы илә дә изаh етмәк олар, беләки, кимјәви енержи бу тәбәгәләри деформасија едә билмәдијиндән атомлар кимјәви реаксијаја кирә билмир.

Li, Na, K гәләви металларын атомларындан оптик електрону харич етсәк, онларын бир гат ионларынын (Li^+, Na^+, K^+) електрон тәбәгәси ујғун олараг, He, Ne, Ar атомларынын електрон тәбәгәси үзәринә дүшүр. Буна көрә дә гәләви металларын атомларынын дахили тәбәгәсиндә електрик јүкүнүн сферик симметрик шәкилдә пајландығыны гәбул етмәк олар. Дикәр тәрәфдән, харичи оптик електронун тә'сири нәтичәсиндә дахили електрон тәбәгәсинин чох чүзи полјарлашдығыны гәбул етсәк, hәмин атомларда оптик електронун hәрәкәтинә, тәхминән, нүвәнин вә дахили електронларын биркә јаратдығы мәркәзи саhәдәки hәрәкәти кими бахыла биләр.

Нүвәнин вә дахили електронларын биркә саhәсиндә оптик електронун потенсиал енержиси

$$U(r) = -eV(r). \qquad (89.1)$$

бурада $V(r)$ –биркә саhәнин потенсиалыдыр. Радиусу r олан сферанын дахилиндә електронларын сајы $N(r)$, нүвәнин јүкү Ze оларса, биркә саhәни јарадан еффектив јүк

$$eZ_{еф}(r) = eZ - eN(r) \qquad (89.2)$$

олар, бурада $Z_{еф}$ – r мәсафәсиндә нүвәнин еффектив нөмрәсидир.

(89.2)-дән көрүнүр ки, дахили електронларын јаратдығы саhә нүвә саhәсинин оптик електрона көстәрдији тә'сири зәифләдир. Бу, нүвә саhәсинин *екранлашдырылмасы* адланыр. Фәзадакы hәрәкәти заманы оптик електрон нүвәнин јахынлығындан кечдикдә дахили електронларын она тә'сири чүзи олур вә $r \to 0$ -да сыфра јахынлашыр, мәсафә дахили електрон өртүјүнүн a радиусундан бөјүк олдугда исә ($r > a$) тә'сир ән бөјүк гијмәтә чатыр. Бу онунла изаh олунур ки, биринчи hалда оптик електрон олан јердә саhә јарадан дахили електронларын сајы чох аз (јүклү күрәнин електрик саhәсинин хассәсинә әсасән), икинчи hалда исә саhәнин јаранмасында онларын hамысы иштирак етмиш олур.

Гаусс теореминә әсасән $eZ_{еф}$ еффектив јүкүн јаратдығы електрик саhәсинин интенсивлији

$$\mathcal{E}(r) = \frac{eZ_{еф}}{r^2}, \qquad (89.3)$$

потенсиалы исә

$$V(r) = -\int_{+\infty}^{r} \mathcal{E}(r)dr = -e\int_{+\infty}^{r} \frac{Z_{еф}}{r^2}dr \qquad (89.4)$$

олар.

Саhәнин потенсиал енержиси јалныз нүвә илә оптик електрон арасындакы мәсафәнин мүтләг гијмәтиндән асылы олдуғуна көрә (89.1) потенсиал енержили саhәдәки hәрәкәт үчүн јазылмыш Шрединкер тәнлијини hәлл етдикдә $Y_l^m(\theta, \varphi)$ бучаг (сферик) функсијалары дәјишиклијә уғрамыр, $R = \dfrac{u(r)}{r}$ әвәзи илә дахил едилән $u(r)$ радиал функсијасы үчүн исә (40.17) тәнлији әвәзиндә

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2} + (\varepsilon + V(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2})u(\rho) = 0 \qquad (89.5)$$

тәнлији алыныр.

Лакин бу тәнлик дәгиг һәлл олунмур. Ону јалныз әдәди интеграллама јолу илә (јахуд електрик һесаблама машынларынын көмәјилә) һәлл етмәк олур.

(89.4)-дән $V(\rho)$ еффектив потенсиалы үчүн алынан ифадә, јәгин ки, Кулон саһәсинин $-\frac{Ze}{r}$ потенсиалындан фәргли олачаг. Буна көрә дә истәнилән сферик симметрик саһә һеч дә Кулон саһәси олмур вә белә саһәләрдәки һәрәкәтдә стасионар сәвијјәнин енержиси, Кулон саһәсиндә олдуғу кими, јалныз n баш квант әдәдиндән јох, l орбитал квант әдәдиндән дә асылы олур, јә'ни Кулон саһәсиндәки l үзрә олан тәсадүфи чырлашма бурада ортадан көтүрүлүр.

Буну нүмајиш етдирмәк үчүн (89.5)-дә $V(\rho)$ еффектив потенсиалы $\frac{2Z}{\rho}(1+\frac{\beta}{\rho})$ илә әвәз едәк:

$$\frac{d^2u(\rho)}{d\rho^2}+\left(\varepsilon+\frac{2Z}{\rho}-\frac{l'(l'+1)}{\rho^2}\right)u(\rho)=0, \qquad (89.6)$$

бурада l' – артыг там әдәд олмур, о, l орбитал әдәди илә

$$l'(l'+1)=l(l+1)-2Z\beta \qquad (89.7)$$

мүнасибәтиндән тә'јин олунур. § 40-а әсасән, бу һалда ε үчүн

$$\varepsilon=-\frac{Z^2}{n^{*2}}$$

ифадәси алыныр, бурада n^* – еффектив баш квант әдәди, n баш квант әдәди илә

$$n^*=n_r+l'+1=n_r+l+1+l'-l=n+\delta_l \qquad (89.9)$$

кими ифадә олунур, бурада $\delta_l=l'-l$ баш квант әдәди n-ә кичик әлавәдир. Бу заман системин там енержиси

$$E_{nl}=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^{*2}}=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2(n+\delta_l)^2} \qquad (89.10)$$

n вә l квант әдәдләриндән асылы олур. Башга сөзлә, l орбитал квант әдәди үзрә чырлашма ортадан көтүрүлүр.

(89.5) тәнлијинин әдәди интеграллама јолу илә һәлли дә оптик електронлу атомларын там енержи спектри үчүн (89.10) ифадәсинә кәтирир вә δ_l дүзәлиши аналитик һесабланыр. δ_l-ин әдәди гијмәти физики тәчрүбәләрин дәгиглији бахымындан мараглыдыр. Бизим мәгсәдимиз исә онун l-дән асылылығыны көстәрмәк иди.

Беләликлә, Кулон саһәсиндән фәргли бүтүн мәркәзи саһәләрдә n баш квант әдәдинин гијмәти илә тә'јин олунан һәр бир електрон тәбә-

гәси l-ә көрә бир нечә өртүјә парчаланыр, јә'ни l үзрә чырлашма арадан көтүрүлүр. Беләликлә, гаршылыглы тә'сир енержиси валент електронун електрон булудунун шәклиндән асылы олур. Атомун фәзада јөнүнү тә'јин едән магнит квант әдәдинә кәлдикдә исә, фәзада үстүнлүк тәшкил едән истигамәт (харичи саһә) олмадығындан, атомун енержи сәвијјәләринин она көрә чырлашмасы сахланыр.

Јухарыда гејд едилди ки, гәләви металларын дахили тәбәгәләри долмуш, харичи тәбәгәдә исә јалныз бир електрон һәрәкәт едир. Онлар үчүн дахили тәбәгәләрдә олан електронларын сајы $N(r)=Z-1$ -ә бәрабәр олдуғундан $Z_{еф}=Z-N=1$ олур. Демәли, електрону харичи өртүкдә тутуб сахлајан потенсиал енержи, һидрокен атомунда олдуғу кими,

$$V_{еф}=-\frac{Z_{еф}e^2}{r}=-\frac{e^2}{r} \qquad (89.11)$$

олур. $V_{еф}$-ин бу ифадәсини (89.5) тәнлијиндә јазсаг, алынан Шрединкер тәнлији һидрокен атому үчүн јазылмыш (40.17) тәнлијинин үзәринә дүшүр. Бурадан гәләви металларын атомунун стасионар һалларынын енержиси үчүн

$$E_n^o=-\frac{e^2}{2an^2}=-\frac{R\hbar}{n^2}, \qquad (89.12)$$

далға функсијасы үчүн исә (40.40) ифадәси алыныр:

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}. \qquad (89.13)$$

Әлбәттә бүтүн бу дедикләримиз о заман доғру оларды ки, нүвә илә дахили тәбәгәләрдә олан електронлар бирликдә нөгтәви јүк әмәлә кәтирсин. Лакин бир тәрәфдән гәләви металларда валент електрон илә нүвә вә дахили електронларын гаршылыглы тә'сири дахили јүкүн полјарлашмасына вә полјарлашма гүввәсинин јаранмасына кәтирир, дикәр тәрәфдән исә, дахили јүк нөгтәви дејил вә о, мүәјјән һәчмдә һәр һансы бир сыхлыгла јајылмыш олур. Нәтичәдә (89.12) илә верилмиш енержијә бу ики сәбәбә ујғун дүзәлишләр етмәк лазым кәлир вә онлар енержи сәвијјәләринин l үзрә чырлашмасыны ортадан көтүрүр.

Биз бу дүзәлишләрин һесабланмасы үзәриндә дајанмајачағыг. Һәр ики һалда n - баш квант әдәдинә алынан δ_l дүзәлишинин һазыр ифадәсини кәтирмәклә кифајәтләнәчәјик*.

Валент електронун нүвә–дахили електронлар системини полјарлашдырмасы нәтичәсиндә мејдана чыхан полјарлашма гүввәси һесабына атомун енержисинә дүзәлиш

---

* Дүзәлишләрин һесабланмасы илә марагланан охучулар А.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский – Квантовая механика, Москва, "Наука", 1979, сәһ. 398–400 китабына мүрачиәт едә биләрләр.

$$\Delta E_{\text{пол}} = -\frac{e^2}{2a}\frac{2\delta_l}{n^3} \tag{89.14}$$

ифадәси илә верилир, бурада

$$\delta_l = \delta_{1l} - \frac{\delta_{2l}}{n^2},$$

$$\delta_{1l} = 3\beta / \left[\ 4a^3(l-\frac{1}{2})l(l+\frac{1}{2})(l+1)(l+3/2)\ \right], \tag{89.15}$$

$$\delta_{2l} = \frac{1}{3}l(l+1)\delta_{1l},$$

β — атомун полјарлашма әмсалыдыр.

(89.12) вә (89.14)-дән атомун там енержиси үчүн

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2an^2} - \frac{e^2}{2a}\frac{2\delta_l}{n^3} = -\frac{e^2}{2a}(\frac{1}{n^2} + \frac{2\delta_l}{n^3})$$

гијмәти алыныр. Бурада

$$\frac{1}{(n-\delta_l)^2} = \frac{1}{n^2}\left(\ 1 - \frac{\delta_l}{n}\ \right)^{-2} \approx \frac{1}{n^2} + \frac{2\delta_l}{n^3}$$

тәхмини бәрабәрлик нәзәрә алынса, там енержи гәбул едилмиш ади шәкилдә јазыла биләр:

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2an^{*2}} \approx -\frac{e^2}{2a(n-\delta_l)^2} \tag{89.16}$$

Гејд едәк ки, $(n\ \ s)$ сәвијјәсиндә олан електрон үчүн (89.15) ифадәсиндән истифадә едилә билмир, чүнки бу һалда δ_{1l} сонсузлуға јахынлашыр. Бу онунла әлагәдардыр ки, полјарлашма гүввәси харичи електронун нүвә вә дахили електронлардан хејли узагда јерләшдији һалларда әһәмијјәт кәсб едир. s һалында далға функсијасы $r=0$ олдугда белә сыфырдан фәргли галыр (бах § 40).

Нүвә вә дахили електронларын јүкү радиусу R_o олан һәчмдә бәрабәр јајылмыш олдуғу фәрз едилдикдә енержијә дүзәлишин (ns) һалы үчүн тәртибини тә'јин етмәк олур:

$$\Delta E_{hoc} = -\frac{2}{5}\cdot\frac{Ze^2R_o^2}{a^3n^3} = -\frac{e^2 2\delta}{2an^3}, \tag{89.17}$$

бурада

$$\delta = \frac{2}{5}\cdot\frac{ZR_o^2}{a^2}. \tag{89.18}$$

Атомун радиусу үчүн Томас–Ферми моделиндә алынан

$$R_o = \frac{\gamma a}{Z^{1/3}} \tag{89.19}$$

гијмәти (89.17)-дә јеринә јазсаг, там енержи үчүн јенә дә (89.16)-ја охшар ифадә алыныр:

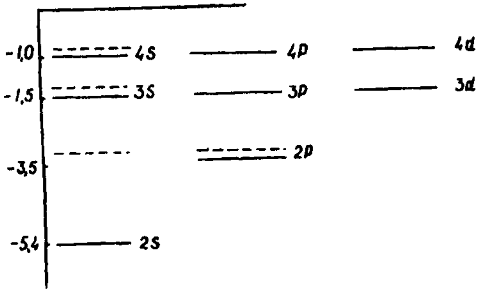
$$E_{nl=0} = -\frac{e^2}{2an^{*2}} = -\frac{e^2}{2a(n-\delta)^2}. \tag{89.20}$$

$n^*=n-\delta$-дыр вә δ кәмијјәти (89.18) илә верилир.

Литиум атому үчүн (ns) вә башга һаллара олан дүзәлишләри гијмәтләндирсәк, $l=1$, $n=2$-јә ујғун $2p$ һалында (89.14)-дән δ_l үчүн 0,04 гијмәти, $2s$ һалында исә (89.20)-дән бир тәртиб бөјүк гијмәт алыныр.

δ дүзәлишләри гәләви металларын енержи сәвијјәсини, һидрокен атомунун ујғун сәвијјәсинә нисбәтән ашағы сүрүшдүрүр. n баш квант әдәдинин гијмәти бөјүк олдугча сүрүшмә кичик олур, n-нин мүәјјән гијмәтиндә l кичик олдугча сүрүшмә бөјүк олур. Бунлар Li атомунун енержи сәвијјәләри диаграмында јахшы көрүнүр (шәкил 40). Пунктирлә ујғун һидрокен атомунун сәвијјәләри көстәрилмишдир.

Инди дә гәләви металларын әсас спектрал серијалары илә таныш олаг. Биз һидрокенин серијалары илә мүгајисәдә јалныз литиум вә натриумун серијаларыны кәстәрмәклә кифајәтләнәҹәјик. Серијалар һидрокен үчүн алынмыш $\Delta l = \pm 1$ сечмә гајдасы көзләнилмәклә верилир. Валент електрон литиумда $1s$, натриумда исә $2s$ сәвијјәләрини тута билмәдијиндән бунларын спектрал серијаларында Лајман серијасынын үзәринә дүшән серија јохдур. Лакин Балмер серијасына охшар үч серија мөвчуддур.



Шәкил 40. Гәләви металларын енержи сәвијјәләри (бүтөв хәттләр) һидрокенин енержи сәвијјәләринә (гырыг хәттләр) нисбәтән ашағы сүрүшүр.

1. **Баш серија**.

Бу серијада сабит термләр ујғун олараг 2^*s вә 3^*s, дәјишән терм исә (n^*p)-дир:

литиум үчүн

$$\omega = (n^*p) - (2^*s) = \frac{e^2}{2\hbar a}\left\{\ \frac{1}{[2-\delta(0)]^2} - \frac{1}{[n-\delta(1)]^2}\ \right\}; \tag{89.21}$$

натриум үчүн

$$\omega=(n^{*}p)-(3^{*}s)=\frac{e^{2}}{2\hbar a}\left\{\frac{1}{[3-\delta(0)]^{2}}-\frac{1}{[n-\delta(1)]^{2}}\right\}.$$

2. **Биринчи көмәкчи серија**.

Бу серијада сабит терм $2^{*}p$ вә $3^{*}p$, дәјишән терм исә $(n^{*}d)$-дир:
литиум үчүн

$$\omega=(n^{*}d)-(2^{*}p)=\frac{e^{2}}{2\hbar a}\left\{\frac{1}{[2-\delta(1)]^{2}}-\frac{1}{[n-\delta(2)]^{2}}\right\}, \qquad (89.22)$$

натриум үчүн

$$\omega=(n^{*}d)-(3^{*}p)=\frac{e^{2}}{2\hbar a}\left\{\frac{1}{[3-\delta(1)]^{2}}-\frac{1}{[n-\delta(2)]^{2}}\right\}$$

3. **Икинчи көмәкчи (кәскин) серија**.

Бу серијада сабит терм $(2^{*}p)$ вә $(3^{*}p)$, дәјишән терм исә $(n^{*}s)$ -дир,
литиум үчүн

$$\omega=(n^{*}s)-(2^{*}p)=\frac{e^{2}}{2\hbar a}\left\{\frac{1}{[2-\delta(1)]^{2}}-\frac{1}{[n-\delta(0)]^{2}}\right\} \qquad (89.23)$$

натриум үчүн

$$\omega=(n^{*}s)-(3^{*}p)=\frac{e^{2}}{2\hbar a}\left\{\frac{1}{[3-\delta(1)]^{2}}-\frac{1}{[n-\delta(0)]^{2}}\right\}.$$

4. Нәһајәт гәләви металларда **фундаментал серија да** мүшаһидә олунур. Бурада сабит терм $(3^{*}d)$, дәјишән терм исә $(n^{*}f)$-дир.

$$\omega=(n^{*}f)-(3^{*}d) \qquad (89.24)$$

(89.21)–(89.24) ифадәләриндә n=3,4,... гијмәтләрини алыр.

Һидрокен атомунда олдуғу кими, бу серијаларын спектрал хәтләринин мултиплет гурулушу спин вә релјативистик еффектләрин нәтиҹәсидир. Спектрал хәтләрин мултиплет гурулушуну көстәрмәк үчүн һидрокен атому үчүн чыхарылмыш вә енержијә спин-орбитал вә релјативистик еффектләр һесабына алынан

$$\Delta E_{nlj}=-\frac{\hbar RZ^{4}\alpha^{2}}{n^{4}}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right) \qquad (89.25)$$

дүзәлишин ифадәсиндән истифадә етмәк олар (бах § 75). $\alpha=\frac{e^{2}}{\hbar c}=\frac{1}{137}$ - инҹә гурулуш сабитидир.

Гәләви металлар үчүн буна еквивалент ифадәни (89.25)-дә Z -и $Z_{сф}$ илә әвәз етмәклә алмаг олар:

$$\Delta E_{nlj}=-\frac{\hbar R\alpha^{2}Z_{сф}^{4}}{n^{4}}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right). \qquad (89.26)$$

Бахылан һалын далға функсијасы сферик симметријаја малик дејилсә, јә'ни валент електрон һәрәкәти заманы нүвә вә дахили електронлар јерләшдији областа дахил олмурса, $Z_{еф}=1$ көтүрүлә биләр, чүнки бу һалда $Z-1$ електронларын һамысы нүвә саһәсини екранлашдырыр.

Һалын далға функсијасы сферик симметријаја малик олдугда, јә'ни валент електрон нүвә вә дахили електронлар областына дахил ола билирсә, $Z_{еф}$ јалныз тәҹрүбәдән тә'јин олуна биләр.

Дахили (вә ја көмәкчи) квант әдәди

$$j=\frac{1}{2},\ l=0; \qquad j=l\pm\frac{1}{2},\ l\neq 0 \qquad (89.27)$$

гијмәтләр алдығындан гәләви металларын парчаланмајан s-термдән башга, бүтүн термләри дублет гурулуша малик олур. Термин парчаланма мәсафәсини тапмаг үчүн спин вә орбитал моментләрин паралел вә антипаралел олдуғу ики һала бахаг.

а) Моментләр паралел олдугда

$$-\frac{\Delta E_{nlj=l+\frac{1}{2}}}{\hbar}=\frac{R\alpha^{2}Z_{еф}^{4}}{n^{4}}\left(\frac{n}{l+1}-\frac{3}{4}\right). \qquad (89.28)$$

б) Моментләр антипаралел олдугда

$$-\frac{\Delta E_{nlj=l-\frac{1}{2}}}{\hbar}=\frac{R\alpha^{2}Z_{сф}^{4}}{n^{4}}\left(\frac{n}{l}-\frac{3}{4}\right) \qquad (89.29)$$

олур. Бунларын фәрги парчаланма мәсафәсини верир:

$$\Delta\omega_{nl}=\frac{R\alpha^{2}Z_{сф}^{4}}{n^{3}l(l+1)}. \qquad (89.30)$$

Бурадан көрүнүр ки, парчаланма мәсафәси n баш квант әдәдинин кубу илә тәрс мүтәнасибдир.

Баш серијада башланғыч s терм парчаланмыр, $l=1$-ә ујғун дәјишән p-терм парчаландығындан, онун спектрал хәтләри кетдикчә бир-биринә јахынлашан дублет гурулуша малик олур:

$$\Delta\omega_n = \frac{R\alpha^2 Z_{еф}^4}{2n^3}.$$

Икинчи көмәкчи серијаја кәлдикдә исә башланғыч $n=2$, $l=1$ терми парчаланыр, дәјишән s -терм исә парчаланмыр. Она көрә дә серијанын бүтүн хәтләри үчүн парчаланма мәсафәси ејни олур:

$$\Delta\omega_2 = \frac{R\alpha^2 Z_{еф}^4}{16}.$$

Галан башга серијаларда һәм башланғыч вә һәм дә дәјишән терм парчаланан олдуғундан, онларда спектрал хәтләрин мултиплет гурулушу мүрәккәб олур.

§ 90. АТОМЛАРЫН РЕНТКЕН СПЕКТРЛӘРИ

(Характеристик спектрләр)

Оптик спектрләр харичи тәбәгәләрин електрон конфигурасијасы һаггында мә'лумат верирсә, рентген спектрләри дахили тәбәгәләрин електрон конфигурасијасы һаггында мә'лумат алмаға имкан верир.

Оптик електронлар атомун нүвәси илә зәиф рабитәдә олдуғундан онлары һәјәчанландырмаг, јә'ни јухары бош енержи сәвијјәсинә кечирмәк үчүн лазым олан енержи дә аз (бир нечә он *еВ*) олур. Бу онунла әлагәдардыр ки, n баш квант әдәди бөјүдүкчә тәбәгә вә өртүкләр арасындакы мәсафә (енержи ваһидләриндә) кичилир вә нисбәтән аз енержи кечид јарада билир.

Орта вә ағыр атомларын дахили тәбәгәләриндә електронларын нүвә илә рабитә енержиси исә хејли бөјүкдүр (бир нечә он *кеВ*). Белә тәбәгәдәки електрону харичи тәбәгәләрин бириндәки бош јерә кечирмәк үчүн она кифајәт гәдәр бөјүк енержи вермәк лазым кәлир.

Белә кечидләри јаратмаг үчүн рентген борусунун антикатоду сүр'әтли електрон сели илә бомбардман едилир. Бу заман бүтөв вә хәтти спектрә малик ики нөв рентген шүаланмасы бурахылыр. Бүтөв спектрли рентген шүаланмасы антикатода дүшән електронларын тормозланмасы нәтичәсиндә јараныр. Дүшән електрон селинин енержиси көтүрүлән елементә ујғун һәр һансы критик гијмәти кечдикдә антикатод ***хәтти рентген спектри*** шүаландырыр. Буна ***характеристик спектр*** дә дејилир, белә ки, һәр бир елемент өзүнә хас олан рентген спектри шүаландырыр.

Елементин рентген спектрләринин характери, оптик спектрләрдән фәргли олараг, бахылан елементин атомар һалда вә ја һәр һансы кимјәви бирләшмәнин тәркибиндә олмасындан асылы олмур.

Бүтүн елементләрин рентген спектрләри о гәдәр дә чох олмајан вә бир-бириндән ејни мәсафәдә јерләшмиш спектрал хәтләрдән ибарәтдир. Бүтүн спектр хәтләри ејни инчә гурулуша малик олур вә бир елементдән дикәринә кечдикдә спектр хәтләри тезлик шкаласында јерини дәјишир.

Елементләрин рентген спектрләри дә, хәтти оптик спектрләр кими, бир сыра серијалардан ибарәтдир. Онлар електрон һансы дахили тәбәгәдән чыхыбса, о тәбәгәнин дә адыны дашыјыр вә һансы харичи тәбәгәјә дүшмәсиндән асылы дејил. Серијалар ујғун олараг K-серија,L- серија, M- серија вә и.а. адланыр.

Орта вә ағыр атомларда K, L, M,... тәбәгәләри долмуш олур. Долмуш тәбәгәдәки електронларын үмуми там механики моменти сыфра бәрабәрдир. Һәр һансы (nl) өртүјүндән бир електрон чыханда, өртүк мүәјјән бир j там моменти газаныр вә бу һәјәчанланмыш һал (nlj) квант әдәдләри илә характеризә олунур.

Бош јерин һансы өртүкдә јаранмасындан вә j квант әдәдинин $j = l \pm \frac{1}{2}$ гијмәтиндән асылы олараг, ***рентген термләри*** адланан бу һәјәчанланмыш сәвијјәләр ашағыдакы кими ишарә олунур.

Бош јер олан сәвијјә: $1s_{1/2}, 2s_{1/2}, 2p_{1/2}, 2p_{3/2}, 3s_{1/2}, 3p_{1/2}, 3p_{3/2}, 3d_{3/2}, 3d_{5/2}, 4s_{1/2}, \ldots$

Термләр: $K \quad L_I \quad L_{II} \quad L_{III} \quad M_I \quad M_{II} \quad M_{III} \quad M_{IV} \quad M_V \quad N_I, \ldots$

Атомдан гопарылмыш електрон K –тәбәгәдән ($1s_{1/2}$ өртүјүндән) чыхыбса, алынмыш бош јерә L, M, N вә и.а. тәбәгәләрдән електронлар кечә биләр. Бу кечидләрә ујғун рентген спектринин хәтләри K_α, K_β, K_γ кими ишарә олунур. Белә хәтләр чохлуғу K–серија адланыр (шәкил 41). Бош јер L–тәбәгәдә јараныбса ($2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ өртүкләриндән бириндә), алынан рентген спектр хәтләр чохлуғу L- серија вә и.а. адланыр.

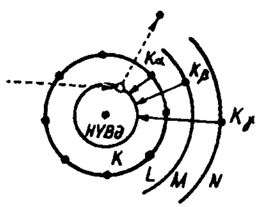
Мүрәккәб атомлар нәзәријјәси әсасында бир оптик електронлу атомларын хассәләрини тәһлил едәндә нүвәнин вә дахили електронларын јаратдығы биркә саһәнин потенсиалы

$$V(r) = \frac{eZ_{еф}}{r} = \frac{e(Z - N(r))}{r} \qquad (90.1)$$

шәклиндә көтүрүлмүшдү. Бурада $N(r)$ – нүвәнин саһәсини екранлашдыран електронларын сајыдыр. Нүвәдән хејли узаг тәбәгәдә һәрәкәт едән електрон үчүн екранлашманын тә'сири бөјүк, јахын тәбәгәдә исә хејли кичикдир.

Рентген спектрләринин јаранмасында нүвәјә јахын дахили тәбәгәләрдәки електронлар иштирак етдијиндән, онлардан биринин биркә саһәдәки һәрәкәтиндә екранлашманы нәзәрә алан параметр, јәгин ки, әсасән n баш квант әдәдинин вә ја да (n,l) квант әдәдләринин (екранлашма l үзрә чырлашманы ортадан чыхардығындан) функсијасы олар. Бу параметри σ_n (вә ја σ_{nl}) кими ишарә етсәк, дахили тәбәгәләрдәки електронлара тә'сир едән биркә саһәнин потенсиалы

$$V(r)=\frac{e(Z-\sigma_n)}{r} \tag{90.2}$$



Шәкил 41. Характерик спектрин јаранма схеми. Гырыг хәтләр електронун K өртүјүндән чыхарылмасыны көстәрир.

кими јазылар. n вә еләчә дә l бөјүдүкчә нүвә саһәсини екранлашдыран електронларын N сајы чохалдығындан σ_n дә бөјүјүр. Биринчи јахынлашмада l-дән асылылығы нәзәрә алмасаг, (90.2) ифадәси васитәсилә атомун рентген термләринин аналитик ифадәсини алмаг үчүн һидрокенин енержи сәвијјәләри үчүн алынмыш ифадәдә (бах §40-да (40.26) формуласы) Z-и $Z-\sigma_n$ илә әвәз етмәк лазымдыр. Доғрудан да, ејни n баш квант әдәдинә малик термләр, мүхтәлиф n-ләрә ујғун термләрә нәзәрән бир-биринә јахын јерләшир. Бу, дахили тәбәгәләрдәки електронларын нүвәјә јахын јерләшмәси нәтичәсидир. Онлар үчүн нүвә саһәси зәиф екранлашмыш олдуғундан, термләрин енержисининн, һидрокендәки кими, јалныз n-дән асылы һесаб етмәк олар.

$$E_n=-\frac{me^4(Z-\sigma_n)^2}{2\hbar^2 n^2}=-\frac{R\hbar(Z-\sigma_n)^2}{n^2}. \tag{90.3}$$

Бурадан рентген спектрләриндә спектр хәтләринин тезлији үчүн

$$\omega_{n'n}=\frac{E_{n'}-E_n}{\hbar}=R\left[\frac{(Z-\sigma_n)^2}{n^2}-\frac{(Z-\sigma_{n'})^2}{n'^2}\right] \tag{90.4}$$

ифадәси алыныр. (90.4)-дән K серијасына дахил олан K_α хәттинин тезлији

$$\omega_{K_\alpha}=R\left[\frac{(Z-\sigma_1)^2}{1^2}-\frac{(Z-\sigma_2)^2}{2^2}\right] \tag{90.5}$$

олур. (90.4) вә (90.5)-дән көрүнүр ки, рентген спектрал хәтләринин тезлији Z-ин квадраты илә монотон артыр.

Бу гануну тәчрүби олараг 1914-чү илдә Мозли тапмышды. Мозли (90.5) ифадәсини

$$\omega_{K_\alpha}=R(Z-\sigma)^2\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{2^2}\right) \tag{90.6}$$

шәклиндә јазмышды. Әлбәттә K вә L тәбәгәләри үчүн σ_1 вә σ_2 фәргләндијиндән ($\sigma_1=1$, $\sigma_2=3{,}5$) Мозлинин ифадәси дәгиг дејил. Рентген спектрләри тәдгиг едиләндә һәр термә ујғун σ_n -нин гијмәти тә'јин едилмәлидир.

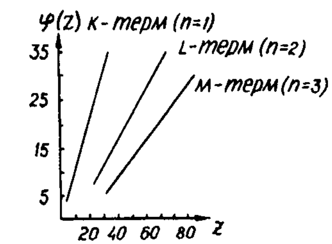
(90.3)-дән термин ифадәси

$$\sqrt{\frac{T_n}{R}}=\sqrt{-\frac{E_n}{R\hbar}}=\frac{Z-\sigma_n}{n} \tag{90.7}$$

олар. Бу асылылыг *Мозли гануну* адланыр вә о, адәтән графики тәдгиг олунур. Мозли

$$\sqrt{\frac{T_n}{R}}=\varphi(Z) \tag{90.8}$$

асылылығыны график гурмушду. Алынан әјриләр Мозли әјриләри адланыр (шәкил 42).



Шәкил 42. Мозли диаграмы.

Диггәтлә апарылан тәдгигатлар рентген спектрал хәтләринин мултипол гурулуша малик олдуғуну көстәрмишдир. Хәтләрин мултипол гурулушуну изаһ етмәк үчүн (90.3) илә верилмиш E_n-ә релјативистик ефектләр һесабына алынан ΔE_{nlj} дүзәлишини әлавә етмәк лазымдыр. Бу һалда Мозли гануну

$$\sqrt{\frac{T_{nlj}}{R}}=\frac{Z-\sigma_n}{n}+\frac{1}{2}\cdot\frac{(Z-\sigma_{nl})^3\alpha^2}{n^3}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right) \tag{90.9}$$

шәклини алыр. Бурадан көрүнүр ки, K терми ($l=0$, $j=\frac{1}{2}$) парчаланмыр. L вә башга термләр исә $j=l\pm\frac{1}{2}$ гијмәтинә ујғун икишәр (дублет) термә парчаланыр.

Беләликлә релјативистик ефектләрин нәзәрә алынмасы j-нын мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун термләрин парчаланмасына кәтирир. Мәсәлән L_I вә L_{II} термләри L_{III} термдән, M_I вә M_{II} термләри M_{III} вә M_{IV}-дән вә и.а. ајрылыр. Белә термләр (енержи сәвијјәләри) *релјативистик* вә ја *регулјар дублетләр* адланыр. j-сы ејни, l-и мүхтәлиф олан термләрин бир-бириндән ајрылмасы исә бахылан електронун дикәр електронларла гаршылыглы тә'сири нәтичәсиндә биркә саһәнин Кулон саһәсиндән фәргләнмәси, башга сөзлә, нүвә саһәсинин екранлашмасы илә бағлыдыр. Бу һалда мәсәлән, L_I- терми L_{II}-дән, M_I-терми M_{II}-дән вә и.а. ајрылыр. Белә икишәр термләр *екранлашмыш* вә ја *иррегулјар дублетләр* адланыр.

Беләликлә, әсасыны Дирак нәзәријјәси тәшкил едән квант механикасы рентген спектрләринин там нәзәри изаһыны верә билир.

§ 91. КИМЈӘВИ ЕЛЕМЕНТЛӘРИН ДӨВРИ (МЕНДЕЛЕЈЕВ) СИСТЕМИ

Менделејевин 1869-чу илдә кәшф етдији кимјәви елементләрин дөври системи нәинки кимјанын, һәтта атом вә нүвә физикасынын да әсасыны тәшкил едир. Сонралар мүәјјән олунду ки, атомун нүвәси онун електрон өртүјүнүн гурулушуну вә беләликлә дә елементләрин физики вә кимјәви хассәләрини тә'јин едир. Нүвәнин өзүнүн гурулушуна кәлдикдә исә мүәјјән олунду ки, нүвә, күтләси M_p=938,3 *MeB* олан мүсбәт јүклү протонлардан вә күтләси M_n=939,5 *MeB* олан јүксүз нејтронлардан тәшкил олунмушдур. Мүасир тәсәввүрләрә көрә протон, нејтрон вә еләчә дә бүтүн адронлар кварк адланан фермионлардан тәшкил олунуб. Адронларын тәркибиндә кваркдары тутуб сахлајан чазибә гүввәләри (бунлар нүвә гүввәләри дә адланыр) исә глүон адланан нүвә саһәсинин квантлары илә дашыныр. Атом нүвәсинә олан бу бахыш онун тәчрүбәдә мүшаһидә олунан характеристикаларынын – күтләсинин вә јүкүнүн нәзәри тәдгигинә имкан верир.

Беләликлә елементләрин хассәләринин дөврилијинин тәбиәтини изаһ етмәк үчүн нүвәнин мә'лум јүкү вә күтләси әсасында електронларын атомдакы һәрәкәтини өјрәнмәклә кифајәтләнирләр. Мүрәккәб атомларын тәркибиндә електронларын сајы чох олдуғундан бахылан мәсәлә ријази олараг фөвгәл'адә чәтин бир мәсәләдир. Беләки, һәтта ријази физикада үч чисим мәсәләси индијә кими там һәллини тапмамышдыр.

Лакин 86 вә 92 §-ларда мүрәккәб атомларын далға функсијаларыны вә енержиләрини һесабламаг үчүн Хартри–Фок вә Томас–Ферми тәрәфиндән тәклиф олунмуш методлар шәрһ олунмушдур. Онларда иддиа олунур ки, мүрәккәб атомда һәр бир електронун һәрәкәтинә, Паули принсипи өдәнилмәклә, нүвәнин вә галан електронларын өзүнә узлашан саһәсиндә сәрбәст (дикәрләринин һәрәкәтиндән асылы олмајан) һәрәкәти кими бахмаг олар.

Бу иддиа атомда електронларын јерләшмә гајдасыны вә онунла бирликдә елементләрин кимјәви хассәләринин дөврилијини баша дүшмәјә имкан верир.

Менделејев, дөври чәдвәлдә елементләри әсасән атом чәкисинин артмасына көрә дүзсә дә, елементин чәдвәлдәки Z сыра нөмрәсинә вә елементләрин кимјәви хассәләринин дөврилијинә хүсуси әһәмијјәт вермишди. О, һәр бир елементи чәдвәлдә јерини тә'јин едән нөмрә (сыра нөмрәси) илә тә'мин етмиш вә она мә'лум олан елементләри кимјәви хассәләринә көрә груплара бөлмүшдү.

Сонралар ајдынлашды ки, елементин Z сыра нөмрәси дәрин физики мә'наја маликдир. Елементар јүк ваһидиндә вә атом нејтрал олдуғундан ондакы електронларын сајы Z-ә бәрабәрдир. Јухарыда гејд едилди ки, атомун нүвәси мүсбәт јүклү протонлардан вә јүксүз нејтронлардан тәшкил олунмушдур. Демәли, нүвәнин тәркибиндә протонларын сајы Z-ә, нејтронларын сајы N исә A атом чәкиси илә Z-ин фәргинә бәрабәрдир: $N=A-Z$.

Сонракы тәдгигатлар көстәрди ки, Z-и ејни олуб, A атом чәкиси илә фәргләнән елементләр дә мөвчуддур. Јәгин ки, белә елментләрин һамысы дөври чәдвәлин бир ханасында јерләшир. Онлар *изотоплар* адланыр. Елементин кимјәви хассәләри онун атомунун харичи тәбәгәсиндәки електронларын сајы илә тә'јин олундуғундан, илк бахышда иддиа етмәк олар ки, бүтүн изотоп елементләр ејни бир кимјәви хассәләрә малик олмалыдыр. Лакин бу иддиа тәхмини характер дашыјыр, чүнки изотоплар, мәсәлән кинетик реаксијаларда өзләрини мүхтәлиф чүр апарыр, чүнки бу реаксијаларда јалныз електронларын сајы јох, атомун күтләси дә мүһүм рол ојнајыр. Физики хассәләринә көрә исә изотоплар бирбириндән хејли фәргләнә биләр. Мәсәлән, уранын U^{235} изотопу јаваш нејтронларла зәнчивары реаксија јарадырса, U^{238} изотопу јалныз сүр'әтли електронларла һәмин реаксијаны јарадыр вә и.а.

Нүвәдә протон вә нејтронларын сајынын тәхминән бәрабәр олмасы нәтичәсиндә елементләрин дөври чәдвәлдә атом чәкисинин артмасына көрә дүзүлүшү, нүвәнин јүкүнүн (Z-ин) артмасына көрә дүзүлүшлә, демәк олар ки, ејни олур.

Z сыра нөмрәсинин артмасы илә елементләрин кимјәви хассәләринин дөврилијини вә ардычыл дәјишмә принсипини ајдын баша дүшмәк үчүн електронларын атомун тәбәгә вә өртүкләриндә (енержи сәвијјәләриндә) јерләшмә гајдасы илә таныш олаг.

Бунун үчүн фәрз едәк ки, һәр бир елемент ондан әввәлки елементин нүвәсинә бир протонун, електрон өртүјүнә исә бир електронун әлавә едилмәси илә јараныр. Квант механикасынын принсипләринә көрә атомун дөрд n, l, m, m_s квант әдәдләри илә тә'јин олунан сәвијјәсиндә јалныз бир електрон ола биләр (Паули принсипи) вә електрон һәмишә ән ашағы енержи сәвијјәсини тутмаға чалышыр. n баш квант әдәди бөјүдүкчә мәркәзи саһәдә һәрәкәт едән електронун енержиси бөјүдүјүндән (бах §40) електронлар ардычыл олараг атомун әввәлчә n=1-ә ујғун K тәбәгәсини, сонра n=2-јә ујғун L тәбәгәсини, даһа сонра n=3-ә ујғун M тәбәгәсини вә и.а. тутмаға башлајыр.

Атомда електрон тәбәгәләринин белә ардычыл долмасы о заман там доғру оларды ки, $+eZ$ јүклү нүвә вә Z–1 сајда електронлар тәрәфиндән атомун һәр бир електронуна тә'сир едән саһә нөгтәви јүкүн јаратдығы саһә илә ејни олсун. Бу һалда атомун һәр бир енержи сәвијјәси l тәртибдән чырлашмыш оларды (һидрокен атомунда олдуғу кими).

Лакин §88-дә мүрәккәб атомларын тәдгиги көстәрди ки, електронлар арасындакы гаршылыглы тә'сирин вә атомун јүкүнүн онун һәчми үзрә јајылмасынын нәзәрә алынмасы енержи сәвијјәләринин l үзрә чырлашмасыны ортадан көтүрүр вә бахылан тәбәгәдә електрон өртүкләринин l-ин артмасы истигамәтиндә дүзүлүшүнә кәтирир. Һәр бир тәбәгәдә ардычыл олараг әввәлчә s, сонра p, даһа сонра d вә и.а. өртүкләр долур.

Ашағыда көрәчәјимиз кими, електронлararасы гаршылыглы тә'сирин вә јүкүн атомун һәчминдә јајылма еффекти дөрдүнчү вә ондан сонра кәлән дөврләрдә өзүнү көстәрир. Биринчи, икинчи вә үчүнчү дөврләрдә исә атомларын енержи сәвијјәләринин електронларла тутулмасы һидрокен атомундакы енержи сәвијјәләринин дүзүлүшүнә ујғун олур.

Нејтрону дөври системин сыфырынчы дөври тәшкил едән сыфырынчы елементи ($Z=0$) һесаб етмәк олар. Нүвәси мүсбәт јүклү бир протондан ибарәт олан һидрокен исә биринчи дөврин биринчи елементидир ($Z=1$). Онун бир електрону нормал һалда K тәбәгәсиндәки јеканә s өртүјүнү тәшкил едән ики ($n=1,\ l=0,\ m=0,\ m_s=\pm\frac{h}{2}$) һалын бириндә јерләшәр. Һидрокенин електрон конфигурасијасы $1s^1$-дир.

Һидрокенин нүвәсини бир $+e$ гәдәр артырыб, електрон тәбәгәсинә дә бир електрон әлавә етсәк, һелиум (He) атомуну аларыг. Икинчи електронун спини әввәлки електронун спининә паралел дејилсә, о, K тәбәгәсиндәки s өртүјүндә бош олан сәвијјәни тутар. Беләликлә, K өртүјү там долмуш олар. Бунунла да дөври системин јалныз ики – һидрокен (H, $Z=1$) вә һелиумдан (He, $Z=2$) ибарәт биринчи дөври гуртармыш олур. Һелиумун електрон конфигурасијасы $1s^2$-дир.

Һелиум атому нүвәсинин јүкүнү бир ваһид ($+e$) артырыб, електрон тәбәгәсинә бир електрон әлавә етсәк, литиум (Li, $Z=3$) атомуну аларыг. K тәбәгәси артыг долмуш олдуғундан литиумун үчүнчү електрону, јәгин ки, K-дан сонра кәлән L тәбәгәсинин биринчи s өртүјүндә ($n=2,\ l=0,\ m=0,\ m_s=\pm\frac{h}{2}$) јерләшәр. Беләликлә, литиум илә дөври системин икинчи дөври башланыр. Јухарыда гејд едилмишди ки, L тәбәгәси $2s$ вә $2p$ өртүкләриндән ибарәтдир. s өртүјүндә 2, p өртүјүндә исә 6 електрон јерләшә билдијиндән L тәбәгәсиндә електронларын максимум сајы 8 олар. Демәли, һәр әввәлки елементин нүвәсинә бир протон вә атома бир електрон әлавә етмәклә, ардычыл олараг, бериллиум (Be, $Z=4$), бор (B, $Z=5$), карбон (C, $Z=6$), азот (N, $Z=7$), оксикен (O, $Z=8$), фтор (F, $Z=9$) вә нәһајәт онунчу елемент неонда (Ne, $Z=10$) L– тәбәгәси там долмуш олар. Неонун електрон конфигурасијасы $1s^2 2s^2 2p^6$-дыр. Беләликлә, дөври системин икинчи дөври 8 елементдән ибарәт олур.

Дөври системин үчүнчү дөври натриумдан (Na, $Z=11$) башланыр. Онун он биринчи електрону K вә L тәбәгәләри долдуғундан, јәгин ки, M ($n=3$) тәбәгәсинин $3s$ өртүјүндә јерләшәр. Магнезиум (Mg, $Z=12$) елементиндә $3s$ өртүјү долур. Алүминиум (Al, $Z=13$) елементиндә $3p$-

өртүјү долмаға башлајыр. Сонра силисиум (Si, $Z=14$), фосфор (P, $Z=15$), күкүрд (S, $Z=16$), хлор (Cl, $Z=17$) вә нәһајәт аргонда (Ar, $Z=18$) $3p$ өртүјү там долур. Аргонун електрон конфигурасијасы $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ олур. Беләликлә, үчүнчү дөвр баша чатыр. Көрдүјүмүз кими бу дөвр дә 8 елементдән ибарәт олур.

Аргонун нүвәсинин јүкүнү бир ваһид артырыб, онун електрон тәбәгәсинә бир електрон әлавә етсәк, калиум (K, $Z=19$) елементини аларыг. M тәбәгәсиндә $3s$ вә $3p$ өртүкләри долдуғундан, әввәлдәки кими өртүкләрин ардычыл долмасыны тәләб етсәк, онун 19-чу електрону M тәбәгәсиндә бош олан $3d$ өртүјүндә јерләшмәли иди. Лакин калиум елементи өзүнүн оптик вә кимјәви хассәләринә көрә харичи s өртүјүндә бир оптик (валент) електрон олан Li, Na елементләринә чох охшајыр. Она көрә дә онун сонунчу електронуну s- өртүјүндә јерләшдирмәк лазым кәлир. Бу өртүк, јәгин ки, $n=4$ вә $l=0$ -а ујғун N тәбәгәсинин $4s$ өртүјү олар. Бу јалныз онунла изаһ олуна билләр ки, $4s$ сәвијјәси $3d$ сәвијјәсиндән (термдән) ашағыда јерләшсин.

Доғрудан да, електронларын гаршылыглы тә'сири вә јүкүн һәчмдә јајылмасы нәтичәсиндә n баш квант әдәдинә олан δ_l әлавәси дикәр терм-ләрә нәзәрән s-терми үчүн даһа бөјүк гијмәтә малик олур. Мәсәлән, $4s$ терми үчүн $\delta_l=2{,}23$, $3d$ терми үчүн исә $\delta_l=0{,}146$-дыр. Термин

$$\frac{E_{nl}}{\hbar}=-\frac{R}{(n-\delta_l)^2}$$

кими тә'јин олундуғуну нәзәрә алсаг,

$$E_{4s}=-\frac{R\hbar}{(4-2{,}23)^2} \text{ вә } E_{3d}=-\frac{R\hbar}{(3-0{,}146)^2}$$

олур. E_{4s} илә E_{3d}-нин мүгајисәсиндән $E_{4s}<E_{3d}$ алыныр.

Беләликлә калиум (K, $Z=19$) елементи илә дөрдүнчү дөвр башланыр. Ијирминчи елемент калсиумун (Ca, $Z=20$) сонунчу електрону да $4s$ өртүјүндә јерләшир. Өртүкләрин ардычыл долма принсипинә көрә скандиумун (Sc, $Z=21$) ијирми биринчи електрону $4p$ өртүјүндә јерләшмәли иди. Лакин $E_{3d}<E_{4p}$ олдуғундан о, $3d$ өртүјүнә кечир. Билдијимиз кими $d(l=2)$ өртүјүндә јерләшә биләчәк електронларын максимум сајы 10-а бәрабәрдир. $3d$ өртүјүнүн долма просесиндә хромда (Cr, $Z=24$) ардычыллыг нисбәтән позулур. Онун $4s$ өртүјүндә ики әвәзинә бир, $3d$ өртүјүндә исә дөрд әвәзинә беш електрон олур. Сонра јенә $3d$ өртүјү долмаға башлајыр. Хромдакы аномалија мисдә (Cu $Z=29$) дә тәкрар олунур. Онун $4s$ өртүјүндә бир, $3d$ өртүјү исә там долмуш олур. Сингин (Zn, $Z=30$) сонунчу електрону $4s$ -и долдурур. Галлиумдан (Ga, $Z=31$) башлајараг $4p$–өртүјү долмаға башлајыр вә о, криптонда (Kr, $Z=36$) там долмагла

дөрдүнчү дөври тамамлајыр. Криптонун електрон конфигурасијасы $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$ шәклиндәдир. Беләликлә дөрдүнчү дөвр калиумда башлајыб, криптонда гуртарыр. Бу дөврә он сәккиз елемент дахилдир.

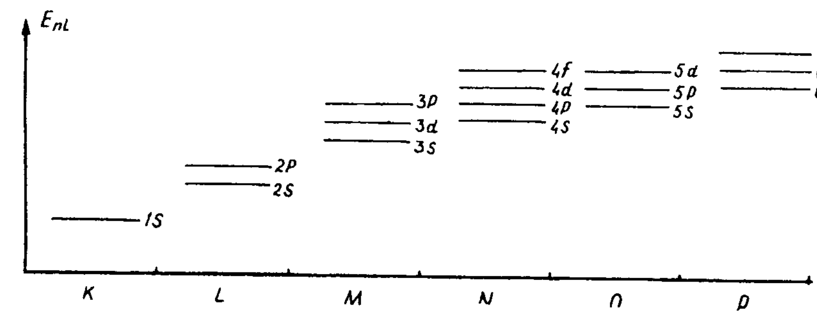
Дөври системин бешинчи дөври рубидиумла (Rb, Z=37) башланыр. О, оптик вә кимјәви хассәләринә көрә натриум вә калиум елементләрини хатырладыр. N-тәбәгәнин $4d$ вә $4f$ өртүкләринин бош олмасына бахмајараг, онун 37-чи електрону О тәбәгәсинин $5s$ өртүјүндә јерләшир. Бу о демәкдир ки, $5s$-терми $4d$ вә $4f$ термләриндән ашағыда јерләшир. Ондан сонра кәлән стронсиум (Sr, Z=38) елементинин сонунчу електрону да $5s$ -ә дахил олур, чүнки стронсиум өз хассәләринә көрә калсиума охшајыр. Ондан сонра кәлән итриум (Y, Z=39) елементиндән N тәбәгәсинин $4d$ өртүјү, индиум (In, Z=49) елементиндән исә О тәбәгәсинин $5p$ өртүјү долмаға башлајыр вә ксенонда (Xe, Z=54) о там долур. Ксенонун електрон конфигурасијасыны јазмаг үчүн криптонун електрон конфигурасијасына $4d^{10}5s^2 5p^6$ әлавә етмәк лазымдыр. Бу дөвр рубидиумда башлајыб ксенонда гуртарыр. Дөврә он сәккиз елемент дахилдир. Електрон өртүкләринин долма гајдасына көрә дөрдүнчү дөври тәкрар едир.

Алтынчы дөвр сезиум (Cs, Z=55) елементиндән башлајыр. Онун сонунчу електрону P тәбәгәсинин $6s$ өртүјүндә јерләшир. Бариумда (Ba, Z=56) $6s$ – өртүјү долур. Сонра кәлән елементләрдә гисмән $5d$, сериумдан (Ce, Z=58) башлајараг исә дахили $4f$ өртүјү долмаға башлајыр вә о, лутенсиумда (Ln, Z=71) там долур. Сериумда башлајыб лутенсиумда гуртаран бу он дөрд елементин оптик вә кимјәви хассәләри бир-биринә чох јахындыр (онларын харичи електрон өртүкләри демәк олар ки, ејни гурулуша маликдир). Бу елементләр гәләви торпаг металларын хассәләрини тәкрар етдијиндән, онларын һамысы дөври чәдвәлдә бир ханада – лантанидиум елементинин ханасында јерләшдирилир вә "*лантаноидләр*" адланыр.

Лантаноидләр групунун тәһлили илә әлагәдар демәк лазымдыр ки, узун мүддәт һафниум (Hf, Z=72) елементини дә бу група дахил едирдиләр. Лакин Бор нәзәри олараг көстәрди ки, һафниум бу група дахил олмамалыдыр, чүнки $4f$ өртүјүндә јерләшә биләчәк електронларын максимум сајы 14-дән артыг ола билмәз. Бөјүк сә'јлә апарылан тәчрүби анализ көстәрди ки, һафниумун оптик вә кимјәви хассәләри сиркониумун (Zr, Z=40) хассәләрини хатырладыр.

Һафниумдан башлајараг әввәлчә $5d$, сонра исә $6p$ өртүјү долмаға башлајыр вә о, радонда (Rn, Z=86) там долур. Бунунла алтынчы дөвр гуртарыр. Бу дөврә 32 елемент дахилдир. Радонун електрон конфигурасијасыны алмаг үчүн ксенонун електрон конфигурасијасына $4f^{14}5d^{10}6s^2 6p^6$ әлавә етмәк лазымдыр.

Атом термләринин дүзүлмә ардычыллығы шәкил 43-дә көстәрилмишдир.



Шәкил 43. Атом термләринин дүзүлүш схеми.

Нәһајәт франсиумдан (Fr, Z=87) башлајараг једдинчи дөвр башланыр. О, демәк олар ки, өртүкләрин долма принсипинә көрә алтынчы дөври тәкрар едир. Бу дөврдә дә 32 елемент олмалы иди. Бу дөврдә, алтынчы дөврдә олдуғу кими, әввәлчә $7s$, сонра исә ардычыл олараг $5d$, $5f$ вә $7p$ өртүкләри долмалы иди. Лакин бу дөврә дахил олачаг елементләрдән јалныз 20-јә јахын елемент мә'лумдур. Радиумда (Ra, Z=89) $7s^2$ өртүјү долур. Актиниумун сон електрону $6p^1$-дә јерләшир. Ториум (Th, Z=90)-дан башлајараг лауренсиум (Lr, Z=103) дахил олмагла он дөрд елемент, алтынчы дөврә охшар олараг, икинчи дахили $5f$ өртүјүнү долдурур. Онларын оптик вә кимјәви хассәләри, лантаноидләрдә олдуғу кими, бир-биринә чох јахындыр. Бу он дөрд елемент дөври чәдвәлдә актиниумун ханасында јерләшдирилир вә "*актиноидләр*" адланыр. Онлар јәгин ки, лантаноидләрин хассәләрини тәкрар едир.

Ахыр илләрдә урандан сонра кәлән елементләрин кәшфи дөври чәдвәли кенишләндирмишдир. Бу күн тәхминән 108-ә гәдәр елемент мә'лумдур. Онлардан нептиниум (Np, Z=93) вә плотиниумун (Pu, Z=94) нүвә енержиси сәнајесиндә бөјүк әһәмијјәтә маликдир (бах, форзас Менделејев чәдвәли).

Јухарыда дедикләримиздән көрүнүр ки, елементләрин кимјәви хассәләриндә Менделејевин кәшф етдији дөврлик, квант механикасы бахымындан, атомларын харичи електрон өртүкләринин гурулушунун тәкрары илә әлагәдардыр. Дөвр башланан елементин харичи ns^1 өртүјүндә бир, дөвр тамамланан елементин харичи ns^2np^6 өртүкләриндә исә сәккиз електрон олур вә онлар елементин нәинки кимјәви, физики хассәләрини дә тә'јин едир.

Харичи тәбәгәдәки електронларын сајына көрә бүтүн елементләр *сәккиз група* бөлүнүр.

Һидрокенлә биркә литиум, натриум, калиум вә б. гәләви металлар дахил олан биринчи групдакы елементләрин һамысынын харичи тәбәгәсинин s өртүјүндә бир електрон (ns^1) вар. Онларын һамысы кимјәви реаксијаларда бир валентли елемент кими иштирак едир вә шүаланма (шүаудма) спектриндә спектр хәтләри дублет гурулуша малик олур.

Икинчи група дахил олан гәләви торпаг металларын Be, Mg, Ca вә б. харичи тәбәгәсинин s өртүјүндә ики електрон (ns^2) олур. Онлар кимјәви реаксијаларда ики валентлидир вә спектр хәтләри ја синглет вә ја да триплет гурулуша маликдир. Харичи өртүкдә ики електрону олан һелиум, електрон конфигурасијасына көрә гәләви торпаг металлары хатырладыр. Гәләви торпаг металларда олдуғу кими, ики електронлу системин там спин моментинин сыфыр вә ја ваһид олмасына ујғун олараг, һелиумун да енержи сәвијјәләри (спектр хәтләринин гурулушу) ја синглет вә ја да триплет гурулуша маликдир (бах §83–85). Лакин, һелиум өзүнүн кимјәви хассәләринә көрә тә'сирсиз газдыр. Бу онунла изаһ олунур ки, һелиум үчүн биринчи K тәбәгә електронларла долмуш олур, икинчи L тәбәгә исә K-дан хејли узагда јерләшир вә о, ади шәраитдә кимјәви реаксијалара кирә билмир.

Үчүнчү групу тәшкил едән бор, алүминиум, скандиум вә б. елементләрин харичи тәбәгәсиндә үч (ns^2np^1) електрон олур.

Онларын максимум валенти үч, спектр хәтләри квартет (дөрд) гурулушлудур. Лакин гејд едәк ки, скандиумдан ($3d^14s^2$) башлајыб никелдә ($3d^84s^2$) $3d$ дахили өртүјү долан дөрдүнчү дөвр елементләринин харичи өртүкләринин електрон конфигурасијасы $3d^k4s^2$ шәклиндәдир ($k=1\div8$). Бу өртүкләрдәки електронларын сајы елементләрин һеч дә валентлијини тә'јин етмир, белә ки, валентлик үмумијјәтлә компенсә олунмамыш спинләрин сајы илә тә'јин едилир. Бу сај исә сәккиздән (тә'сирсиз газлар) артыг ола билмәз. Дикәр тәрәфдән бу дөврә дахил олан дәмир ($Z=26$), кобалт ($Z=27$) вә никел ($Z=28$) елементләри кимјәви вә физики хассәләри илә бир-биринә охшајыр. Мәсәлән, дахили $3d$-дә компенсә олунмамыш спинләр һесабына онлар кифајәт гәдәр күчлү ферромагнит хассәләрә маликдир. Бу онунла әлагәдардыр ки, кристал гәфәс јарананда $3d$ сәвијјәси, спинләр компенсә едилмәмиш дикәр сәвијјәләрә нәзәрән хејли әлверишли олур.

Беләликлә, бүтүн груплар һаггында данышмаг олар. Мараглананлар әдәбијјата мүрачиәт едә биләрләр. Биз исә ахырынчы ики (једди вә сәккиз) груп һаггында бә'зи гејдләрлә кифајәтләнәчәјик.

Флор, хлор, бром вә б. һаллокенләр (једдинчи) групуна дахил олан елементләрин харичи тәбәгәсиндә, онларын, тә'сирсиз газларын харичи тәбәгәсинин гурулушуну тамамламаг үчүн бир електрон чатмыр. Бу елементләр кимјәви реаксијаларда максимум једди мүсбәт валентли олмагла јанашы, ион бирләшмәләриндә онларла реаксијаја кирән елементин атомундан бир електрону өзүнә бирләшдирмәклә бир мәнфи валентли дә ола биләр.

Нәһајәт (ns^2np^6) харичи електрон өртүјү долмуш неон, аргон, криптон вә и. а. тә'сирсиз газларын харичи тәбәгәсиндә сәккиз електрон олдуғуну әсас тутараг, онлар сәккизинчи група дахил едилир. Тәбәгәләрарасы мәсафә (енержи ваһидләриндә) өртүкләрарасы мәсафәјә нәзәрән бөјүк олдуғундан, бу елементләр ади шәраитдә кимјәви реаксијалара кирмир, белә ки, кимјәви реаксијанын јаратдығы һәјәчанланма енержиси

тәбәгәләрин енержиләри арасындакы фәргдән хејли кичик олур. Бу сәбәбдән онлар тә'сирсиз газлар адланыр.

§ 92. СТАТИСТИК ТОМАС–ФЕРМИ МЕТОДУ

Хартри–Фок методу илә атомун гурулушунун өјрәнилмәси кифајәт гәдәр дәгиг нәтичәләрә кәтирирсә дә, апарылан әдәди һесабламаларын һәчми ағыр атомлара кечдикчә артдығындан, хејли чәтинликләрә кәтирир. Доғрудан да, һелиум мисалында көрдүјүмүз кими, Хартри–Фок тәнликләр системиндә тәнликләрин сајы атомдакы електронларын сајына бәрабәрдир вә ағыр атомлар үчүн белә системин һәтта әдәди һесабланмасы мәсәләси чәтин бир проблемә чеврилир.

Квант механикасынын мүддәалары әсасында инкишаф етдирилән тәхмини методларла јанашы, статистик физика ганунлары әсасында инкишаф етдирилмиш тәхмини методлар да јарадылмышдыр.

Билдијимиз кими статистик методлар ејни тәбиәтли һадисәләр чохлуғунун үмуми ганунаујғунлугларын өјрәнилмәси үчүн тәтбиг олунур. Томас–Ферми методу чохелектронлу атомлара тәтбиг едилдикдә нисбәтән дәгиг нәтичәләрә кәтирир. Әлбәттә Хартри–Фок методунда Томас–Ферми методуна нисбәтән даһа дәгиг нәтичәләр алыныр, беләки, статистик метод илә атомда ајрыча көтүрүлмүш електронун фәрди хассәләрини тәфсилатла тәсвир етмәк мүмкүн дејилдир. Буна бахмајараг бахылан метод атомун үмуми хассәләрини – радиусунун тәртибини гијмәтләндирмәјә, ионлашма енержисини, полјарлашманы вә електрон өртүјүнүн долмасындакы әсас хүсусијјәтләри изаһ етмәјә имкан верир.

Томас–Ферми методунун әсас мүддәасы – атомда електрон јүкүнүн нүвәјә нәзәрән өлчүлән r мәсафәсиндән асылы $\rho(r)$ сыхлығы илә кәсилмәдән пајланмасыдыр.

Јәгин ки, белә фәрзијјә ағыр атомлар үчүн даһа доғру олар. Онларда електронларын әксәријјәти n баш квант әдәдинин бөјүк гијмәтләринә ујғун сәвијјәләри тутур вә n бөјүдүкчә енержи сәвијјәләри даһа сых јерләшир. Бу чүр јерләшмиш електронларын јүкүнүн фәзада тәхминән бәрабәр пајландығыны гәбул етмәк олар. Адәтән квант механикасында белә һалларда квазиклассик јахынлашма тәтбиг олунур вә бу јахынлашмада електронун импулсуна координатларын функсијасы кими бахмаг олур.

Әввәлчә мәсәләјә електростатика бахымындан јанашаг. Електронларын фәзада пајланмасыны, классик електродинамикада олдуғу кими, онларын јүкүнүн $\rho(r)$ сыхлығы илә пајландығыны гәбул едәк. Фәзада кәсилмәдән пајланмыш јүкүн јаратдығы саһәнин $\varphi(r)$ потенсиалы координатларын кәсилмәз функсијасы олдуғундан о,

$$\nabla^2\varphi(r) = -4\pi\rho(r) \tag{92.1}$$

Пуассон тәнлији илә тә'јин олунур, бурада $\rho(r)=en(r)$, $n(r)$ –ваһид һәчмдәки електронларын сајыдыр.

Квант статистикасы бахымындан атомун һәр һансы елементар һәчминдә олан електронун $\vec{p}$ импулсу илә онун там енержиси E

$$E=\frac{p^2}{2m}-e\varphi(r) \qquad (92.2)$$

бәрабәрлији илә әлагәдардыр.

Јәгин ки, атомда һәр бир електронун там енержиси мәнфи олмалыдыр, әкс һалда о, атомдан кәнара чыхар вә сонсузлуға кедә биләр. Фәзанын һәр һансы бир нөгтәсиндә електронун максимум там енержисини $e\Phi_0$ илә ишарә едәк. Φ_0 – мүсбәт сабит кәмијјәтдир. Φ_0 сабит кәмијјәт гәбул едилмәсә, електрон Φ_0-ын кичик гијмәтинә уjғун нөгтәләрдән бөјүк гијмәтә малик нөгтәләрә кечәр.

Беләликлә, нүвәдән r мәсафәсиндә олан електронун импулсунун максимум гијмәти

$$\frac{1}{2m}p^2_{\max}=e(\Phi(r)-\Phi_0). \qquad (92.3)$$

Квант статистикасына көрә фаза фәзасынын елементар һәчми $d\Omega=dxdydzdp_xdp_ydp_z=dVp^2dp\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ кими тә'јин олунур. Бурадан $p_{\max}$-а уjғун фаза фәзасынын үмуми һәчми $\frac{4\pi}{3}p^3_{\max}(r)V$ олар. Квант гәфәсинин һәчми исә $(2\pi\hbar)^3$-а бәрабәрдир. Паули принсипинә көрә һәр гәфәсдә јалныз ики електрон јерләшә билдијиндән $\frac{4\pi}{3}p^3_{\max}(r)V$ һәчминдә олан електронларын сајы

$$N(r)=2\frac{4\pi}{3}\frac{p^3_{\max}V}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Бурадан ваһид фәза һәчминдәки електронларын сајы үчүн

$$n(r)=\frac{N(r)}{V}=2\frac{4\pi}{3}\frac{p^3_{\max}}{(2\pi\hbar)^3} \qquad (92.4)$$

алынар. (92.3)- дән $p_{\max}$ тә'јин едиб, (92.4)- дә јазсаг,

$$\rho(r)=en(r)=\frac{e}{3\pi^2\hbar^3}\left\{2me\left[\Phi(r)-\Phi_0\right]\right\}^{3/2} \qquad (92.5)$$

олар.

(92.1) тәнлији мүәјјән сәрһәд шәртләри чәрчивәсиндә һәлл олунмалыдыр. (92.5)-дән көрүнүр ки, $\Phi(r)=\Phi_0$-да јүкүн $\rho(r)$ сыхлығы сыфра

бәрабәрдир. (92.3)-дә исә $\Phi(r)$-ин $\Phi(r)<\Phi_0$ олан бүтүн гијмәтләриндә електронун импулсунун гијмәтинин квадраты мәнфидир. Беләликлә, $\Phi(r)=\Phi_0$ бәрабәрлији атомун сәрһәддини, јә'ни онун радиусуну тә'јин етмиш олур. Атомун радиусуну R илә ишарә етсәк,

$$\Phi_0=\Phi(R).$$

Там јүкү сыфра бәрабәр олан атомда јүк сферик симметрик пајланмыш оларса, атомдан кәнарда саһә сыфра бәрабәр олур, чүнки нүвәнин саһәси електронларын саһәси тәрәфиндән там екранлашдырылыр. Беләликлә, нејтрал атомун сәрһәддиндә $\Phi(R)=0$ олдуғундан

$$\Phi_0=\Phi(R)=0 \qquad (92.6)$$

Атомун стасионар һалында саһәнин сферик-симметрик пајланмыш олдуғуну гәбул етдикдә, јүкү eZ олан нүвәнин кифајәт гәдәр јахынлығында

$$\Phi(r)=\frac{Ze}{r}, \quad r\to 0 \qquad (92.7)$$

нүвәдән хејли узагда исә

$$\Phi(r)=0, \quad r\to\infty \qquad (92.7')$$

олур.

Атомда електронларын N сајы нүвәнин Z јүкүнә бәрабәр олмадыгда, $Z-N$ тәртибли ионун сәрһәддиндә һеч бир сонсузлуға тәсадүф олунмамалыдыр, јә'ни саһәнин јалныз потенсиалы јох, онун интенсивлији дә кәсилмәдән дәјишмәлидир.

Беләликлә, ион үчүн сәрһәд шәртләри

$$\Phi'-\Phi(R)=\frac{Ze}{r},$$

$$\Phi(R)=\frac{e(Z-N)}{R};\quad \left(\frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)_{r=R}=-\frac{e(Z-N)}{R^2} \qquad (92.8)$$

олур.

(92.1) вә (92.5) тәнликләри, принсипчә, һәр ики $\Phi(r)$ вә $\rho(r)$ функсијаларыны тә'јин етмәјә имкан верир. (92.5)-дән $\rho(r)$-ин ифадәсини (92.1)-дә јазыб, саһәнин сферик симметриклијини нәзәрә алсаг, $\Phi(r)$ үчүн

$$\nabla^2\Phi(r)=\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Phi}{dr}\right)=\frac{4e}{3\pi\hbar^3}\left\{2me\left[\Phi(r)-\Phi(R)\right]\right\}^{3/2} \qquad (92.9)$$

тәнлији алынар.

(92.9) тәнлијини һәлл етмәк үчүн өлчүсүз (адсыз) кәмијјәтләрә кечәк. Бунун үчүн

$$\Phi(r)-\Phi(R)=\frac{Ze}{r}\varphi(r);\qquad r=bxZ^{-\frac{1}{3}} \tag{92.10}$$

әвәзләрини гәбул едәк, бурада

$$b=\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3}a\approx 0{,}885a\,.$$

$a=\dfrac{\hbar^2}{me^2}$ –Бор орбитинин радиусудур. Онда (92.1) тәнлији

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}=\frac{1}{\sqrt{x}}\varphi^{3/2}(x) \tag{92.11}$$

шәклини алыр. (92.11) тәнлијинә һеч бир параметр дахил олмур вә о, билаваситә $\varphi(x)$ функсијасыны тә'јин едир.

Ики һалы тәһлил едәк. Әввәлчә нејтрал атома ($Z=N$) бахаг.

а) Нејтрал атом үчүн (92.7) вә (92.8) сәрһәд шәртләри

$$\begin{aligned}&\varphi(0)=1, && r\to 0\\ &\varphi=0, && r\to\infty\end{aligned} \tag{92.12}$$

шәклини алыр. (92.11) тәнлијинин

$$\varphi(x)=\frac{144}{x^3} \tag{92.13}$$

вә ја

$$\Phi(r)-\Phi(R)=\frac{81\pi^2\hbar^6}{8m^3e^5}\cdot\frac{1}{r^4} \tag{92.13'}$$

кими бир дәгиг һәлли вардыр. Бу һәлл (92.12) сәрһәд шәртләриндән икинчисини өдәјир, јә'ни $x\to\infty$-да сыфра бәрабәр олур, биринчи шәрти исә өдәмир, $x\to 0$ -да һәлл дағылыр вә өз физики маһијјәтини итирир.

(92.11) тәнлијини (92.12) шәртләрини өдәмәк шәрти илә әдәди һесабладыгда алынан һәлл $x\to\infty$-да асимптотик сыфра јахынлашыр. Бу заман (92.5) вә (92.11) тәнликләриндә јүкүн сыхлығы $\rho(r)$ вә саһәнин потенсиалы $\Phi(r)$ сыфра бәрабәр олмур, јә'ни атомун сәрһәдләри сонсузлуға гәдәр јајылыр. Бу чүр һәлл илә атомун радиусу үчүн сонлу гијмәт тапмаг мүмкүн олмур.

$\varphi(x)$ функсијасы мә'лум олдугда атомда електронларын $n(r)$ сыхлығыны тапмаг олар. Нејтрал атом үчүн (92.6)-дан $\Phi(R)=0$ олдуғундан (92.10) әвәзи

$$\Phi(r)=\frac{Ze}{r}\varphi\left(\frac{r}{b}Z^{1/3}\right) \tag{92.14}$$

шәклини алар. $\Phi(r)$-ин бу гијмәтини (92.5) -дә јаздыгда

$$n(r)=\frac{Z^2}{3\pi^2\hbar^3}\left(\frac{2me^2}{b}\right)^{3/2}f\left(\frac{r}{b}Z^{1/3}\right) \tag{92.15}$$

олур. Бурада

$$f(x)=\left[\frac{1}{x}\varphi(x)\right]^{3/2}.$$

(92.15) -дән көрүнүр ки, електрон јүкүнүн ағыр атомларда пајланма характери һамысы үчүн ејнидир. x-ин $x\geq 1$ гијмәтләриндә електронларын сыхлыхы кәскин азалыр. Она көрә дә x-ин $x=\dfrac{r}{b}Z^{1/3}$ гијмәтини вә јахуд $r=R=xbZ^{-1/3}$ мәсафәсини характерик мәсафә һесаб етмәк олар, чүнки Z-ин бүтүн гијмәтләри үчүн R мәсафәсиндә електронларын сыхлығы максимум гијмәт алыр. Әдәди һесабламалар көстәрир ки, атомун там електрик јүкүнүн јарысы радиусу $1{,}33Z^{-1/3}$ олан сферанын дахилиндә јерләшир.

Томас–Ферми тәнлији кифајәт гәдәр кичик вә кифајәт гәдәр бөјүк мәсафәләрдә тәчрүбәјә ујғун нәтичәләрә кәтирмир. Нүвәдән узаг мәсафәләрдә ($r\to\infty$) $\Phi(r)$ үчүн (92.11) тәнлијиндән алынан гијмәт тәчрүби гијмәтдән хејли бөјүкдүр.

Електрон јүкүнүн атомда пајланмасына кәлдикдә исә (92.10)-дан $\Phi(r)-\Phi(R)$ фәргинин ифадәсини (92.5) -дә јеринә јазанда, $\rho(r)$ үчүн

$$\rho(r)=Ar^{-3/2} \tag{92.16}$$

ифадәси алыныр. $r\to\infty$-да $\rho(r)\to 0$ јахынлашыр. Лакин даһа дәгиг Хартри–Фок методунун атома тәтбигиндән чыхыр ки, $r\to\infty$-да електрик јүкүнүн сыхлығы експоненсиал сыфра јахынлашыр.

Һәр ики метод васитәсилә адәтән

$$D(r)=4\pi r^2\rho(r) \tag{92.17}$$

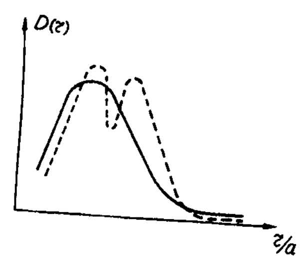
радиал електрон сыхлығы һесабланыр. Шәкил 44-дә аргон атому үчүн радиал сыхлығын $\dfrac{r}{a}$-дан асылылығы верилмишдир. Бүтөв әјри Томас–Ферми, гырыг әјри исә Хартри–Фок методу илә һесабланмышдыр. Әјриләрдән көрүнүр ки, Томас–Ферми методу атомун дахилиндә електрон сыхлығынын дәјишмәсини тәфсилаты илә изаһ едә билмир, лакин онун үмуми дәјишмә характерини дүзкүн верир. Атомун електрон сыхлығы үчүн нүвәдән узагда, јә'ни атомун харичи тәбәгәләриндә тәчрүбәјә нисбәтән хејли бөјүк гијмәт алыныр.

Беләликлә, Томас–Ферми статистик методу ајры-ајры атомларын фәрди хүсусијјәтләрини нәзәрә ала билмир, електрон өртүкләринин гурулушуну, нисбәтән зәиф рабитәдә олан валент електронларын јүк сыхлығынын дәјишмә характерини дәгиг верә билмир.

б) Томас–Ферми методунун мүсбәт иона тәтбиги тәчрүбә илә даһа јахшы ујғунлашан нәтичәләрә кәтирир. Нүвәнин електрик јүкү бөјүк олдугда, електрон өртүкләри нүвәјә даһа сых јерләшир. Електрон сыхлығы нүвәдән олан мәсафәнин артмасы илә кәскин азалыр вә електрон өртүјү сонлу $r=R$ радиуса малик олур. Бу һалда (92.11) тәнлији, (92.8) вә ја

$$\varphi(0)=1,\ \ \varphi(x_o)=0,\qquad x_o\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_{x=x_o}=\frac{Z-N}{Z}\qquad(92.18)$$

сәрһәд шәртләри өдәнилмәклә һәлл едилир, бурада $x_o=\dfrac{RZ^{1/3}}{b}$ -дир. ($r=bxZ^{-1/3}$ ифадәсиндән).



Шәкил 44. Аргон атомунун радиал сыхлығынын r/a-дан асылылыг әјриси.

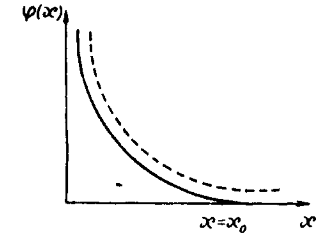
(92.11) тәнлији (92.12) вә (92.18) сәрһәд шәртләри дахилиндә интегралланмыш вә алынмыш $\varphi(x)$ һәллинин x-дән асылылығы шәкил 45-дә көстәрилмишдир. Бурада гырыг хәтт атома, бүтөв хәтт исә иона аиддир. Өлчүсүз (адсыз) потенсиал атомун нөмрәсиндән асылы олмадығындан $\varphi(x)$ үчүн алынмыш пајланма универсал характер дашыјыр.

$x\to\infty$-да атомун $\varphi(x)$ потенсиалы асимптотик олараг сыфра јахынлашдығындан, нә потенсиалын өзү, нә дә електрон сыхлығы һеч јердә сыфыр олмур, јә'ни атомун радиусу сонлу олмур. Ион үчүн исә $\varphi(x)$ потенсиалы $x=x_o$ нөгтәсиндә абсис охуну кәсир. Бу исә ионун $R=x_obZ^{-1/3}$ сонлу радиуса малик олдуғуна дәлаләт едир.

Томас–Ферми методу илә атомун там (рабитә) енержисини һесабламаг олур. Атомун там енержиси дедикдә електронларын кинетик, онларын нүвә вә бир-бири илә електростатик гаршылыглы тә'сир енержиләринин чәми баша дүшүлүр. Буна атомун там ионизасија енержиси, јә'ни нејтрал атомун бүтүн електронларыны гопармаг үчүн лазым олан енержи дә дејилир. Онун гијмәтини тапмаг үчүн атомун дахилиндә $\rho(r)=en(r)$ сыхлығы илә пајланмыш јүкләрин $E^{e.c.}$ електростатик тә'сир енержисини һесабламаг кифајәтдир.

Кулон гануну илә тә'сирдә олан зәррәчикләр системи үчүн вириал теореминдән чыхыр ки, бу системин орта кинетик енержиси K онларын $E^{e.c.}$ електростатик гаршылыглы тә'сир енержисинин мәнфи ишарә илә көтүрүлмүш јарысына бәрабәрдир (бах §18)

$$K=-\frac{1}{2}E^{e.c.}.$$



Шәкил 45.

Атомун беләликлә һесабланмыш там енержиси

$$E=K+E^{e.c.}=-\frac{1}{2}E^{e.c.}+E^{e.c.}=\frac{1}{2}E^{e.c.}$$

јахуд

$$E=-0{,}758\frac{e^2}{a}Z^{7/3}\qquad(92.19)$$

олур*.

Томас–Ферми (92.11) тәнлијинин әдәди интегралланмасы нәтичәсиндә нејтрал атомун там енержиси үчүн алынан гијмәт (92.19) -а јахындыр:

$$E=-0{,}769\frac{e^2}{a}Z^{7/3}=-20{,}94Z^{7/3}eB.\qquad(92.20)$$

E-нин Z-дән бурада алынмыш асылылыг характери тәчрүбәдә там тәсдиг олунур. Лакин тәчрүбәдә 20,94 әвәзинә 16 әмсалы алыныр. Беләликлә, Томас–Ферми методунда E үчүн нәзәри алынмыш гијмәт јүнкүл атомлар үчүн тәчрүби гијмәтдән хејли бөјүк олур, ағыр атомлара кетдикчә онлар арасындакы фәрг азалыр.

в) Томас–Ферми методу васитәсилә атомун електрон өртүкләринин долма ардычыллығыны, јә'ни $s,\ p,\ d,\ f,...$ һалларынын Z-ин һансы ән кичик гијмәтиндән башлајараг долмаға башладығыны да изаһ етмәк олар.

Билдијимиз кими мәһдуд фәзада һәрәкәт едән квант-механики системин енержи вә импулсу дискрет спектрә маликдир. Фәзаны өлчүсү L олан куб гәбул етдикдә L илә системин импулсу арасындакы рабитә

---

* Бах А.Соколов, И.Тернов, В.Жуковски, "Квантовая механика" "Наука" Москва, 1979, сәһ. 422; З. Флюге, "Задачи по квантовой механике" "Мир", Москва, 1974, сәһ. 144.

$$p_x=\frac{2\pi\hbar}{L}n_1,\quad p_y=\frac{2\pi\hbar}{L}n_2,\quad p_z=\frac{2\pi\hbar}{L}n_3, \qquad (92.20')$$

кими тә'јин едилир. p- нин ики ардычыл гијмәти арасындакы фәрг

$$\Delta p_i=\frac{2\pi\hbar}{L}\Delta n_i,\quad i=1,2,3$$

олар, бурада $\Delta n_1=\Delta n_2=\Delta n_3=1$ олдуғундан,

$$\Delta n_1\Delta n_2\Delta n_3=1=\frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3}\Delta p_x\Delta p_y\Delta p_z$$

ваhид интервала системин јеканә бир hалы ујғун олур.

Квант-механики систем атомун дахилиндә hәрәкәт едән електрон олугда, бахылан hалда јалныз ики електрон ола биләр. Она көрә дә ваhид hәчмдәки електронларын сајы $\rho(r)=en(r)$ електронун малик ола биләчәк максимал импулс илә

$$\rho(r)=\frac{e}{L^3}\sum\Delta n_1\Delta n_2\Delta n_3=\frac{2e}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{p_{max}}dp_x dp_y dp_z=\frac{2\cdot 4\pi e}{3(2\pi\hbar)^3}\int_0^{p_{max}}p^2dp=\frac{ep_{max}^2}{3\pi^2\hbar^3} \qquad (92.21)$$

кими тә'јин олунар.

Системин hәрәкәт мигдары моментинин

$$\vec{L}=[\vec{r}\vec{p}]$$

ифадәсиндән

$$p_n^2=\frac{L^2}{r^2}$$

алыныр. p_n – импулсун $\vec{r}$ радиус- вектора перпендикулјар истигамәтдәки проексијасыдыр. Јәгин ки, атомда електронун максимум импулсу p_n -дән кичик ола билмәз:

$$p_{max}^2\geq p_n^2=\frac{L^2}{r^2}. \qquad (92.21')$$

L^2-ы үчүн квазиклассик јахынлашмада алынан (беләки Томас–Ферми методу бу јахынлашмада доғрудур)

$$L^2=\hbar^2(l+\frac{1}{2})^2=\frac{\hbar^2}{4}(2l+1)^2$$

ифадәсини (бах § 32), p_{max} -ун (92.21)- дәки гијмәтини вә $\rho(r)$ үчүн Томас–Ферми тәнлијинин тәхмини hәллиндән алынан

$$\rho(r)=\frac{Z\lambda^{3/2}}{16\pi r^{3/2}}e^{-\sqrt{\lambda r}}\ ;\quad \lambda=\frac{100}{9}\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{-2/3}\frac{Z-\dfrac{N}{8}}{N^{2/3}a}$$

көтүрүб, (92.21′) ифадәсиндән истифадә етсәк,

$$Z=\frac{2e^3}{81\pi}(2l+1)^3=\gamma(2l+1)^3 \qquad (92.22)$$

олар, бурада e=2,718 – натурал логарифманын әсасы, γ=0,158 -дир. (92.11) Томас–Ферми тәнлијини әдәди hесабладыгда γ үчүн јухарыдакына јахын гијмәт алыныр:

$$Z_{\text{Т.Ф.}}=0{,}155(2l+1)^3 \qquad (92.23)$$

олур. Бу дүстур атомун l-ин верилмиш гијмәтинә ујғун сәвијјәдә електронун илк дәфә мејдана чыхмасыны көстәрән Z-ин гијмәтини тә'јин едир. (92.23)-дән $s(l=0)$ сәвијјәси үчүн $Z\approx1$, $p(l=1)$ сәвијјәси үчүн $Z\approx5$, $d(l=2)$ сәвијјәси үчүн $Z\approx23$, $f(l=3)$ сәвијјәси үчүн $Z\approx54$ вә и. а. алыныр.

Лакин 0, 155 әмсалы әвәзинә 0,17 көтүрүлсә,

$$Z=0{,}17\,(2l+1)^3 \qquad (92.24)$$

дүстуру тәчрүбәјә там ујғун гијмәтләрә кәтирир. l=0,1,2,3 гијмәтләриндә (92.24)-дән, ујғун оларағ, дәгиг 1, 5, 21, 58 олур. l=4-дә исә Z үчүн 124 гијмәти алыныр, јә'ни g сәвијјәсинин долмасы Z=124-дән башланмалы иди.

XI ФӘСИЛ

МОЛЕКУЛЛАРЫН КВАНТ НӘЗӘРИЈЈӘСИ

§ 93. АДИАБАТИК ЈАХЫНЛАШМА МЕТОДУ

Молекулларын вә бәрк чисимләрин хассәләри квант нәзәријјәси бахымындан өјрәнилдикдә електронлардан вә нүвәләрдән ибарәт системләри тәдгиг етмәк лазым кәлир. Билдијимиз кими, молекул бир нечә нүвәдән вә онларын електрик саhәсиндә hәрәкәт едән електронлардан тәшкил олунмушдур. Белә системин стасионар hалларынын тә'јини квант механикасында мүрәккәб бир мәсәләдир. Лакин, електронларын күтләси нүвәләрин күтләсиндән минләрлә дәфә кичик олдуғундан вә онлара ејни тәртибли гүввәләр тә'сир етдијиндән мәсәләнин hәллини бир гәдәр садәләшдирмәк мүмкүн олур.

Ејни тәртибли гүввәләрин тә'сири алтында нүвәләр електронлара нәзәрән чох кичик сүр'әтлә һәрәкәт едәр. Мүәјјән јахынлашмада онларын һәрәкәтинин бир-бириндән асылы олмајараг баш вердијини гәбул етмәк олар. Доғрудан да, биринчи јахынлашмада електронлара нәзәрән нүвәләри сүкунәтдә гәбул едиб, системин динамик һалы олараг сүкунәтдәки гүввә мәркәзләри саһәсиндә һәрәкәт едән електронларын һалы динамик һал һесаб едилә биләр. Нүвәләр чох кичик сүр'әтлә һәрәкәт етдијиндән електронларын динамик һалы нүвәләрин јаратдығы орта потенсиал саһәдә олдугча јаваш (адиабатик) дәјишәр. Она көрә дә нүвәләрин електронлара тә'сирини мүәјјән бир орта потенсиал функсија илә әвәз етмәк олар. Мәсәләјә белә бахыш јалныз нүвәләрин координатларындан асылы олан, јә'ни онларын стасионар һалларыны тә'јин едән Шрединкер тәнлијинә кәтирир. Дәјишәнләрин белә ајрылмасы методунун әсасыны тәшкил едән јахынлашма *адиабатик јахынлашма* адланыр.

Шрединкер тәнлијиндә нүвәләрин гаршылыглы тә'сиринин потенсиалы јалныз онларын арасындакы мәсафәдән асылы олур. Молекул мөвҹудурса, бу потенсиал онларын арасындакы мәсафәнин һәр һансы мүәјјән бир гијмәтиндә минимал гијмәтә малик олмалыдыр. Бу минимум, молекулун дајаныглы һалына ујғун олар. Нүвәләр бу минимума ујғун нөгтә әтрафында кичик амплитуда малик рәгси һәрәкәт едәр. Бундан башга молекул бүтөвлүкдә ирәлиләмә вә фырланма һәрәкәтләриндә иштирак едә биләр. Молекулун ирәлиләмә һәрәкәти онун әталәт мәркәзинин сәрбәст һәрәкәти илә әвәз едилсә (бах §40), молекулун јалныз рәгси вә фырланма һәрәкәтләри илә марагланмаг олар.

Адиабатик јахынлашманын маһијјәтини баша дүшмәк үчүн үмуми күтләси m олан електронлардан вә үмуми күтләси M олан нүвәләрдән ибарәт системә бахаг. Електронларын $\vec r_1, \vec r_2, \ldots, \vec r_i, \ldots$ координатлар чохлуғуну $\vec r$, нүвәләрин R_1, R_2, ..., R_i, ... координатлар чохлуғуну $\vec R$ илә ишарә едәк. Онда белә системин $\breve H$ Һамилтон оператору

$$\breve H = \breve T_e + \breve T_н + \breve V(\vec r, \vec R) \qquad (93.1)$$

вә онун стасионар һалларыны тә'јин едән Шрединкер тәнлији

$$\breve H \Psi(\vec r, \vec R) = E\Psi(\vec r, \vec R) \qquad (93.2)$$

олар. (93.1)-дә

$$\breve T_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2(\vec r) \qquad (93.3)$$

електронларын,

$$T_н = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2M}\nabla_i^2(\vec R) \qquad (93.4)$$

нүвәләрин кинетик енержи операторлары,

$$V(\vec r, \vec R) = \frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{e^2}{r_{i,j}} + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec R_i - \vec R_j|} - \sum_{i,j}\frac{Z_j e^2}{|\vec r_i - \vec R_j|} \qquad (93.5)$$

молекулда олан бүтүн зәррәҹикләрин гаршылыглы тә'сир операторудур. (93.5) - дә биринчи һәдд електронлар, икинчи һәдд нүвәләр, үчүнчү һәдд исә нүвәләр илә електронлар арасындакы гаршылыглы тә'сир енержисини көстәрир.

Биринчи јахынлашмада $M \to \infty$ көтүрүб, нүвәләрин кинетик енержи операторуну кичик һәјәҹанланма кими гәбул етсәк, һәјәҹанланмамыш системин Һамилтон оператору

$$\breve H_e = \breve T_e + V(\vec r, \vec R)$$

олар. Онда һәјәҹанланмамыш системин стасионар һалларынын енержиләри вә далға функсијалары

$$\breve H_e \Psi^o(\vec r, \vec R) = E^o(R)\Psi^o(\vec r, \vec R) \qquad (93.6)$$

тәнлијинин һәллиндән тапылар. (93.6) тәнлији нүвәләрин верилмиш вәзијјәтиндә вә ја чох јаваш һәрәкәти заманы (адиабатик јахынлашма) електронларын һәрәкәт һалыны характеризә едир. Стасионар һалларын $E^o_n(R)$ енержиләринә вә $\Psi^o_n(\vec r, \vec R)$ далға функсијаларына нүвәләрин $\vec R$ координатлары параметр кими дахил олур (n индекси стасионар һалы тә'јин едән квант әдәдләр чохлуғудур).

(93.6) тәнлијинин һәлләринин мә'лум олдуғуну фәрз етсәк, (93.2) үмуми тәнлијинин һәллини $\breve H_e$ операторунун $\left\{\Psi^o_n(\vec r, \vec R)\right\}$ мәхсуси функсијаларынын суперпозисијасы шәклиндә ахтармаг олар. Бу заман суперпозисија әмсаллары, јәгин ки, нүвәләрин координатларынын функсијасы кими сечилмәлидир:

$$\Psi^o(\vec r, \vec R) = \sum_m \Phi_m(\vec R)\Psi^o_m(\vec r, \vec R). \qquad (93.7)$$

Буну (93.2) - дә јаздыгда

$$(\breve H_e + \breve T_н)\sum_m \Phi_m(\vec R)\Psi^o_m(\vec r, \vec R) = E\sum_m \Phi_m \Psi^o_m. \qquad (93.8)$$

Мө'тәризәләри ачыб, (93.6) тәнлијини нәзәрә алсаг,

$$\sum_m \Phi_m E_m \Psi^o_m + \breve T_н \sum_m \Phi_m(\vec R)\Psi^o_m(\vec r, \vec R) = E\sum_m \Phi_m \Psi^o_m. \qquad (93.8')$$

Ахырынчы бәрабәрлији солдан $\Psi_n^{*o}(\vec{r},\vec{R})$-ә вуруб, електронларын координатлары үзрә интеграл алаг. Онда $\Psi_n^o(\vec{r},\vec{R})$ функсијалары үчүн ортогоналлыг шәртиндән (93.8′) тәнлији

$$(E_n^o - E)\Phi_n(\vec{R}) + \sum_m \int \Psi_n^o \breve{T}_я \Phi_m(\vec{R}) \Psi_m^o (d\vec{r}) = 0 \qquad (93.9)$$

шәклинә дүшәр.

$\breve{T}_я$ операторунун (93.4) илә верилмиш ифадәсини (93.9) - да јазандан сонра $\nabla^2(R)$ операторунун

$$\nabla^2(\varphi f) = 2\vec{\nabla} f \vec{\nabla}\varphi + \varphi\nabla^2 f + f\nabla^2\varphi$$

кими тә'јин олунан тә'сири нәзәрә алынса,

$$\int \Psi_n^{*o} \breve{T}_я \Phi_m(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r},\vec{R})(d\vec{r}) = -\hbar^2 \sum_i \frac{1}{M_i} \int \Psi_n^{*o} \vec{\nabla}_i(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r},\vec{R}) \vec{\nabla}_i(\vec{R}) \Phi_m(\vec{R}) +$$

$$+ \int \Psi_n^{*o} \breve{T}_я \Psi_m^o(\vec{r},\vec{R})(d\vec{r}) \Phi_m(\vec{R}) + \delta_{nm} \breve{T}_я \Phi_m(\vec{R})$$

олар. Буну (93.9)- да јазыб, $\vec{R}$ координатларына тә'сир едән

$$\breve{\Lambda}_{nm} = \hbar^2 \sum_i \frac{1}{M_i} \int \Psi_n^{o*} \vec{\nabla}_i(\vec{R}) \Psi_m^o(\vec{r},\vec{R})(d\vec{r}) \vec{\nabla}_i(\vec{R}) - \qquad (93.10)$$

$$- \int \Psi_n^{o*}(\vec{r},\vec{R}) \breve{T}_я \Psi_m^o(\vec{r},\vec{R})(d\vec{r})$$

оператору дахил едиләрсә, (93.9) тәнлији

$$(\breve{T}_я + E_n^o - E)\Phi_n(\vec{R}) = \sum_m \breve{\Lambda}_{nm} \Phi_m(\vec{R}) \qquad (93.11)$$

шәклә дүшәр.

(93.11)-дә m-ә m=1,2,3,... гијмәтләрини вердикдә систем E там енержинин мәхсуси гијмәтләр вә $\Phi_m(\vec{R})$ функсијалар спектрләрини тә'јин едән бирчинс тәнликләр системи алыныр. Белә системи дәгиг һәлл етмәк мүмкүн дејилдир. Лакин, (93.10) операторуна кичик һәјәчанланма оператору кими бахмаг мүмкүн оларса, (93.11) тәнликләр системини ардычыл јахынлашма методу илә һәлл етмәк олар. Сыфырынчы (адиабатик) јахынлашмада (93.11) тәнлијинин сағ тәрәфини сыфра бәрабәр көтүрдүкдә (93.11) системи

$$(\breve{T}_я + E_n^o(R))\Phi_n(\vec{R}) = E\Phi_n(\vec{R}) \qquad (93.12)$$

тәнликләр системинә чеврилир. (93.12) тәнлијиндән көрүнүр ки, нүвәләрин верилмиш вәзијјәтиндә (R=const) електронларын һәрәкәт һалыны тә'јин едән $E_n^o(R)$ енержиси нүвәләрин һәрәкәт тәнлијиндә потенсиал енержи ролуну ојнајыр, $\Phi_n(\vec{R})$-функсијасы исә електронларын верилмиш һәрәкәт һалында нүвәләрин һәрәкәтини характеризә едир.

Електронларын n-квант әдәдләр чохлуғу илә тә'јин олунан мүәјјән һалында нүвәләр мүхтәлиф һалларда ола билдијиндән, һәмин һаллары тә'јин едән квант әдәдләр чохлуғуну α илә ишарә едәк. Онда (93.12) тәнлији

$$(\breve{T}_я + E_n^o(R))\Phi_{n\alpha}(\vec{R}) = E_{n\alpha}\Phi_{n\alpha}(\vec{R}) \qquad (93.12')$$

кими јазылар.

Беләликлә, адиабатик јахынлашмада нүвәләрдән вә електронлардан тәшкил олунмуш квант системинин мүәјјән һалынын (93.7) далға функсијасы

$$\Psi_{n\alpha}(\vec{r},\vec{R}) = \Phi_{n\alpha}(\vec{R})\Psi_n^o(\vec{r},R) \qquad (93.13)$$

кими ики функсијанын садә һасилинә бәрабәр олур, јә'ни електронларын n квант әдәдләр чохлуғу илә тә'јин олунан һәр бир $\Psi_n^o(\vec{r},\vec{R})$ һалына, нүвәләрин α квант әдәдләри илә фәргләнән $\Phi_{n\alpha}(\vec{R})$ һаллары ујғун кәлир. Бурада (93.6) тәнлијинин һәллиндән тапылан $E_n^o(R)$ –молекулун електронларынын там енержиси олдуғу һалда, (93.12′) тәнлијинин һәллиндән тапылан $E_{n\alpha}$-нын ифадәсинә исә јалныз електронларын енержиси јох, нүвәләрин һәрәкәт енержиси (молекулун рәгс вә фырланма енержиләри) дә дахил олур (§ 97- јә бах).

Адиабатик јахынлашма о вахт нисбәтән јахшы нәтичәләрә кәтирир ки, (93.11) тәнлијинин дәгиг һәлли сыфырынчы јахынлашмада алынан (93.12′) тәнлијинин һәллиндән аз фәргләнсин. Бу о заман олар ки, $\breve{\Lambda}_{nm}$ операторунун һәр һансы ики $E_n^o(R)$ вә $E_m^o(R)$ стасионар һала ујғун матриса елементи онларын енержиләри фәргиндән хејли кичик олсун, јә'ни

$$\int \Phi_{n\alpha}^{*} \breve{\Lambda}_{nm} \Phi_{m\alpha'}(d\vec{R}) \ll \left|E_{n\alpha}^o - E_{m\alpha'}^o\right| \qquad (93.14)$$

шәрти өдәнилсин, бурада α вә α' истәнилән ола биләр.

§ 94. ҺИДРОКЕН МОЛЕКУЛУНУН КВАНТ НӘЗӘРИЈЈӘСИ

Елементләрин кимјәви хассәләри вә онларын оптик спектрләри атомларын харичи s вә p өртүкләриндәки електронларын сајы илә тә'јин олунур. Дахили електронлар исә нүвә илә даһа күчлү бағландыгларындан атомларын јухарыдакы хассәләринә елә бир тә'сир көстәрмир. Она көрә дә кимјәви реаксијаларда ајрылан енержи дахили өртүкләрдәки електронларын енержисиндән хејли кичик олур.

Мүхтәлиф елементләрин атомлары адәтән ики нөв кимјәви рабитә нәтичәсиндә молекул јарада билир. Бунлардан бири *ион рабитәси* (бу *һетерополјар рабитә* адланыр), икинчиси исә *атом рабитәсидир* (бу *һомеополјар рабитә* адланыр).

Ион рабитәдә молекул мәнфи вә мүсбәт електрик јүкүнә малик ионлардан ибарәт олур вә онлар арасында тә'сир едән ади Кулон чазибә гүввәси һесабына молекулун дајаныглығы тә'мин олунур. Белә молекуллар һетерополјар молекуллар адланыр.

Молекула дахил олан ионлардан һансынын мүсбәт вә ја мәнфи јүкә малик олмасы бир тәрәфдән реаксијаја кирән атомларын ионизасија потенсиалындан, јә'ни харичи өртүкдәки електрону атомдан гопармаг үчүн лазым олан енержидән, дикәр тәрәфдән исә, атомун електрона олан *јахынлыгындан* (сродство), јә'ни нејтрал атомун харичи тәбәгәдә әлавә електрону тутуб сахламаг габилијјәтиндән асылыдыр.

Биринчи груп елементләрин (гәләви металлар) атомларынын ионизасија потенсиалы ән кичик (минимум) гијмәтә маликдир. Групдан група кечдикчә онун гијмәти елементин Z сыра нөмрәсиндән асылы олараг артыр вә VIII груп елементләриндә (тә'сирсиз газларда) максимум гијмәт алыр. Она көрә дә тә'сирсиз газларын атомлары үчүн електронуну башга атома вермәк просеси әлверишли олмур вә харичи s вә p өртүкләри долу олдуғундан, Паули принсипинә көрә харичи өртүјә әлавә електрон да гәбул едә билмир, јә'ни онларын електрона јахынлығы да сыфра бәрабәр олур. Бурадан чыхыр ки, тә'сирсиз газлар, ади шәраитдә, кимјәви реаксијаларда иштирак едә билмир. Лакин бу вә ја башга бир јолла онларын атомларыны һәјәчанландырмаг мүмкүн оларса, јәгин ки, кимјәви бирләшмәләр јаратмагда иштирак едә биләр.

I вә II груп елементләри олан гәләви вә гәләви торпаг металларын атомлары үчүн ионизасија потенсиалы кичик олдуғундан өз харичи өртүјүндәки бир вә ја ики електронуну асанлыгла башга атома верә билир. Әксинә, VI вәVII групларда елементләрин атомларынын електрона јахынлығы чох олур вә онларын харичи p-өртүјүнүн долмасы үчүн чатышмајан бир вә ја ики електрону дикәр атомдан асанлыгла алыр.

Мисал үчүн ади хөрәк дузунун молекулу I груп елементи натриум (Na) вә VII груп елементи хлор (Cl) атомларындан ибарәтдир. Бу молекулда натриум өз електронуну хлора верәрәк мүсбәт ион (Na^+), хлор исә ону алараг мәнфи ион (Cl^-) шәклиндә молекула дахил олур. Бу һалда натриум атомунун ионизасија потенсиалы кичик, хлор атомунун исә електрона јахынлығы бөјүкдүр.

Демәли, кимјәви елементләрин атомлары ики нөв валентлијә малик олур. Кимјәви реаксијалар заманы харичи өртүјүндәки електронлары дикәр атомлара верән елементләрин валентлији мүсбәт, онлары гәбул едән атома ујғун елементин валентлији исә мәнфи һесаб олунур. Бахылан елементин бир, ики вә и.а. валентли олмасы исә верилән вә ја гәбул едилән (алынан) електронларын сајы илә тә'јин олунур. Мүсбәт валентлик I вә II груп елементләриндә, мәнфи валентлик исә VI вә VII груп елементләриндә даһа габарыг шәкилдә өзүнү бүрузә верир. Һәр бир елемент шәраитдән асылы олараг принсипчә һәр ики нөв валентлијә малик ола биләр.

Һомеополјар (атом) рабитәјә кәлдикдә, хүсуси гејд етмәк лазымдыр ки, бу нөв рабитә ики нејтрал атом арасында јараныр. Бу рабитә *спин рабитәси* дә адланыр.

Һетерополјар рабитәнин классик нәзәријјәсини гурмаг мүмкүн олдуғу һалда, һомеополјар рабитә классик физика бахымындан анлашылмыр. Бу рабитәнин тәбиәти онун јалныз квант нәзәријјәси јарадыландан сонра мә'лум олмушдур. Бурада ион рабитәнин шәрһи үзәриндә дајанмајачағыг, марагланан охучулар ону ујғун әдәбијјатда тапа биләрләр*. Бизим әсас мәгсәдимиз ән садә молекул олан һидрокен молекулу тимсалында охучулары һомеополјар рабитәнин квант нәзәријјәси илә таныш етмәкдир.

Бундан әввәлки параграфда көстәрдик ки, адиабатик јахынлашмада, нүвәләрин верилмиш вәзијјәтиндә електронларын һәрәкәт һалы (93.6) тәнлији илә тәсвир олунур. Бу тәнлијин көмәјилә аз-чох јахшы нәтичәләр алмаг мүмкүн олан молекул һидрокен молекулудур. Мә'лумдур ки, һидрокен молекулу ики нејтрал атомдан тәшкил олунмушдур вә һомеополјар кимјәви рабитәјә ән јахшы мисалдыр.

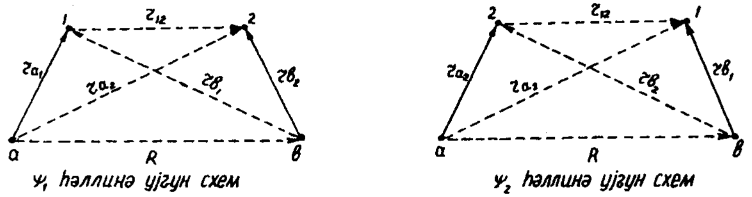
Нүвәләри бир-бириндән хејли узагда олан һала ујғун енержини һесаблама башланғычы гәбул етсәк, молекулун дајаныглы һалынын енержиси мәнфи олмалыдыр. Молекулун бахылан һалындакы енержиси, әслиндә, ону тәшкил едән атомларын кимјәви рабитәсинин өлчүсүдүр. Она көрә дә молекулун енержисини һесабламаг онун атомлары арасындакы кимјәви рабитәнин әдәди нәзәријјәсини гурмаг демәкдир. Квант механикасы јаранана гәдәр нәинки һомеополјар рабитә, үмумијјәтлә кимјәви рабитәнин тәбиәти һаггында елә бир әсаслы фикир мөвчуд дејилди. Кимјәви рабитәнин тәбиәтинин мүәјјән едилмәси квант механикасынын ән әсас нәтичәләриндән биридир.

Инди дә нүвәләрин вәзијјәти сабит галдығы (дәјишмәдији) һалда молекулда електронларын енержисини тә'јин едән (93.6) тәнлијинин тәдгигинә кечәк. Бу тәнлик һидрокен молекулу үчүн илк дәфә, һәјәчанланма методунун көмәји илә Һајтлер–Лондон тәрәфиндән һәлл олунмушдур.

Һидрокен молекулу бир-бириндән R мәсафәсиндә јерләшмиш a вә b нүвәләриндән, 1 вә 2 електронлардан ибарәтдир (шәкил 46).

---

* Мәсәлән, ион рабитәнин схематик изаһы илә А.Соколов, И.Тернов, В.Жуковский, "Квантоваја механика", Москва, "Наука", 1979, сәһ. 436 китабында таныш олмаг олар.



Шәкил. 46. Һидрокен молекулунда гаршылыглы тә'сир схеми: *a* вә *б* –нүвәләр; 1 вә 2– електронлардыр.

Белә системин $\breve{H}$ Һамилтон оператору

$$\breve{H} = H_a(1) + H_b(2) + V(1,2) + \frac{e^2}{R} + W(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \breve{\vec{p}}_1, \vec{p}_2, s_{1z}, s_{2z}) \qquad (94.1)$$

олар. Бурада 1 вә 2 илә електронларын x_1, y_1, z_1 вә x_2, y_2, z_2 фәза координатлары ишарә олунмушдур,

$$H_a(1) = \frac{\breve{p}_1^2}{2m} + U(\vec{r}_1) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{a1}} \qquad (94.2)$$

биринчи,

$$H_b(2) = \frac{\breve{p}_2^2}{2m} + U(\vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{b2}} \qquad (94.3)$$

икинчи електронун Һамилтон оператору,

$$V(1,2) = -\frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \qquad (94.4)$$

електронларын нүвәләрлә вә бир-бирилә гаршылыглы тә'сир енержиси; $\frac{e^2}{R}$ – нүвәләр арасындакы гаршылыглы тә'сир енержиси вә $W(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \breve{\vec{p}}_1, \vec{p}_2, s_{1z}, s_{2z})$ – спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сир операторудур.

(93.6) тәнлијинин (94.1) оператору әсасында дәгиг һәллини тапмаг мүмкүн дејилдир. О, адәтән спин-орбитал вә спин-спин гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда тәхмини һәлл едилә билир.

Нүвәләр арасындакы мәсафә R сабит галдығы гәбул едилдијинә көрә

(94.1)-дә $\frac{e^2}{R}$ һәдди адитив сабит кими електронларын һәрәкәт һалыны тә'јин едән енержијә әлавә едилир. Бу бахымдан (93.6)-ја дахил олан E^o енержиси јалныз електронларын һәрәкәт енержиси олар, јә'ни сүкунәтдәки молекулун там енержиси

$$E = E^o + \frac{e^2}{R}. \qquad (94.5)$$

Һамилтон оператору исә

$$\breve{H} = \breve{H}_a(1) + \breve{H}_b(2) + V(1,2) = \breve{H}_o + V(1,2) \qquad (94.6)$$

ујғун Шрединкер тәнлији

$$\breve{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, R) = E(R)\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) \qquad (94.7)$$

олар.

Бу методда нүвәләри бир-бириндән хејли узагда ($R \to \infty$) јерләшдији һала ујғун молекулун $\Psi^o(1,2)$ функсијасы сыфырынчы јахынлашма гәбул олунур. Бу заман $V(1,2) \to 0$ јахынлашдығындан сыфырынчы јахынлашмада Һамилтон оператору

$$\breve{H}_o = \breve{H}_a(1) + \breve{H}_b(2), \qquad (94.8)$$

ујғун Шрединкер тәнлији

$$H_o\Psi^o(1,2) = (\breve{H}_a(1) + \breve{H}_b(2))\Psi^o(1,2) = E_o\Psi^o \qquad (94.9)$$

олур. Бахылан јахынлашмада молекулда електронлар бир-бириндән асылы олмајараг һәрәкәт етдијиндән, (94.9)-ун һәллини биринчи електронун "a" нүвәси, икинчи електронун исә "b" нүвәси әтрафында һәрәкәт һалыны характеризә едән $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ вә $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$ функсијаларынын һасили шәклиндә ахтармаг олар:

$$\Psi_I^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_a(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b2}). \qquad (94.10)$$

$\breve{H}_a(1)$ оператору јалныз $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$, $H_b(2)$ оператору јалныз $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$ функсијасына тә'сир етдијиндән, (94.9) тәнлији

$$\breve{H}_a(1)\Psi_a(\vec{r}_{a1}) = E_{a1}\Psi_a(\vec{r}_{a1}) \qquad (94.11)$$

$$\breve{H}_b(2)\Psi_b(\vec{r}_{b2}) = E_{b2}\Psi_b(\vec{r}_{b2})$$

системинә чеврилир. $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ вә $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$ функсијалары (94.11) системиндәки тәнликләрин һәллидирсә, (94.10) функсијасы $E_o=E_{a1}+E_{b2}$ бәрабәрлији өдәнилдији һалда (94.9) тәнлијинин һәлли олур.

Фермионлар үчүн сечилмәзлик принсипиндән (бах § 81) чыхыр ки, биринчи електрон "b" нүвәси, икинчи електрон исә "a" нүвәси әтрафында да һәрәкәт едә биләр. Онда H_o вә $V(2,1)$ операторлары

$$\breve{H}_o(2,1) = \breve{H}_a(\vec{r}_{a2}) + H_b(\vec{r}_{b1})$$

$$V(2,1) = -\frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}} \tag{94.12}$$

вә $H_o(2,1)$-ә ујғун тәнлик

$$\breve{H}_o(2,1)\Psi^o(2,1) = E^{o'}\Psi^o(2,1) \tag{94.13}$$

шәклинә дүшәр. (94.9)-а ујғун олараг (94.13)-үн һәлли

$$\Psi^o_{II}(2,1) = \Psi_a(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b1}) \tag{94.14}$$

һасили шәклиндә ахтарылыр. Бу заман $\Psi_a(\vec{r}_{a2})$ вә $\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ функсијалары

$$\breve{H}_a(2)\Psi_a(\vec{r}_{a2}) = E_{a2}\Psi_a(\vec{r}_{a2}) \tag{94.15}$$

$$\breve{H}_b(1)\Psi_b(\vec{r}_{b1}) = E_{b1}\Psi_b(\vec{r}_{b1})$$

системини өдәјир вә $\Psi^o_{II}(2,1)$ функсијасы $E_o'=E_{a2}+E_{b1}$ шәрти дахилиндә (94.13)-үн һәлли олур.

Сыфырынчы јахынлашмада молекулун атомлары арасындакы гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадығындан, молекул о заман ән кичик енержили әсас һалда ола биләр ки, она дахил олан атомларын һәр бири әсас һалда олсун. Башга сөзлә $E_{a1}=E_{b2}=E_{a2}=E_{b1}=E^o_n$ бәрабәрликләри өдәнилсин вә молекулун әсас һалынын енержиси

$$E_o = E_{a1} + E_{b2} = E_{a2} + E_{b1} = 2E^o_n = -\frac{2R\hbar}{n^2} = -\frac{e^2}{a}. \tag{94.16}$$

Беләликлә $\breve{H}^o$ операторунун $2E^o_n$ мәхсуси гијмәтинә $\Psi^o_I(1,2)$ вә $\Psi^o_{II}(2,1)$ кими ики мәхсуси функсија ујғун олур, јә'ни молекулун әсас һалы икигат чырлашмыш олур. Бу чырлашма електронларын сечилмәзлик принсипи (онларын мүбадиләси) нәтичәси олдуғундан белә чырлашма *мүбадилә чырлашмасы* адланыр.

Бахылан мәсәләнин хүсусијјәти ондан ибарәтдир ки, чырлашмыш һалы тәсвир едән $\Psi^o_I(1,2)$ вә $\Psi^o_{II}(2,1)$ функсијалары мүхтәлиф опера-

торларын мәхсуси функсијаларыдыр. $\Psi^o_I(1,2)$ функсијасы (94.13) тәнлијини, $\Psi^o_{II}(2,1)$ функсијасы исә (94.9) тәнлијини өдәмир. Буна көрә дә Ψ^o_I вә Ψ^o_{II} функсијаларынын бир-биринә ортогонал олдуғуну иддиа етмәк олмаз.

$\Psi^o_I(1,2)$ вә $\Psi^o_{II}(2,1)$ һалларындан һәр һансы бириндә системи тәсвир едән функсија, квант механикасынын үмуми принсипинә көрә бу ики функсијанын суперпозисијасы шәклиндә верилир:

$$\Psi^o(1,2) = C_1\Psi^o_I(1,2) + C_2\Psi^o_{II}(2,1). \tag{94.17}$$

Спинләри 1/2 олан зәррәчикләр системинин үмуми далға функсијасы (координат вә спин функсијаларынын һасили) зәррәчикләрин јердәјишмә (мүбадилә) әмәлијјатына көрә антисимметрик функсија (бах: §81) олмалыдыр. Координат функсијасы симметрик олдугда спин функсијасы антисимметрик, координат функсијасы антисимметрик олдугда исә спин функсијасы симметрик олур. Ики фермионлу системдә (бах §83) системин там спини сыфра ($S=0$) бәрабәрдирсә, координат функсијасы симметрик, ваһидә ($S=1$) бәрабәрдирсә, антисимметрик олур. (94.17) функсијалар чохлуғундан һидрокен молекулунун әсас һалы

$$\Psi^S(1,2) = C_1\left\{\Psi_a(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b2}) + \Psi_a(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b1})\right\} \tag{94.18}$$

јахуд

$$\Psi^A(1,2) = C_2\left\{\Psi_a(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b2}) - \Psi_a(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b1})\right\} \tag{94.19}$$

функсијасы илә тәсвир олунмалыдыр.

Бура дахил олан C_1 вә C_2 сабитләри Ψ^S вә Ψ^A функсијаларынын

$$\int \Psi^{+S}\Psi^S dV_1 dV_2 = 1, \quad \int \Psi^{+A}\Psi^A dV_1 dV_2 = 1 \tag{94.20}$$

нормаланма шәртләриндән тапылыр. Мәсәлән Ψ^S үчүн олан шәрти көтүрәк:

$$\begin{aligned} 1 = \int \Psi^{+S}\Psi^S dV_1 dV_2 &= C_1^2 \int \Psi^+_a(\vec{r}_{a1})\Psi_a(\vec{r}_{a1})dV_1 \int \Psi^+_b(\vec{r}_{b2})\Psi_b(\vec{r}_{b2})dV_2 + \\ &+\int \Psi^+_a(\vec{r}_{a2})\Psi_a(\vec{r}_{a2})dV_2 \int \Psi^+_b(\vec{r}_{b1})\Psi(\vec{r}_{b1})dV_1 + \\ &+2\int \Psi^+_a(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b1})dV_1 \int \Psi^+_b(\vec{r}_{b2})\Psi_a(\vec{r}_{a2})dV_2 \end{aligned} \tag{94.21}$$

Биринчи вә икинчи һәдләрдәки интеграллар ајрылыгда көтүрүлмүш һидрокен атомунун далға функсијалары үчүн јазылмыш нормаланма шәрти үзәринә дүшдүјүндән ваһидә бәрабәр олур. Үчүнчү һәддә дахил олан интеграллар исә интеграллама дәјишәнләринин јердәјишмәси илә фәргләнир вә онлар о вахт сыфырдан фәргли олар ки, $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ вә $\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ (вә ја $\Psi_a(\vec{r}_{a2})$ вә $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$) функсијалары мүштәрәк фәза областында ејни заманда гијмәт алсын, јә'ни һәмин областда бир-бирини өртсүн (шәкил 47-дә штрихләнмиш областдан). Өртмә дәрәҹәсини характеризә едән кәмијјәт S илә ишарә олунур (там спинлә гарышдырмамалы)

$$S = \int \Psi_a^+(r_{a1})\Psi_b(r_{b1})dV_1 = \int \Psi_a^+(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b2})dV_2 \,. \qquad (94.21')$$

Беләликлә (94.21) нормаланма шәрти

$$1 = 2C_1^2(1+S^2)$$

шәклинә дүшүр, бурадан

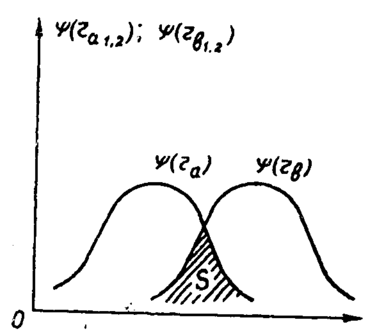
$$C_1 = \left[2(1+S^2)\right]^{-\frac{1}{2}}. \qquad (94.22)$$

Ејни шәкилдә Ψ^A-нын нормаланма шәртиндән

$$C_2 = \left[2(1-S^2)\right]^{-\frac{1}{2}} \qquad (94.23)$$

алыныр. Бурада S-ин ортаја чыхмасы (94.10) вә (94.14) функсијаларынын бир-бирилә ортогонал олмадығыны көстәрир. Онлар ортогонал олсајды S=0 вә $C_1 = C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ оларды. Башга сөзлә R=0 оланда $S = 1$, $R \to \infty$-да исә S=0 олур.

Беләликлә, сыфырынҹы јахынлашмада һидрокен молекулунун әсас һалынын енержиси үчүн (94.16), далға функсијасы үчүн исә (94.18) вә (94.19) ифадәләри алыныр.



Шәкил 47. $\Psi_a(\vec{r}_{a1})$ илә $\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ (вә ја $\Psi_a(\vec{r}_{a2})$ илә $\Psi_b(\vec{r}_{b2})$ функсијаларынын биркә дәјишмә областынын (штрихләнмиш област) схеми.

Инди дә (94.7) тәнлијинин һәллинә кечәк. Сыфырынҹы јахынлашманын (94.10) вә (94.14) далға функсијалары ортогонал олмадығындан чырлашмыш һаллар үчүн инкишаф етдирилмиш һәјәҹанланма нәзәријјәсини билаваситә бура тәтбиг етмәк мүмкүн дејилдир. Она көрә дә һәјәҹанланма нәзәријјәсини бир гәдәр башга шәклә салаг.

Һәјәҹанланмамыш һалын далға функсјасына вә онун енержисинә һәјәҹанланманын вердији әлавәләри ујғун олараг φ вә ε кими ишарә едәк:

$$\Psi(1,2) = \Psi^o(1,2) + \varphi, \qquad (94.24)$$
$$E = E_o + \varepsilon.$$

Бу ифадәләри (94.7)-дә јеринә јазсаг,

$$\left[\hat{H}_o + V(1,2)\right](\Psi^o + \varphi) = (E_o + \varepsilon)(\Psi^o + \varphi) \qquad (94.25)$$

аларыг. E_o-а көрә V-ни вә ε-ну, Ψ^o-а көрә φ-ни биринҹи тәртиб кичик кәмијјәт һесаб едиб, (94.25)-дә $V\varphi$ вә $\varepsilon\varphi$ кими икинҹи тәртиб кичик кәмијјәтләри нәзәрә алмасаг, (94.9) тәнлијинә әсасән (94.25) тәнлији

$$(H^o - E^o)\varphi(1,2) = (\varepsilon - V(1,2))\Psi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}) \qquad (94.26)$$

шәклә дүшүр.

Һәјәҹанланманын нәзәрә алынмасы електронларын сечилмәзлик принсипи илә әлагәдар чырлашманы арадан көтүрдүјүнә көрә (94.26)-дан енержијә олан ε әлавәни вә Ψ^o-а дахил олан C_1 илә C_2 әмсаллары арасындакы әлагәни тапмаг олар. Бунун үчүн § 46-да исбат едилмиш теоремдән истифадә едәк. Бу теоремә көрә сағ тәрәфи олан гејри-бирҹинс тәнлијин һәллинин мөвҹуд олмасы үчүн ујғун бирҹинс тәнлијин һәлли (94.26) тәнлијинин сағ тәрәфи илә ортогонал олмалыдыр.

Биринҹи електрон "a" нүвәси, икинҹи електрон "b" нүвәсинин әтрафында һәрәкәт етдији һала ујғун Ψ_I^o һәлли үчүн

$$\int \Psi_I^o(1,2)\left[\varepsilon - V(1,2)\right]\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R})dV_1 dV_2 = 0\,; \qquad (94.27)$$

биринҹи електрон "b" нүвәси, икинҹи електрон "a" нүвәси әтрафында һәрәкәт едән һала ујғун $\Psi_{II}^o(2,1)$ һәлли үчүн

$$\int \Psi_{II}^o(2,1)\left[\varepsilon - V(2,1)\right]\Psi^o(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R})dV_1 dV_2 = 0 \qquad (94.28)$$

бәрабәрликләри өдәнмәлидир. Бурада $V(1,2)$ потенсиал енержиси (94.4), $V(2,1)$ исә (94.12) ифадәләри илә верилир.

(94.10), (94.14) вә (94.17) ифадәләриндән истифадә етсәк, (94.27) вә (94.28) бәрабәрликләри

$$(\varepsilon - K)C_1 + (\varepsilon S^2 - A)C_2 = 0 \qquad (94.29)$$
$$(\varepsilon S^2 - A)C_1 + (\varepsilon - K)C_2 = 0$$

системинә кәтирир. Бурада

$$\int \Psi_I^{+o}\Psi_I^o dV_1 dV_2 = 1 = \int \Psi_{II}^{+o}\Psi_{II}^o dV_1 dV_2$$

нормаланма шәртләри нәзәрә алынмыш вә

$$K(R) = \int \Psi_I^{o+}V(1,2)\Psi_I^o dV_1 dV_2 = \int \Psi_{II}^{o+}V(2,1)\Psi_{II}^o dV_1 dV_2\,, \qquad (94.30)$$

$$A(R)=\int \Psi_I^{o+}V(1,2)\Psi_{II}^{o}dV_1dV_2=\int \Psi_{II}^{o+}V(2,1)\Psi_I^{o}dV_1dV_2 \qquad (94.31)$$

$$S^2(R)=\int \Psi_I^{o+}\Psi_{II}^{o}dV_1dV_2 \qquad (94.32)$$

ишарәләри дахил едилмишдир.

Мүбадилә еффекти нәзәрә алынмадыгда

$$K(R)=e^2\int\left|\Psi_a(\vec{r}_{a1})\right|^2\left|\Psi_b(r_{b2})\right|^2\left(\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{a2}}-\frac{1}{r_{b1}}\right)dV_1dV_2= \qquad (94.30')$$

$$=\int\left|\Psi_a(\vec{r}_{a1})\right|^2\frac{e^2}{r_{12}}\left|\Psi_b(r_{b2})\right|^2dV_1dV_2-\int\left|\Psi_a(\vec{r}_{a1})\right|^2\frac{e^2}{r_{b1}}dV_1-\int\left|\Psi_b(r_{b2})\right|^2\frac{e^2}{r_{a2}}dV_2$$

електронларын бир-бирилә, биринчи електронун "*b*" нүвәси вә икинчи електронун "*a*" нүвәси илә Кулон гаршылыглы тә'сир енержисинин орта гијмәтидир.

$$A(R)=e^2\int\Psi_a^+(\vec{r}_{a1})\Psi_b^+(\vec{r}_{b2})\left(\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{a2}}-\frac{1}{r_{b1}}\right)\Psi_a(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b1})dV_1dV_2=$$

$$=e^2\int\frac{1}{r_{12}}\Psi_a^+(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b1})\Psi_b^+(\vec{r}_{b2})\Psi_a(\vec{r}_{a2})dV_1dV_2- \qquad (94.31')$$

$$-e^2S\int\frac{1}{r_{a2}}\Psi_a^+(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b2})dV_2-e^2S\int\frac{1}{r_{b1}}\Psi_a^+(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b1})dV_1$$

интегралы *мүбадилә енержиси* адланыр. О, Паули принсипи әсасында системин далға функсијасынын симметрик вә ја антисимметрик олмасы тәләбиндән електронларын һәрәкәтиндәки коррелјасија нәтиҹәсиндә електронлар вә електронларла нүвәләр арасында мејдана чыхан гаршылыглы тә'сир енержисидир. О, гејд етдијимиз кими, тәмиз квант еффектидир, классик аналогу јохдур вә системдәки гаршылыглы тә'сирин тәбиәтиндән асылы дејилдир.

Нәһајәт S-ифадәси (94.21′) илә верилмиш өртмә интегралыдыр.

C_1 вә C_2 әмсаллары үчүн алынмыш (94.29) бирҹинс ҹәбри тәнликләр системинин гејри-тривиал (сыфырдан фәргли) һәлли олмасы үчүн онларын әмсалларындан дүзәлмиш детерминант сыфра бәрабәр олмалыдыр:

$$\begin{vmatrix}\varepsilon-K & \varepsilon S^2-A\\ \varepsilon S^2-A & \varepsilon-K\end{vmatrix}=0 \qquad (93.33)$$

јахуд

$$\varepsilon-K=\pm(\varepsilon S^2-A), \qquad (93.34)$$

Ахырынҹы бәрабәрликдән ε үчүн

$$\varepsilon=\varepsilon_1=\frac{K+A}{1+S^2}, \qquad (93.34')$$

$$\varepsilon=\varepsilon_2=\frac{K-A}{1-S^2}$$

кими ики гијмәт алыныр. (94.29)-да ε әвәзиндә онун ε_1 көкүнүн гијмәтини јазсаг, $C_1=C_2$ вә (94.17) илә (94.22)-дән молекулун ујғун һалы

$$\Psi^{oS}=C_1(\Psi_I^o(1,2)+\Psi_{II}^o(2,1))=\left[2(1+S^2)\right]^{-\frac{1}{2}}(\Psi_I^o+\Psi_{II}^o) \qquad (94.35)$$

симметрик функсија илә, ε_2 көкүнүн гијмәтини јаздыгда исә $C_1=-C_2$ вә молекулун ујғун һалы

$$\Psi^{oA}=C_1(\Psi_I^o(1,2)-\Psi_{II}^o(2,1))=\left[2(1-S^2)\right]^{-\frac{1}{2}}(\Psi_I^o-\Psi_{II}^o) \qquad (94.36)$$

антисимметрик функсија илә тәсвир олунар.

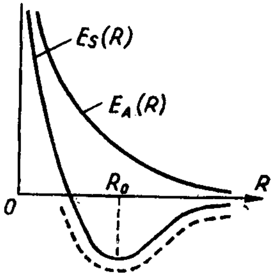
Әсас һалын $2E_n^o$ енержисинә (атомлар гаршылыглы тә'сирдә олмадыгда) олан ε_1 вә ε_2 әлавәләр атомлар јахынлашдыгда електронларын бир-бирилә вә нүвәләрлә гаршылыглы тә'сир нәтиҹәсиндә мејдана чыхан потенсиал енержиләрдир. ε_1 вә ε_2 јәгин ки, атомлararасы R мәсафәсинин функсијасы олмалыдыр. Онлара нүвәләрин дә гаршылыглы тә'сир енержисини әлавә етсәк, молекулун симметрик Ψ^{oS} вә антисимметрик Ψ^{oA} һалларынын там енержиси ујғун олараг

$$E_S(R)=2E_n^o+\frac{e^2}{R}+\varepsilon_1(R)=2E_n^o+\frac{e^2}{R}+\frac{K+A}{1+S^2} \qquad (94.37)$$

вә

$$E_A(R)=2E_n^o+\frac{e^2}{R}+\varepsilon_2(R)=2E_n^o+\frac{e^2}{R}+\frac{K-A}{1-S^2}. \qquad (94.37')$$

$K(R)$, $A(R)$ вә $S(R)$ интегралларына дахил олан $\Psi_a(\vec{r}_a)$ вә $\Psi_b(\vec{r}_b)$ функсијалары әвәзиндә һидрокен атомунун, мәсәлән, әсас һалынын $\Psi_{1S}(\vec{r})$ далға функсијасыны көтүрәрәк, онларын R-дән асылылығыны һесабламаг олар. Бу иш мүәјјән јахынлашмада А.Соколов вә б. тәрәфиндән көрүлмүшдүр. Биз, јалныз $E_S(R)$ вә $E_A(R)$-ин R-дән асылылығыны нүмајиш етдирән әјриләри көстәрмәклә кифајәтләнәҹәјик (шәкил 48). Бу әјриләрдән көрүнүр ки, електронларынын спинләри антипаралел олан атомлар јахынлашдыгҹа $E_S(R)$ енержиси мәнфи галмагла әввәлҹә кичи-



Шәкил 48. Ики һидрокен атомунун симметрик (E_s) вә антисимметрик (E_A) һалларында гаршылыглы тә'сир енержи әјриләри. Гырыг хәтлә тәчрүби әјриси верилир.

лир, бу онларын бир-бирини чәзб етмәсинә ујғун олур. $R = R_o$-да минимум вә $R<R_o$-да кәскин артараг мүсбәт гијмәт алыр, бу исә онларын бир-бирини итәләмәсинә ујғун олур. $R=R_o$ нөгтәсиндә әјринин минимума малик олмасы дајаныглы молекулун јаранмасыны тә'мин едир. Һидрокен атомларында електронларын спинләри паралел олдугда онлар һәмишә бир-бирини дәф едир, беләки онлар јахынлашдыгча $E_A(R)$ енержиси һәмишә мүсбәт галараг кәскин артыр, узаглашдыгда исә тәдричән сәрбәст атомларын $2E_n^o$ енержисинә јахынлашыр. $E_A(R)$-ин әјриси минимума малик олмадығындан електронларын спинләри паралел олан ики һидрокен атому R-ин бүтүн дәјишмә областында бир-бирини итәләдијинә көрә ($E_A^o(R)$ һәмишә мүсбәт галыр) молекул әмәлә кәтирә билмир. Беләликлә, һидрокен молекулу јалныз синглет һалда јаранып.

Һидрокен атомларынын синглет вә триплет спин һалларында гаршылыглы тә'сирин мүхтәлиф характерини кејфијјәтчә дә изаһ етмәк олар. Доғрудан да, триплет һалы тәсвир едән (94.36) координат функсијасы нүвәләри бирләшдирән хәттә перпендикулјар олан вә онун ортасында јерләшән мүстәвидә $\Psi_a(\vec{r}_{a1})\Psi_b(\vec{r}_{b2}) = \Psi_a(\vec{r}_{a2})\Psi_b(\vec{r}_{b1})$ (јә'ни $\Psi_I^o = \Psi_{II}^o$) олдуғундан сыфра бәрабәр олур. Синглет һалы тәсвир едән (94.35) функсијасы исә һәмин мүстәвидә ән бөјүк гијмәт алыр. Бурадан, синглет һалда електронларын нүвәләр арасында олма еһтималы бөјүкдүр. Електронлар вә нүвәләр арасында мејдана чыхан гаршылыглы чазибә гүввәләри дајаныглы молекулун јаранмасына кәтирир. $R<R_o$-да електронлар синглет һалда belә нүвәләр арасында ола билмир вә итәләнмәләри мүшаһидә олунур. Триплет һала кәлдикдә исә електронларын нүвәләр арасында олма еһтималы R-ин кичик гијмәтләриндә belә чох кичикдир. Бунун нәтичәсиндә електронлар арасында мәсафәнин артмасы илә кәскин азалан итәләмә гүввәләри мејдана чыхыр.

$E_S(R)$ енержисинин минимуму нүвәләр арасындакы мәсафәнин $R_o = 0{,}80\,\mathring{A}$ нәзәри гијмәтинә ујғундур, онун тәчрүби гијмәти $0{,}74\,\mathring{A}$-дир. Беләликлә, Һајтлер–Лондон нәзәријјәси кејфијјәтчә тәчрүбәјә ујғун нәтичәјә кәтирсә дә, кәмијјәтчә нәзәријјә илә тәчрүбә арасындакы ујғунлуг о гәдәр дә кифајәтедичи дејил. Лакин бир нечә параметрли вариасија методундан истифадә етмәклә нәзәријјә илә тәчрүбә арасында кифајәт гәдәр дәгиг ујғунлуға кәлмәк олур.

§ 95. НҮВӘЛӘРАРАСЫ МӘСАФӘ САБИТ ГАЛДЫГДА МОЛЕКУЛУН ЕЛЕКТРОН ҺАЛЛАРЫНЫН ТӘСНИФИ

Атомда олдуғу кими, молекулун електрон һалларынын классификасијасы, ујғун һалларда һәрәкәт интегралларынын гијмәтинин верилмәси илә апарылыр. Һәрәкәт интегралларынын сајы исә електронларын һәрәкәт етдији саһәнин вә фәзанын симметријасы илә тә'јин олунур.

Мә'лум олдуғу кими, молекулда електронларын һәрәкәт һалыны тә'јин едән $\breve{H}_e$ Һамилтон оператору илә коммутасија едән бүтүн дикәр операторларын мәхсуси гијмәтләри системин стасионар һалларынын енержиси илә ејни заманда дәгиг өлчүлә билир. Атомда електронлара тә'сир едән сферик симметрик (нүвә нөгтәви јүк һесаб едилдикдә) саһәдән фәргли олараг, ики атомлу молекулда електронлара тә'сир едән саһә силиндрик симметријаја маликдир. Симметрија оху кими ики нүвәни бирләшдирән ох көтүрүлүр вә адәтән z оху симметрија оху бојунча јөнәлдилир.

Молекулу симметрија оху (буна молекул оху да дејилир) әтрафында φ бучағы гәдәр дөндәрсәк (фырлатсаг), електронларын нүвәләрлә вә бир-бири илә гаршылыглы тә'сир енержиләри вә $\breve{H}_e$ Һамилтон оператору дәјишмир. Башга сөзлә, електронларын там һәрәкәт мигдары моментинин симметрија оху үзрә пројексијасы һәрәкәт интегралы олур. Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алынмадыгда, електронларын там орбитал вә там спин моментләринин молекул оху бојунча пројексијалары ајрылыгда сахланыр.

Молекулда електрон системинин стасионар һаллары, атомда олдуғу кими, електронларын там орбитал һәрәкәт мигдары моментинин L_z пројексијасынын мәхсуси гијмәтләринә көрә бир-бириндән фәргләндирилир. Бу моментин молекул оху бојунча пројексијасынын мүтләг гијмәти $L_z = \hbar\Lambda$ кими тә'јин олунур. Бурада Λ=0,1,2,... гијмәтләрини алыр. Λ-нын мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун електрон һаллары јунан һәрфләри илә ишарә едилир: Λ=0-а ујғун һал Σ, Λ=1-ә ујғун һал Π, Λ=2-јә ујғун һал Δ, Λ=3-ә ујғун һал Φ вә и.а. (бу ишарәләр атомун S, P, D,... һалларынын ишарәләринә ујғун сечилир).

Јухарыда дедијимиз кими Λ-нын гијмәти L_z-ин мүтләг гијмәтини тә'јин едир. Лакин системин стасионар һалларынын енержиси һәрәкәт мигдары моментинин z охуна нәзәрән истигамәтиндән асылы олмадығындан $L_z = \hbar\Lambda$ вә $L_z = -\hbar\Lambda$ үчүн енержинин гијмәти ејни олур. Демәли, молекулун електрон һаллары (L_z-ин гијмәтинә көрә) икигат чырлашмыш олур.

Молекулда електрон һаллары S там спинин гијмәти илә дә фәргләндирилир. Там спинин $2S$+1 пројексијасына ујғун һалларын һамысы ејни енержијә малик олур. Спин-орбитал гаршылыглы тә'сир нәзәрә алындыгда електрон һалларынын там спинин пројексијасына көрә чырлашмасы арадан көтүрүлүр вә $2S+1$ һал бир-биринә чох јахын јерләшмиш бир груп тәшкил едир. Беләликлә $2S+1$ әдәди молекулун електрон һалларынын *мултиплетлијини* тә'јин едир. Мултиплетлијин тәртибини көстәрән $2S+1$ әдәди Λ-нын верилмиш гијмәтинә ујғун һәрфин солунда јухарыда јазылыр ($^{2S+1}\Lambda$). $2S+1$ әдәди ваһидә бәрабәр оланда ујғун һал *синглет*, ики оланда *дублет*, үч оланда *триплет* вә и.а. адланыр. Мәсәлән ики ејни атомдан ибарәт һидрокен молекулу јалныз електронларын там спини сыфра бәрабәр оланда, јә'ни $^1\Sigma$ һалында дајаныглы систем тәшкил едир.

$\breve{H}_e$ оператору илә коммутасија едән икинчи оператор молекул охундан кечән истәнилән мүстәвијә көрә електронларын координатларыны әкс етдирән (күзкү әкси) $\breve{P}$ операторудур. Бахылан мүстәвинин z вә y охларындан кечдијини гәбул етсәк, бу әксә көрә електронларын z вә y координатлары ишарәсини дәјишмир. x координатлары исә дәјишир ($x \to -x$-ә кечир). Лакин бу чеврилмәдә кинетик енержи оператору вә координатлардан $(x_i-x_j)^2$ кими квадратик асылы олан гаршылыглы тә'сир оператору дәјишиклијә уғрамыр. Демәли, $\breve{P}$ оператору $\breve{H}_e$ оператору илә коммутасија едир, онларын мәхсуси гијмәтләри ејни заманда мүәјјән гијмәтә маликдир. Молекулда електрон стасионар һаллар Λ-нын вә спинин проjексијасынын мәхсуси гијмәтләриндән башга $\breve{P}$ операторунун $P=\pm 1$ мәхсуси гијмәтләри илә дә сәчијјәләнир. Лакин гејд едәк ки, јухарыдакы күзкү әкси заманы орбитал һәрәкәт мигдары моменти операторунун $\breve{L}_z$ проjексијасы $\breve{P}$ оператору илә коммутасија етмир. Доғрудан да, $\breve{L}_z$-ин

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

ифадәсиндән көрүнүр ки, $\breve{P}$-нин тә'сири x-и $-x$-ә кечирсә дә y координатынын ишарәсини дәјишмир, јә'ни бу әксә көрә $\breve{L}_z$ оператору инвариант галмыр. Она көрә дә јеканә бир $L_z=0$-а ујғун һалдан башга, дикәр стасионар һаллар ејни заманда L_z вә $\breve{P}$ мәхсуси гијмәтләри илә характеризә едилә билмир. Молекулун охундан кечән мүстәвијә көрә ардычыл ики күзкү әкси заманы $\breve{P}^2\Psi = P^2\Psi \doteq \Psi$ -јә кәтирдијиндән, $P^2=1$ вә $P=\pm 1$ алыныр. $\breve{P}$ әксиндә системин $L_z=0$ ($\Lambda=0$)-а ујғун стасионар һалынын далға функсијасы $P=1$ гијмәтиндә ишарәсини дәјишмир, $P=-1$-дә исә ишарәсини дәјишир. Бу ики електрон һалы, ујғун олараг, $^{2S+1}\Sigma^+$ вә $^{2S+1}\Sigma^-$ кими ишарә олунур.

Инди дә фәрз едәк ки, бахылан молекул нүвәләри ејни олан икиатомлу молекулдур. Белә молекулун тәсвири заманы координат башланғычыны нүвәләрарасы $\vec{R}(\vec{R}\|\vec{z})$ мәсафәсинин ортасында јерләшдирсәк, електронларын бүтүн координатларыны инверсија едән, јә'ни $\vec{r}_i$-ләри $-\vec{r}_i$-ләрә чевирән $\breve{P}_i$ оператору $\breve{H}_e$ илә коммутасија едир. Белә чеврилмә молекулда електронларын јердәјишмәсинә, јә'нә мүбадиләсинә еквивалентдир. Мүбадилә операторунун мәхсуси гијмәтләри исә ± 1-ә бәрабәрдир (бах § 81). $P_i=1$-дә ујғун һал чүт функсија, $P_i=-1$-дә исә тәк функсија илә тәсвир олунур. Бурадан чүт һаллар g, тәк һаллар исә u һәрфи илә ишарә олунур. Бу ишарәләр Λ-нын гијмәтинә ујғун һәрфләрин сағында ашағыда јазылыр. Мәсәлән, $L_z=0$-а ујғун һаллар $^{2S+1}\Sigma_g^{\pm}$ вә $^{2S+1}\Sigma_u^{\pm}$ кими ишарә олунур. $\breve{P}_i$ инверсија оператору $\breve{L}_z$ илә коммутасија етдијиндән Λ-нын 1,2 вә и.а. гијмәтләринә ујғун һаллар да тәк вә ја чүт ола биләр. Онлар Π_g, Π_u, Δ_g, Δ_u вә Φ_g, Φ_u ($2S+1$ вуруғу садәлик үчүн бурахылыб) кими јазылыр.

Һидрокен молекулуна кәлдикдә исә онун јалныз електронларынын там спини сыфыр, $\breve{P}$ күзкү әксиндә ишарәсини дәјишмәјән вә електронларын координатларынын инверсијасына көрә чүт функсија илә тәсвир олунан $^1\Sigma_g^+$ һалы дајаныглы һалдыр. Спини $S=1$, $S_z=0$, ± 1 ујғун $^3\Sigma_u^{\pm}$ триплет һалларында молекул атомлара парчаланыр.

Үмумијјәтлә һәр һансы тәбиәтли молекулун јаранмасы заманы системин бу вә ја башга симметријаја малик олмасынын олдугча бөјүк ролу вардыр.

Икиатомлу молекулларын әксәријјәти үчүн бүтүн мүмкүн олан һаллардан еләләри үстүнлүк тәшкил едир ки, ону характеризә едән далға функсијасы бүтүн симметрија чеврилмәләринә көрә инвариант галсын.

§ 96. ИКИАТОМЛУ МОЛЕКУЛУН РӘГСИ ВӘ ФЫРЛАНМА ҺӘРӘКӘТЛӘРИНИН ЕНЕРЖИ СПЕКТРЛӘРИ

Адиабатик јахынлашма методунун икинчи мәрһәләсинә–електрон системинин верилмиш һалында молекулун рәгси вә фырланма һәрәкәтләринин тәдгигинә кечәк. Молекулун нүвәләринин һәрәкәти илә бағлы олан бу һәрәкәти (93.12) тәнлији илә тәсвир олунур вә електронларын һәрәкәт енержиси $E^o(R)=E_o$ бу тәнликдә потенсиал енержи ролуну ојнајыр.

Нүвәләрин нисби һәрәкәтини тәсвир етмәк мәгсәдилә әталәт мәркәзи системинә кечәк:

$$\vec{r} = \frac{M_1\vec{R}_1 + M_2\vec{R}_2}{M_1 + M_2}, \quad \vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2. \tag{96.1}$$

Онда нисби һәрәкәти тәсвир едән тәнлик (93.12)-дән (бах §39)

$$\left[-\frac{1}{2MR^2}\cdot\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial}{\partial R}\right)+\frac{\breve{L}^2}{2MR^2}+E^o(R)\right]\Phi(\vec{R})=E\Phi(\vec{R}) \tag{96.2}$$

шәклиндә јазылар, бурада

$$M=\frac{M_1M_2}{M_1+M_2}$$

системин кәтирилмиш күтләси, M_1 вә M_2 исә нүвәләрин күтләсидир.

$E_o(R)$ енержиси ики нүвә арасындакы мәсафәнин јалныз мүтләг гијмәтиндән, системин һәрәкәт мигдары моментинин квадраты оператору $\breve{L}^2$ јалныз бучаглардан асылы олдуғу үчүн $\breve{L}^2$ системин $\breve{H}_н = \breve{T}_н + E_o(R)$ Һамилтон оператору илә коммутасија едәр, јә'ни онлар үмуми мәхсуси функсијалара маликдир. Она көрә дә $E_o(R)$-ин (96.2) тәнлијинә кәтирдији бүтүн дәјишикликләр јалныз радиал функсијанын аналитик ифадәсиндә өз әксини тапыр. Буна көрә дә (96.2) тәнлијинин һәлли

$$\Phi(\vec{R})=R(R)Y(\theta,\varphi)=\frac{u(R)}{R}Y(\theta,\varphi) \tag{96.3}$$

шәклиндә ахтарыла биләр. Бурада $Y(\theta,\varphi)-\breve{L}^2$ операторунун мәхсуси функсијаларыдыр:

$$\breve{L}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=\hbar^2l(l+1)Y_{lm}(\theta,\varphi). \tag{96.4}$$

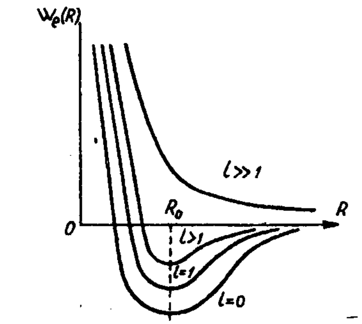
(96.3) вә (96.4) бәрабәрликләри әсасында $u(R)$ функсијасы үчүн

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\cdot\frac{d^2u(R)}{dR^2}+\left[E_o(R)+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2MR^2}\right]u(R)=Eu(R) \tag{96.5}$$

тәнлији алыныр.

$$W_l(R)=E_o(R)+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2MR^2} \tag{96.6}$$

еффектив потенсиал дахил едәк. О, сферик симметрикдир. l=0-да $R=R_o$ нөгтәсиндә ән бөјүк мәнфи (минимум) гијмәтә маликдир вә l-ин чох да бөјүк олмајан гијмәтләриндә молекулун дајаныглығыны тә'мин едир (шәкил 49).



Шәкил 49. Ики атомлу молекулун рәгси вә фырланма һәрәкәтләри арасындакы әлагә.

Молекулун дајаныглы һалындан $x=R-R_o$ кәнара чыхмалары о гәдәр бөјүк дејилсә, ону R_o вә ја x=0 нөгтәси әтрафында x-ин үстләринә көрә сыраја ајырмаг олар:

$$W_l(R)=W_l(0)+\frac{x}{1!}W_l'(0)+\frac{x^2}{2!}W_l''(0)+\ldots \tag{96.7}$$

$R=R_o$-да W_l минимум олдуғундан $W'_l(0)$=0, $W''_l(0)$>0 олар. $W''_l(0)=m\omega_l^2$ (еластиклик әмсалы) кими јени параметр дахил едилсә, (96.5) тәнлији

$$u''(x)+\frac{2M}{\hbar^2}(E'-\frac{m\omega_l^2x^2}{2})u(x)=0 \tag{96.8}$$

шәклә дүшәр. Бурада

$$E'=E-W_l(R_o)$$

$$W_l(R_o)=E_o(R_o)+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2I} \tag{96.9}$$

вә $I = MR_o^2$ – молекулун әталәт моментидир.

(96.8) тәнлији хәтти һармоник оссилјаторун тәнлијидир (бах §35). Хәтти оссилјаторун енержиси квантланыр вә онун спектри

$$E'_k=\hbar\omega_l(k+\frac{1}{2}) \tag{96.10}$$

ифадәси илә верилир, бурада k=0,1,2,... кими там мүсбәт гијмәтләр алыр.

(96.9) вә (96.10)-дан икиатомлу молекулун там енержиси

$$E=E'+W_l(R_o)=E_o(R_o)+\frac{e^2}{R_o}+\hbar\omega_l(k+\frac{1}{2})+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2I}. \tag{96.11}$$

Һидрокен молекулунун бахылан сәвијјәси үчүн бу ифадә

$$E_{nkl}=E_n^o(R)+\frac{e^2}{R_o}+\hbar\omega_l(k+\frac{1}{2})+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2I}=E_n^o(R_o)+\frac{e^2}{R_o}+W_l(R_o) \tag{96.12}$$

шәклинә дүшүр, бурада $E_n^o=E_s^o(R)$-ин аналитик ифадәси (94.37) илә верилмишдир.

Алынмыш (96.11) вә (96.12) ифадәләри тәхмини ифадәләрдир. (96.11)-дә икиатомлу молекулун там енержиси електронларын $E_o(R)$ һәрәкәт енержиси илә нүвәләрин рәгси енержиси вә молекулун бүтөвлүкдә фырланма енержисинин аддитив чәминә бәрабәрдир. Бурада бу үч һәрәкәт нөвү арасындакы коррелјасија нәзәрә алынмыр. Бу онунла әлагәдардыр ки, (96.11) ифадәси чыхарыланда $x=R-R_o$-ын јүксәк тәртибләри илә мүтәнасиб олан һәдләри вә R-ин l-дән асылылығы нәзәрә алынмамышдыр. Она көрә дә (96.11) вә ја (96.12) ифадәләри k вә l-ин јалныз кичик гијмәтләриндә доғрудур.

k-нын $k \gg 1$ гијмәтләриндә рәгси һәрәкәтин амплитуду кифајәт гәдәр бөјүк ола биләр ки, о да атомлararасы рабитәни гырыб молекулу дағыда биләр. Ејни сөзләри фырланма һәрәкәти һаггында да демәк олар. l-ин кифајәт гәдәр бөјүк гијмәтләриндә фырланма һәрәкәти заманы мејдана чыхан мәркәздән гачма гүввәләри дә молекулу парчалаја биләр (шәкил 49-да $k \gg 1$, $l \gg 1$ әјриси).

(96.12)-јә дахил олан $E_s^o(R)$ һидрокен молекулунун дајаныглы таразлыг һалына ујғун $R=R_o$ мәсафәси вә $W_l(R)$-ин икинчи тәртиб төрәмәсинин $R=R_o$-дакы гијмәти, јухарыда көрдүјүмүз кими, нәзәри һесабланыр. Бу кәмијјәтләр тәчрүбәдән дә мә'лумдур. Демәли, нәзәријјәни тәчрүбә илә мүгајисә етмәк олар.

R_o-ы молекулун фырланма спектрләриндән тә'јин етмәк олар, беләки, фырланма һәрәкәтинин ики гоншу сәвијјәси арасындакы

$$E_{l+1} - E_l = \frac{\hbar^2}{I}(l+1)$$

мәсафәси $I = MR_o^2$-дан (әталәт моменти) асылыдыр. Тәчрүби өлчүләр $\frac{\hbar^2}{2I}$ үчүн $\frac{\hbar^2}{2I}$=1,15·10^{-14} ерг гијмәтини алыр. Бурадан $R_o^{тәч} = 0{,}74\,\mathring{A}$, онун нәзәри гијмәти исә $R_o^{нәз} = 0{,}72\,\mathring{A}$-дыр.

Молекулун рәгси һәрәкәтинин ω_l-тезлији $W_l(R)$ еффектив потенсиалынын икинчи тәртиб төрәмәси илә тә'јин олунур. О, тәчрүбәдә молекулун рәгси спектрләриндән тапылыр. Тәчрүбәдә $\hbar\omega_l$ үчүн $\hbar\omega_l$ = =8,75·10^{-13} ерг гијмәти алыныр. Бурадан $\omega_l^{тәч} = 1{,}28\cdot 10^{14}$ сан$^{-1}$, нәзәри гијмәти исә $\omega_l^{нәз} = 1{,}29\cdot 10^{14}$ сан$^{-1}$-дир.

Молекулун диссосиасија енержиси, әсас ($k=0$, $l=0$) һалда олан молекулун ики изолә едилмиш атома парчаламаға лазым олан енержи баша дүшүлүр. Һидрокен молекулунун әсас һалынын енержиси (96.12)-дән

$$E_{S00} = E_s^o(R_o) + \frac{\hbar\omega_l}{2}$$

олдуғундан диссосиасија енержиси $D=-E_{S00}$ олар. D үчүн тәчрүбәдә $D^{тәч}$=4,73 eB, нәзәријјәдә исә $D^{н}$=4,69 eB гијмәтләри алыныр. Бу мүгајисәдән көрүнүр ки, нәзәри нәтичәләр тәчрүбәдә өлчүлән кәмијјәтләрә кифајәт гәдәр јахындыр. Бу да квант нәзәријјәси принсипләринин доғрулуғуна дәлаләт едир.

Јухарыда көрдүк ки, нүвәләрин нисби һәрәкәтини тәсвир едән $\Phi(\vec{R})$ функсија (96.3) ифадәси илә верилир. Һидрокен молекулунда һәр ики атомун нүвәси протондур. Зәррәчикләрин сечилмәзлик принсипинә көрә молекулда нүвәләрин мүбадиләси $\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$ фәргинин ишарәсини дәјишир, $\vec{R}$ мәсафәси $-\vec{R}$ илә әвәз олунур вә сферик $У(\theta,\varphi)$ функсијасы $(-1)^l$ вуруғуна вурулур (бах § 15). Демәли, (96.3) функсијасы нүвәләрин јердәјишмәси заманы

$$\Phi(\vec{R}) \rightarrow \Phi_{kl}(-\vec{R}) = (-1)^l \Phi_{kl}(\vec{R})$$

кими дәјишир, јәни о, l-ин чүт гијмәтләриндә симметрик, l-ин тәк гијмәтләриндә исә антисимметрик олур.

Һидрокен молекулунда нүвәләрин спинләри паралелдирсә, онларын там спини ваһид ($S=1$), $\Phi(\vec{R})$ координат далға функсијасы антисимметрик (спин функсијалары симметрик) олур. Белә һидрокен ортоһидрокен адланыр вә о, јалныз $l=1,3,5,...$ фырланма һәрәкәти һалларында ола билир. Нүвәләрин спинләри антипаралел, там спини сыфра бәрабәр олдугда ($S=0$) исә $\Phi(\vec{R})$ координат функсијасы симметрик (спин функсијасы антисимметрик) олур. Белә һидрокен параһидрокен адланыр вә о јалныз $l=0,2,4,...$ фырланма һәрәкәти һалларында ола биләр. Бу сәбәбдән онларын оптик хассәләри вә диссосиасија енержиләри фәргләнир.

Спинләри паралел олан ики зәррәчикли системин мүмкүн олан һалларынын сајы, спинләри антипаралел олан системин һалларынын сајындан үч дәфә чох олдуғундан, отаг температурунда ади һидрокен газы 25% параһидрокен вә 75% ортоһидрокен газларынын гарышығындан ибарәтдир.

Температур ашағы дүшдүкчә, параһаллар әсас һал олдуғундан, гарышыгда параһидрокенин фаизи артмаға башлајыр вә мүтләг сыфра јахын бүтүн һидрокен параһидрокенә чеврилир. Белә алынмыш тәмиз параһидрокен чох дајаныглы олур вә гејри-таразлыгдакы гырышыгда үч һәфтәјә јахын өз дајаныглығыны сахлаја билир. Тәмиз ортоһидрокен алмаг мүмкүн олмамышдыр.

Һидрокен молекулунда нүвәләрдән бири дејтериум (D_2) оларса, протон илә дејтериум ејни зәррәчикләр олмадығындан, молекулун нүвә функсијасы нүвәләрин јердәјишмәсинә көрә нә симметрик вә нә дә антисимметрик олмалыдыр. Белә молекул l-ин истәнилән гијмәтинә ујғун олан һаллара малик ола биләр. Бурадан чыхыр ки, H_2 молекулу илә HD молекулунун спектрләри бир-бириндән фәргләнмәлидир. Бу фәрг тәчрүбәдә, доғрудан да, мүшаһидә олунур вә беләликлә, квант механикасынын әсас принсипләриндән бири—ејни зәррәчикләрин сечилмәзлик принсипи бир даһа тәсдиг едилмиш олур.

§ 97. ИКИАТОМЛУ МОЛЕКУЛУН ШҮАЛАНМА СПЕКТРЛӘРИ

§ 96-да көстәрдик ки, адиабатик јахынлашмада молекулун там енержиси үч бир-бириндән асылы олмајан енержиләрин адитив чәминә бәрабәрдир. Там енержи үчүн (96.11) вә ја (96.12) ифадәләрини нүвәләрарасы R мәсафәнин R_o әтрафында кичик дәјишмәләри үчүн алмышдыг. Молекул, шүабурахма вә шүаудма просесләри заманы өз фәрдилијини сахлајырса, һәмин дүстурларда үмумилији позмадан R_o-ы R илә әвәз етмәк олар. Онда (96.12) дүстуру

$$E_{nlk}(R)=E_n(R)+E_k^p+E_l^\Phi \tag{97.1}$$

кими јазылар. Бурада

$$E_n(R)=E_{ns}^o(R)+\frac{e^2}{R} \tag{97.2}$$

нүвәләрин Кулон гаршылыглы тә'сир енержиси дахил олмагла електронларын һәрәкәт енержиси,

$$E_l^\Phi=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) \tag{97.3}$$

молекулун бүтөвлүкдә фырланма енержиси ($I=mR^2$ – молекулун әталәт моменти, $\frac{\hbar}{2I}$ – фырланма сабитидир) вә

$$E_k^p=h\omega_l^p(k+\frac{1}{2}) \tag{97.4}$$

молекулун дахилиндә нүвәләрин рәгси енержисидир.

k квант әдәди, l-ин верилмиш гијмәтиндә рәгси һәрәкәт һалларынын енержисинин артмасы истигамәтиндә дүзүлүшүнү тә'мин едән әдәддир, о, рәгс квант әдәди адланыр.

Нүвәләрин $W_l(x)$ еффектив потенсиалынын икинчи төрәмәсинин $x=0$, ($R=R_o$) нөгтәсиндәки гијмәти илә тә'јин олунан ω_l^p рәгс тезлији $\frac{1}{\sqrt{M}}$ илә мүтәнасиб олдуғундан гоншу рәгс сәвијјәләри арасындакы ΔE^p фәрги $\frac{1}{\sqrt{M}}$, (97.3)-дән гоншу фырланма сәвијјәләри арасындакы ΔE_l^Φ фәрги $\frac{1}{M}$ ($I=MR^2$-да) илә мүтәнасибдир, електронларын гоншу һәрәкәт һалларынын енержиләри арасындакы $\Delta E_{ел}$ фәрги исә үмумијјәтлә M-дән асылы дејилдир. Електрон күтләсинин протонун күтләсинә олан $\frac{m}{M}$ нисбәтинин 10^{-3} тәртибиндә олдуғуну нәзәрә алсаг,

$$\Delta E_{ел}>>\Delta E^p>>\Delta E^\Phi \tag{97.5}$$

олур. Бурадан чыхыр ки, нүвәләрин рәгси һәрәкәти електрон сәвијјәләрини онлара нисбәтән сых јерләшмиш сәвијјәләрә, фырланма һәрәкәти исә өз нөвбәсиндә рәгси һәрәкәтин енержи сәвијјәләрини даһа сых јерләшмиш сәвијјәләрә парчалајыр.

ΔE^p фәрги $\Delta E_{ел}$-дан вә ΔE^Φ фәрги исә ΔE^p-дән мин дәфәләрлә кичик олдуғундан молекулјар спектрләр үч нөв олур: 1) јалныз фырланма һәрәкәтинин характеринин дәјишмәси илә әлагәдар олан—фырланма (ротасија) спектрләри; 2) фырланма вә рәгси һәрәкәтләрин дәјишмәси илә әлагәдар олан—фырланма-рәгс (ротасија—вибрасија) спектрләри вә 3) електронларын һәрәкәт һалларынын дәјишмәси нәтичәсиндә молекулун фырланма вә рәгси һәрәкәт һалларынын дәјишмәси һесабына јаранан молекулун електрон спектрләридир.

Молекулун кифајәт гәдәр кичик һәјәчанланмалары нәтичәсиндә јалныз фырланма спектри мүшаһидә олуна биләр. Молекулун фырланма һәрәкәти (96.4) илә тә'јин олунан Y_{lm} (θ,φ) сферик функсијалары илә тәсвир олундуғундан, фырланма енержи сәвијјәләри арасында баш верә биләчәк кечидләр l квант әдәди үчүн § 42-дә тапылмыш сечмә гајдасы илә сечилир. Бу сечмә гајдасына көрә јалныз елә кечидләр мүмкүндүр ки, онлар үчүн $\Delta l=\pm 1$ шәрти өдәнилсин.

Бу кечидләрдә шүаланан тезликләр $\omega_{l,l+1}=\frac{E_l-E_{l+1}}{\hbar}$ вә $\omega_{l,l-1}=\frac{E_l-E_{l-1}}{\hbar}$ кими тә'јин олунур. Беләликлә, фырланма спектрләриндә $\omega_{l,l+1}$ вә $\omega_{l,l-1}$ тезликләрә ујғун ики будаг мүшаһидә олунур.

Електрон һаллары дәјишмәдији һалда шүаланан фырланма-рәгси спектрләри илә таныш олаг. Хәтти осилјаторун нәзәријјәсиндән мә'лумдур ки, k рәгс квант әдәдинин јалныз $\Delta k=\pm 1$ дәјишмәсинә ујғун кечидләр мүмкүндүр.

Шүаланма спектри јухары E_k рәгс сәвијјәләриндән ашағы E_{k-1} сәвијјәләринә кечидләрлә әлагәдардыр. l-квант әдәди $l+1$ вә $l-1$ кими ики истигамәтдә дәјишдијиндән фырланма-рәгси спектрләриндә шүаланан тезликләр (97.1) –(97.4)-дән

$$\omega = \frac{E_k - E_{k-l}}{\hbar} + \frac{E_l - E_{l'}}{\hbar} = \omega^p + \frac{\hbar}{2I}\left[l(l+1) - l'(l'+1)\right] \quad (97.6)$$

Бахылан һалда фәрз олунур ки, бу кечидләр заманы молекулун әталәт моменти дәјишмир, јә'ни l-ин $l+1$ вә $l-1$ дәјишмәләриндә ω^p сабит галыр.

$l'=l+1$ -дә спектрин биринчи будағынын тезликләри

$$\omega_1 = \omega^p - \frac{2\hbar}{2I}(l+1), \quad (97.7)$$

l'-ин $l-1$ -дә икинчи будағын тезликләри

$$\omega_2 = \omega^p + \frac{2\hbar}{2I}l \quad (97.8)$$

кими тә'јин олунур. Икинчи будагда l сыфра бәрабәр ола билмәз. Онда $l'=-1$ оларды. Бу исә мүмкүн дејил, чүнки l' мүсбәт кәмијјәти тә'јин едир.

ω^p-ин верилмиш гијмәтиндә ω_1 вә ω_2 тезликләринин јерләшмә ардычыллығына бахсаг, ω_1 тезлији $\omega^p - \frac{\hbar}{I}$ гијмәтиндән башлајараг азалмаға, ω_2 тезлији исә $\omega^p + \frac{\hbar}{I}$-дән башлајараг артмаға башлајыр. Она көрә дә чох вахт $\omega_1 = \omega^-$ вә $\omega_2 = \omega^+$ кими ишарә едирләр. Һәр ики спектрин хәтләри арасындакы мәсафә $\frac{\hbar}{I}$-јә, будагларын хәтләри арасындакы мәсафә исә $\frac{2\hbar}{I}$-јә бәрабәрдир. ω^- тезликләринә ујғун спектр хәтләринин чохлуғуна P будаг, ω^+ тезликләринә ујғун спектр хәтләринин чохлуғуна исә R будаг дејилир.

Молекулун гурулушунун өјрәнилмәсиндә фырланма-рәгс спектрләринин бөјүк әһәмијјәти вардыр. Онларын васитәсилә молекулларын әталәт моментини, газын изотоп тәркибини тә'јин етмәк мүмкүндүр, беләки, мүхтәлиф изотоплардан тәшкил олунмуш молекулларын әталәт моментләри мүхтәлифдир. Бу тезликләр спектрин инфрагырмызы һиссәсиндә јерләшир.

Нәһајәт молекулда електрон енержи сәвијјәләри арасында баш верән кечидләрә ујғун шүаланма спектринин тәһлилинә кечәк. Бу спектрин характери јухарыда бахдығымыз инфрагырмызы спектрдән кәскин фәргләнир.

Бу спектрин шүаланма тезликләри (97.1)-дән

$$\omega = \frac{E_{nlk} - E_{n'l'k'}}{\hbar} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} + \frac{E_k - E_{k'}}{\hbar} + \frac{E_l - E_{l'}}{\hbar}, \quad (97.9)$$

јахуд (97.3) вә (97.4)-дән

$$\omega = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} + \omega_k^p(k+\frac{1}{2}) - \omega_{k'}^p(k'+\frac{1}{2}) + \frac{\hbar}{2I}l(l+1) - \frac{\hbar}{2I'}l'(l'+1) \quad (97.10)$$

кими тә'јин олунур. Гејд едәк ки, $\omega_k^p \neq \omega_{k'}^p$ вә $I \neq I'$-дир. ω^p вә молекулун әталәт моменти $I = MR^2$ молекулун електрон һаллары илә тә'јин олунур. Бу һалларын дәјишмәси ω^p вә I-нин дә дәјишмәсинә кәтирир.

Електрон һаллары арасындакы кечидләрдә молекулун енержисинин дәјишмәси кифајәт гәдәр бөјүк олдуғундан, електрон спектриндә шүаланан тезликләр спектрин көрүнән һиссәсиндә јерләшир. k вә k' квант әдәдләринин верилмиш гијмәтинә ујғун спектр хәтләринин чохлуғу *золаг* адланыр. Золаг өзү үч будагдан тәшкил олунур. Бу будаглар l' квант әдәдинин $l'=l+1$, $l'=l$ вә $l'=l-1$ гијмәтләринә ујғундур. Јухарыда дедијимиз кими $\Delta l = l - l' = -1$-ә ујғун будаг R, $\Delta l = 1$-ә ујғун будаг P, $\Delta l = 0$-а ујғун сыфырынчы будаг исә Q будағы адланыр. Q-будағыны тәшкил едән тезликләр фырланма сәвијјәләри арасындакы кечидләрин һесабына јох, атомун дахилиндә баш верән кечидләр заманы молекулун әталәт моментинин дәјишмәси һесабына шүаланыр.

$l'=l-1$ -ә ујғун R будағынын тезликләри (97.10)-дан

$$\omega_1 = \omega^+ = \omega_{nk} + Bl^2 + Cl \quad (97.11)$$

олар. Бурада

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} + \omega_k(k+\frac{1}{2}) - \omega_{k'}(k'+\frac{1}{2}),$$
$$B = \frac{\hbar}{2}\frac{I-I'}{I \cdot I'}, \; C = \frac{\hbar}{2}\frac{I+I'}{I \cdot I'}. \quad (97.12)$$

R-будағы јухары сәвијјәләрдән ашағы сәвијјәләрә олан кечидләрин нәтичәсидир. О, *мүсбәт будаг* да адланыр.

$l'=l+1$-ә ујғун икинчи P-будағын тезликләри

$$\omega_1 = \omega^- = \omega_{nk} + B(l+1)^2 - C(l+1) \quad (97.13)$$

ками тә'јин олунур. Бу будаг ашағы сәвијјәләрдән јухары сәвијјәләрә олан кечидләрин нәтичәсидир. О, *мәнфи будаг* да адланыр.

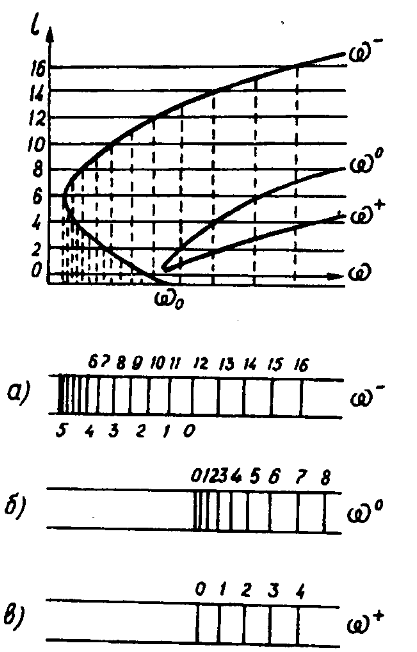
Нәһајәт $l'=l$ -ә ујғун Q-будағынын тезликләри

$$\omega^o = \omega_{nk} + B(l^2 + l) \qquad (97.14)$$

олур.

(97.11), (97.13) вә (97.14)-дән көрүнүр ки, һәр үч будағын тезликләри l-квант әдәдинин квадраты илә мүтәнасибдир. Тезликләрин спектрдә јерләшмә гајдасыны мүәјјән етмәк үчүн онлары график тәсвир едәк. Бунун үчүн ординат охунда l -ин гијмәтләри, абсис охунда исә ω-нын гијмәтләри кәстәрилир (шәкил 50). Шәкилдә кәстәрилән параболалар $I>I'\ (B>0)$ һалына ујғундур.

Бу диаграм васитәсилә чох асанлыгла тәчрүбәдә мүшаһидә олунан тезликләри алмаг олар. l -ин мүхтәлиф гијмәтләринә ујғун үфүги хәтләр илә параболанын кәсишдији нөгтәләрин үфүги оха проjексијасыны кәтүрсәк, тезликләрин мүшаһидә олунан гијмәтини аларыг (бах: шәкил 50 *а, b, c*).



Шәкил 50. Молекулларын золаглы спектрләри: ω^+— мүсбәт R будағы; ω^-—мәнфи P—будағы, ω_o— Q будаг.

Диаграмдан көрүнүр ки, молекулун електрон спектрләриндә ω_{nk} електрон-рәгс тезлији илә фырланма тезликләринин топланмасы нәтичәсиндә спектрдә бир хәтт әвәзинә солдан–кичик тезликләр тәрәфдән кәскин мәһдудланан, сағдан исә јүксәк тезликләр тәрәфдән сәрһәдди јајылмыш бүтөв золаг алыныр.

$I< I'\ (B< 0)$ һалында исә парабола әкс истигамәтә чеврилмиш олур. Онда сағдан–јүксәк тезликләр тәрәфдән кәскин мәһдудланан, солдан исә кичик тезликләр тәрәфдән исә сәрһәди јајылмыш бүтөв золаг алыныр.

$I=I'\ (B=0)$ һалында исә $\omega^o = \omega_{nk}$ олдуғундан спектр ω_{nk} тезлијинә ујғун хәтләрдән ибарәт олур вә фырланма спектринә ујғун золаглар мүшаһидә олунмур.

Гејд едәк ки, јухарыдакы ганунаујғунлуглардан кәнара чыхмалар да мүшаһидә олунур. Електрон сәвијјәләри чырлашмыш олдугда спектрдә үчдән чох будаглар мүшаһидә олунур, бә'зән дә Q-будағы үмумијјәтлә мүшаһидә олунмур.

§ 98. КИМЈӘВИ РАБИТӘ (ВАЛЕНТЛИК)

Кимјәви рабитәнин, јә'ни валентлијин квант механикасы бахымындан изаһына кечәк. Валентлик дедикдә бир елементин атомунун дикәр елементләрин бир нечә атому илә бирләшәрәк молекул әмәлә кәтирмә хассәсинә дејилир. Һәр бир атом мүәјјән валентлијә маликдир. Атомлар бирләшәрәк молекул әмәлә кәтирәндә валентлик гаршылыглы дојмалыдыр, јә'ни бахылан атомун һәр бир кимјәви рабитәси (валентлији) икинчи атомун кимјәви рабитәсинә ујғун олмалыдыр.

Елементләрин кимјәви хассәләринин тәдгигиндә квант механикасынын илк мүвәффәгијјәти һетерополјар рабитәнин нәзәри изаһы олмушду. Һетерополјар рабитәнин нәзәријјәсинә (*Коссел нәзәријјәсинә*) көрә һетерополјар кимјәви бирләшмә, атомларын харичи тәбәгәләриндәки електронларын реаксијада иштирак едән атомлар арасында јенидән пајланмасы нәтичәсидир вә һетерополјар рабитәнин сајы, јә'ни атомун валентлији реаксија заманы бир атомун дикәр атома вердији вә ја икинчинин биринчидән алдығы електронларын сајына бәрабәрдир. Електронлары верән атомун валентлији мүсбәт, алан атомун валентлији мәнфи һесаб олунур.

Беләликлә, кимјәви рабитә мүхтәлиф атомлара мәхсус олан електронларын үмумиләшмәси нәтичәсиндә јараныр. Атомлар о вахт реаксијаја кирир ки, јараначаг системин (молекулун) енержиси атомларын енержиләри чәминдән аз олсун. Енержинин азалмасы исә молекулун електрик өртүјүндә електрик јүкүнүн јенидән пајланмасы нәтичәсиндә баш верир вә бу атомлararасы фәзада електрон булудунун сыхлығы артыр. Ахырынчысы исә мүбадилә енержиси һесабына електронларын һәрәкәтиндә спинләрин коррелјасијасы нәтичәси олур.

Квант механикасынын принсипләри әсасында јалныз һетерополјар рабитәни јох, һомеополјар рабитәнин дә нәзәри әсасларыны вермәк мүмкүн олмушдур. Бу, илк дәфә H_2 һидрокен молекулу тимсалында Һајтлер–Лондона мүјәссәр олмушдур (бах §94). Һајтлер–Лондон нәзәријјәси мүасир *ковалент* (һомеополјар) рабитәнин әсасыны тәшкил едир. Бу нәзәријјәјә көрә һидрокен молекулу јалныз валент електронларын спинләринин бир-бирини компенсасија етмәси нәтичәсиндә јараныр, јә'ни молекулда електрон системинин там спини сыфра бәрабәр $(\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 = 0)$ олур вә һидрокен молекулу ${}^1\Sigma_g^+$ һалында јараныр.

Һидрокен молекулу үчүн алынмыш нәтичәни үмумиләшдирәрәк иддиа етмәк олар ки, истәнилән системдә ковалент рабитә валент електронларын спинләринин компенсасијасы нәтичәсиндә јараныр. Бу сәбәбдән ковалент рабитә бә'зән *спин-рабитә* дә адланыр.

Бурадан бир нәтиҹә олараг чыхыр ки, кимјәви бирләшмәләрдә һәр бир кимјәви рабитә спинләри антипаралел олан вә араларында мүбадилә гүввәләри (мүбадилә енержиси) тә'сир едән бир ҹүт електронун ваһид системдә бирләшмәси (ҹүтләшмәси) нәтиҹәсидир.

Електронлар арасындакы гаршылыглы тә'сирин мүбадилә характерли олмасы нәтиҹәсиндә кимјәви рабитәнин күҹү електронларын далға функсијаларынын өртмә дәрәҹәсиндән асылы (бах §94) олур. Она көрә дә кимјәви гүввәләр атомлар арасындакы мәсафә артдыгҹа кәскин азалыр.

Атомларын кимјәви хассәләрини онларын долмамыш хариҹи електрон өртүкләриндәки ҹүтләшмәмиш (неспаренный) електронлар тә'јин едир. Атомун валентлији белә ҹүтләшмәмиш електронларын сајы илә тә'јин олунур. Башга сөзлә, атомун кимјәви валентлијинин әдәди гијмәти онун спининин ики мислинә бәрабәрдир.

Һомеополјар бирләшмә јарананда валент електронлар һәр ики атома ејни дәрәҹәдә аид олан ваһид бир системдә бирләшир вә атомларын хариҹи долмамыш өртүкләри долмаға чалышыр. Башга сөзлә, електронлар елә ҹүтләшир ки, онларын спинләри гаршылыглы компенсасија етсин вә молекулун там спини сыфра бәрабәр олсун. Әсас һалда там спини сыфра бәрабәр олан молекуллар даһа дајаныглы олур. Лакин бу иддиадан кәнарачыхмалар да мүшаһидә олунур. Мәсәлән, O_2 молекулунун әсас һалы $^3\Sigma(S=1)$, NO молекулунун әсас һалы $^2\Pi(S=\frac{1}{2})$ вә и. а. олур.

Атомларын долмуш тәбәгә вә өртүкләри арасында һәмишә итәләмә гүввәләри мејдана чыхыр. Бу фактын ион (һетерополјар) рабитә үчүн мүһүм әһәмијјәти вардыр.

Билдијимиз кими, ион рабитә заманы атомлардан бири електронуну (вә ја бир нечә електронуну) дикәр атома верәрәк мүсбәт, електрону алан атом исә мәнфи иона чеврилир. Бу заман һәр ики атомун хариҹи тәбәгә вә ја өртүкләри долур. Атомлар молекулун тәркибинә мүсбәт вә мәнфи ионлар кими дахил олдуғундан, онлар арасында Кулон гаршылыглы ҹазибә гүввәләри тә'сир едир. Лакин ионлар бир-биринә јахынлашдыгда кичик мәсафәләрдә, долмуш електрон тәбәгәләри (өртүкләри) һесабына онлар арасында итәләмә гүввәләри мејдана чыхыр вә бу ики гүввәнин тә'сири нәтиҹәсиндә молекулун дајаныглығы тә'мин олунур.

Беләликлә, атомлар ковалент рабитә нәтиҹәсиндә о вахт молекул јарада билир ки, атомлардан биринин спини мүәјјән истигамәтдә јөнәлмиш електрону, дикәр атомун спини биринҹинин әксинә јөнәлмиш електронла мүбадиләдә иштирак етсин.

Јухарыда гејд етдик ки, кимјәви рабитә дојма характерлидир, јә'ни һәр бир атом сонлу сајда дикәр атомлары өзүнә бирләшдирә биләр. Бу онунла әлагәдардыр ки, атомун хариҹи тәбәгәсиндә електронларын сајы мәһдуддур. Онлардан бир гисми бир-бирилә рабитәдә олур. Ејни бир квант һалында олан ики електронун спинләри бир-биринин әксинә јөнәлмиш олур вә онлар кимјәви рабитәдә иштирак етмир. Кимјәви рабитә хариҹи тәбәгәдә ҹүтләшмәмиш електронларын варлығы нәтиҹәсин-

дә мејдана чыхыр. Һәр бир атом хариҹи тәбәгәдә спинләри сәрбәст јөнәлмиш електронларын сајы гәдәр ковалент рабитәдә иштирак едә биләр. Бунунла да атомун бир, ики вә и.а. валентли олмасы мүәјјән олунур.

Гејд едәк ки, ејни бир атом мүхтәлиф валентлијә малик ола биләр. Бу, онун һансы (әсас вә ја һәјәҹанланмыш) һалда олмасындан асылыдыр.

Бу бахымдан дөври системин мүхтәлиф групларында елементләрин һансы валентлијә малик ола биләҹәји һаггында гыса мә'лумат верәк.

Биринҹи груп елементләрин атомларынын хариҹи өртүјүнүн електрон гурулушу (конфигурасијасы) ^{1}s-дир. Атомун бу һалда спини 1/2-ә бәрабәрдир (дахили өртүкләрдә спинләр гаршылыглы компенсасија едилмиш олур). Биринҹи групун елементләри кимјәви реаксијаларда, демәк олар ки, һәмишә бирвалентли олур. Онларын реаксијаларда ваһиддән бөјүк валентликлә иштирак етмәси үчүн гапалы өртүкдәки електронлардан бирини даһа јухарыда јерләшән өртүјә (сәвијјәјә) кечирмәк лазымдыр. Бу груп елементләрин белә ән јахын өртүјү хејли узагда (енержи ваһидләриндә) јерләшдијинә көрә һәјәҹанланмыш атом дајаныглы молекул јарада билмир.

Иkинҹи груп елементләрин атомларынын хариҹи өртүјүнүн електрон гурулушу ^{2}s-дир. Онларын әсас һалда спини сыфра ($S=0$) бәрабәрдир вә ади шәраитдә кимјәви реаксијаларда иштирак едә билмир. Лакин бу групун атомларында електрон гурулушу $^{1}s^{1}p$ олан долмамыш өртүк ^{2}s – өртүјүнә кифајәт гәдәр јахын јерләшдијиндән белә һалда олан атомларын спини ваһидә ($S=1$) валентлији исә икијә бәрабәр олур вә онлар кимјәви реаксијаларда елә бу валентлији нүмајиш етдирир.

Үчүнҹү груп елементләрин атомларынын хариҹи өртүјүнүн електрон гурулушу $^{2}s^{1}p$-дир. Атомларынын әсас һалда спини 1/2, валентлији ваһидә бәрабәр олур. Лакин долмуш ^{2}s өртүјүндән електрону она кифајәт гәдәр јахын јерләшән $^{1}s^{2}p$ өртүјүнә кечирмәклә атому асанлыгла һәјәҹанландырмаг олур. Бу өртүкдә атомун спини 3/2, валентлији исә 3-дүр. Она көрә дә атомлар кимјәви реаксијаларда бир вә үч валентлә иштирак едир. Буну да гејд едәк ки, атомун сыра сајы бөјүдүкҹә, онларын бир валентлији даһа күҹлү бүрузә верир.

Дөрдүнҹү груп елементләрин атомларынын хариҹи өртүјүнүн електрон гурулушу $^{2}s^{2}p$, спини ваһидә бәрабәрдир. Буна јахын һәјәҹанланмыш һалын гурулушу исә $^{1}s^{3}p$ -дүр. Бу һалын спини 2-јә бәрабәрдир. Бу груп елементләрин атомлары ја 2, вә ја да 4 валентли олур. Үчүнҹү групда олдуғу кими, групун башланғыҹ елементләринин валентлији 4, сыра сајы артдыгҹа ики валентлилик даһа еһтималлы олур.

Бешинҹи груп елементләрин атомларынын хариҹи өртүјүнүн електрон конфигурасијасы $^{2}s^{3}p$, спини 3/2, валентлији 3-ә бәрабәрдир. Буна јахын һәјәҹанланмыш һал сонра кәлән тәбәгәдә јерләшдијиндән араларындакы енержи фәрги бөјүкдүр. Лакин, атому сонра кәлән s-өртүјүнә гәдәр һәјәҹанландырсаг, өртүјүн електрон конфигурасијасы $^{1}s^{3}p^{1}s$, спини 5/2, валентлији 5 олур. Тәҹрүбә көстәрир ки, бу групун атомлары белә һәјәҹанланмыш һалда да дајаныглы бирләшмә јарада билир. Беләликлә бу групун елементләри 3 вә 5 валентли олур.

Алтынчы груп елементләрин атомларынын әсас һалы s^2p^4-дүр. p – өртүјүндәки ики електронун спинләри бир-бирини компенсасија етдијиндән, атомларын әсас һалда спини 1, валентлији 2-јә бәрабәрдир. Бир дәфә p – өртүкдән, икинчи дәфә исә s-өртүкдән бир електрон, сонракы тәбәгәнин s вә p–өртүјүнә кечирилсә, атом $s^2p^3s^1$ вә $s^1p^3s^1p^1$ кими ики мүхтәлиф һәјәчанланмыш һал кәсб едәр. Бу һалларда атом 4 вә 6 валентли олур. Бу групда ики валентли оксикендән башга галан атомлар јүксәк валентә малик ола билир.

Једдинчи груп елементләрин атомларынын харичи өртүјүнүн електрон гурулушу s^2p^5, спини 1/2, валентлији ваһиддир (p- сәвијјәсиндә дөрд електронун спинләри икишәр компенсасија олунур). Лакин бу групун елементләри спинләри 3/2, 5/2, 7/2, валентлији 3, 5, 7 олан ујғун $s^2p^4s^1$, $s^2p^4s^1p^1$ вә $s^1p^3s^1p^2$ һәјәчанланмыш һалларда олдугда да дајаныглы бирләшмәләр јарада билир. Групун биринчи елементи олан бир валентли фтордан башга дикәр елементләрин атомлары јүксәк валентлијә малик ола билир.

Нәһајәт харичи s вә p өртүкләри долмуш сәккизинчи груп ементләрин атомларынын әсас һалы s^2p^6, спин S=0 вә валентлији сыфырдыр. Сонракы тәбәгә хејли узагда јерләшдијиндән атомун јухарыдакы тәбәгәдәки өртүјә кечид еһтималы сыфырдыр. Бу групун атомлары кимјәви реаксијаларда иштирак етмир вә груп елементләри тә'сирсиз газлар тәшкил едир.

Атомлар молекул әмәлә кәтирәндә онларын долмуш өртүкләринин електрон сыхлығы дәјишмир, долмамыш өртүкләрин електрон сыхлығы исә кәскин дәјишиклијә уғрајыр. Һетерополјар рабитәдә валент електронларын һамысы бир атомдан дикәринә кечир вә молекул валент електронларын сајына бәрабәр електрик јүкүнә малик мүсбәт вә мәнфи ионлардан тәшкил олунур. Биринчи групун елементләринин валентлији мүсбәтдир (онлар електрону өзләриндән дикәр атома верир). Групдан-групa кечдикчә атомларын мүсбәт валентлији зәифләјир, мәнфи валентлији (електрону гәбул етмәк) күчләнир. Једдинчи груп елементләринә исә мәнфи валентлик даһа чох хасдыр.

Һомеополјар рабитәдә молекул тәшкил едән атомларын валент електронлары атомлар арасы фәзада ән чох електрон сыхлығы јаратмагла һәр ики атома аид олур вә нејтрал атомлар шәклиндә молекулда бирләшир.

§ 99. ВАН-ДЕР-ВААЛС ГҮВВӘЛӘРИ

Кимјәви рабитәни јарадан вә тә'сир радиусу 1 Å тәртибиндә олан гүввәләрдән башга нејтрал атомлар вә молекуллар арасында нисбәтән бөјүк мәсафәләрдә јени тәбиәтли хүсуси гүввәләр дә тә'сир едир. Бу гүввәләр *Ван-дер-Ваалс гүввәләри* адланыр.

Онлар, мәсәлән тә'сирсиз газларын атомлары арасында гаршылыглы тә'сири, онларын бәрк вә маје һалына кечмәсини тә'мин едир; бәрк чисимләрин сәтһиндә молекулларын адсорбсијасына, диггәтлә чилаланмыш

сәтһли ики чисми чох кичик мәсафәјә гәдәр јахынлашдыгда онларын јапышмасына сәбәб олур вә и. а.

Бу гүввәләрин тәбиәтини ашкарламаг үчүн бир-бириндән кимјәви рабитә гүввәләринин тә'сир радиусуна нисбәтән бөјүк мәсафәдә јерләшмиш ики нејтрал атома бахаг. Нејтрал атомда електрик јүкүнүн орта һесабла сферик-симметрик пајландығыны гәбул едәк. Белә атом орта дипол моментинә малик олмур. Лакин, ән садә һидрокен атому үчүн $\bar{\bar{d}}$ дипол моменти операторунун ихтијари һала ујғун $\vec{d}_{mn}$ матриса елементини һесабласаг, гејри-диагонал елементләрин сыфырдан фәргли ($\vec{d}_{nn}$ –диагонал елементләри јәгин ки, сыфыр олар) олдуғуну көрәрик. Бу факты әјани олараг, атомда електронларын квант-механики һәрәкәти заманы дипол моментинин ани јараныб-итмәси нәтичәсиндә онун орта гијмәтинин сыфра бәрабәр олмасы кими баша дүшмәк олар. Башга сөзлә, електронларын квант-механики һәрәкәти дипол моментинин ани јаранмасына вә бу сәбәбдән дә ики атом арасында дипол гаршылыглы тә'сирин мејдана чыхмасына сәбәб олур.

Бу гаршылыглы тә'сир енержиси квант механикасында һәјәчанланма нәзәријјәси васитәси илә һесаблана билир. Доғрудан да, һәјәчанланма оператору олараг ики диполун гаршылыглы тә'сир оператору

$$\breve{V}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,R)=\frac{1}{R^3}\left(\vec{d}_1\vec{d}_2-\frac{(\vec{d}_1\vec{R})(\vec{d}_2\vec{R})}{R^2}\right)$$

көтүрәк, бурада $\vec{d}_1=-e\vec{r}_1$, $\vec{d}_2=-e\vec{r}_2$ – електронларын дипол моментләри, $\vec{r}_1$ вә $\vec{r}_2$ – електронларын ујғун атомларын мәркәзиндән олан мәсафәси, $\vec{R}$ – нүвәләрарасы мәсафәдир. Һәјәчанланма нәзәријјәсинин биринчи јахынлашмасында бахылан һәјәчанланмаја ујғун енержи

$$E^{(1)}=V_{n_1n_2,n_1n_2}=\frac{e^2}{R^3}\int\Psi^{+o}_{n_1n_2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)\left[\vec{r}_1\vec{r}_2-\frac{(\vec{r}_1\vec{R})(\vec{r}_2\vec{R})}{R^2}\right]\Psi^{o}_{n_1n_2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)dV_1dV_2$$

олар. Бурада $\Psi^{o}_{n_1n_2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ –далға функсијасынын

$$\Psi^{o}_{n_1n_2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)$$

ифадәсини нәзәрә алсаг,

$$\int\Psi^{+}_{n_1}(\vec{r}_1)\vec{r}_1\Psi_{n_1}(\vec{r}_1)dV_1=\int\Psi^{+}_{n_2}(\vec{r}_2)\vec{r}_2\Psi_{n_2}(\vec{r}_2)dV_2=0$$

вә бурадан да

$$E^{(1)}=0$$

алынар.

Һәјәчанланма нәзәријјәсинин икинчи јахынлашмасында бу тә'сирә ујғун енержи

$$E^{(2)} = \frac{e^4}{R^6}\sum_{n_1'n_2'}\frac{1}{E_{n_1n_2}-E_{n_1'n_2'}}\int\Psi^{+o}_{n_1'n_2'}\left[\vec{r}_1\vec{r}_2-\frac{(\vec{r}_1\vec{R})(\vec{r}_2\vec{R})}{R^2}\right]^2\Psi^{o}_{n_1n_2}dV_1dV_2$$

олар. Бурада чәм бүтүн һәјәчанланмыш һаллар үзрә кедир, n_1, n_2, n'_1, n'_2 – ујғун һалларын квант әдәдләр топлусуну көстәрир.

Системин әсас һалынын енержисини $E^{o}_{n_1n_2}$ гәбул етсәк, она икинчи тәртиб әлавә һәмишә мәнфи олур (бах § 46). Интеграллама вә чәмләмә әмәлијјатлары апарыландан сонра алынан сабити C илә ишарә етсәк,

$$E^{(2)} = -\frac{C}{R^6}$$

олар. Алынмыш ифадә Ван-дер-Ваалс гаршылыглы тә'сир ганунуну ифадә едир. Бу ифадә атомларын тәбиәтиндән асылы олмајараг бүтүн атомлар (вә еләчә дә молекуллар) арасында мејдана чыхан чазибә гүввәләринин потенсиал енержисини ифадә едир. Гүввәләрин өзләри исә атомлararасы мәсафәнин

$$F = -\frac{\partial E^{(2)}(R)}{\partial R} \sim \frac{1}{R^7}$$

гануну илә азалыр.

Јухарыдакы һесабламалардан чыхыр ки, бу гүввәләр дә квант тәбиәтлидир. Классик нәзәријјә бахымындан онлар баша дүшүлмүр, чүнки атомлар орта дипол моментинә малик дејилдир.

Системи тәшкил едән атомлар s һалында олмазса, онлар ани квадрупол моментинә дә малик ола биләр. Ван-дер-Ваалс дипол гаршылыглы тә'сирдән әлавә атомлар арасында $\frac{1}{R^5}$ илә мүтәнасиб олан квадрупол гаршылыглы тә'сир дә мејдана чыха биләр. Атомлар һаггында сөјләнилән фикирләр молекуллар үчүн дә тәхмини доғру һесаб едилә биләр.

ИСТИФАДӘ ОЛУНАН ӘДӘБИЈЈАТ

1. Д.И.Блохинцев – Основы квантовой механики, "Высшая школа", Москва, 1961.
2. А.А.Соколов, И.М.Тернов, В.Ч.Жуковский - Квантовая механика, "Наука", Москва, 1979.
3. А.А.Соколов, Ю.М.Лоскутов, И.М.Тернов – Квантовая механика, Москва, 1962.
4. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц – Квантовая механика, Нерелятивистская теория. "Наука", Москва, 1974.
5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц – Курс теоретической физики, Квантовая механика, книга 2, "Наука", 1972.
6. А.С.Давыдов – Квантовая механика, "Наука", Москва, 1972.
7. В.В.Балашов, В.К.Долинов – Курс квантовой механики, Изд.Московского университета, 1982.
8. П.В.Елютин, В.Д.Кривченко – Квантовая механика, "Наука", Москва, 1976.
9. А.М.Федорченко – Основы квантовой механики, "Высшая школа", Киев, 1979.
10. А.А.Соколов, И.М.Тернов – Квантовая механика и атомная физика, "Просвещение", Москва, 1970.
11. Я.И.Френкель – Волновая механика, часть вторая, ОНТИ -Г.Т.Т.И, Ленинград– 1934 – Москва.
12. Альберт Мессиа – Квантовая механика, том 1, "Наука", Москва 1978.
13. Альберт Мессиа – Квантовая механика, том 2, "Наука", Москва 1979.
14. П.Дирак – Принципы квантовой механики, "Наука", 1979.
15. Г.Бете, Э.Солпитер – Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, Госизд.физ.мат.литературы, Москва, 1960.
16. Ә.Чавадов – Квант механикасы, "Маариф", 1975.
17. И.В.Савельев – Основы теоретической физики, том 2, "Наука", Москва, 1977.
18. Энрико Ферми – Квантовая механика, "Мир", Москва, 1965.
19. Р.Фейнман, А.Хибс – Квантовая механика и интегралы по траекториям, "Мир", Москва, 1968.
20. В.Паули – Общие принципы волновой механики, Гостехиздат, Москва, 1947, Ленинград.
21. Г.Бете – Квантовая механика, "Мир", Москва, 1965.
22. А.Зоммерфельд – Волновая механика, Гос.Технико-Теоретическое изд., Ленинград, 1933, Москва.

23. Д.Бом – Квантовая теория, Физматгиз, Москва, 1961.
24. З.Флюгге – Задачи по квантовой механике, том I и 2, "Мир", Москва, 1974.
25. В.Г.Левич, Ю.А.Вдовин, В.А.Мямлин – Курс теоретической физики, том 2, Физматгиз, Москва, 1962.
26. В.В.Мултановский, А.С.Василевский – Курс теоретической физики, Квантовая механика, "Просвещение", Москва, 1991.
27. Проблемы теоретической физики, том 1, Изд. Ленинградского Университета, 1974.
28. Эффект Мессбауэра. Сборник статей, Издательство иностранной литературы. Москва, 1962.
29. Г.Бете – Квантовая механика простейших систем, Л.-М., ОНТИ, 1935.

МҮНДӘРИЧАТ

III ф ә с и л. **Тәсвир нәзәриjјәсинин елементләри**

II һ и с с ә. **Гејри-релјативистик квант механикасынын бә'зи тәтбигләри.**

IV ф ә с и л. **Бирөлчүлү фәзада һәрәкәт**

V ф ә с и л. **Үчөлчүлү фәзада һәрәкәт**

VI ф ә с и л. **Һәјәчанланма нәзәриjјәси вә онун бә'зи тәтбигләри**

VII ф ә с и л. **Сәпилмәнин квант нәзәриjјәси**

III һ и с с ә. **Релјативистик квант нәзәриjјәси**

VIII ф ә с и л. **Дирак нәзәриjјәси**

Редактору: ***Н.М. Әһмәдова***
Рәссамы: ***С.А. Шатиков***
Бәдии редактору: ***А.А. Әләкбәров***
Техники редактору: ***Б.Ә. Кәримова***
Корректору: ***Т.Т. Әсәдова***

Јығылмаға верилмиш 12.03.98. Чапа имзаланмыш 30.03.99. Нәшрин форматы 60 x 90 $^1/_{16}$. Офсет кағызы № 1. "Тајмс" гарнитуру. Офсет чапы. Физики вә шәрти ч. в. 38 + 0,25 форзас. Шәрти рәнк-оттиск 39,19. Учот нәшр вәрәги 30,2 + 0,43 форзас. Тиражы 1000. Сифариш № 199. Гијмәти мүгавилә илә.

Азәрбајчан Республикасы Мәтбуат вә Информасија Назирлијинин "Маариф" нәшријјаты, Бакы — 370111, А. Мәһәррәмов күчәси, № 4.

Азәрбајчан Республикасы Мәтбуат вә Информасија Назирлијинин "Гызыл Шәрг" ичарә мәтбәәси, Һ. Асланов күчәси, № 80.

Мухтаров Абдулла Ибраһим оғлу
Физика-ријазијјат елмләри доктору, профессор,
Азәрбајҹан ЕА-нын мүхбир үзвү, әмәкдар елм хадими

КВАНТ МЕХАНИКАСЫ

Али мәктәбләр үчүн дәрс вәсаити

Азәрбајҹан Республикасы Дөвләт Тәдрис
Педагожи Әдәбијјаты нәшријјаты "Мaариф"

Б а к ы - 1999

Д. И. МЕНДЕЛЕЈЕВИН ЕЛЕМЕНТЛӘРИН ДӨВРИ СИСТЕМИ

(узундөврлү форма)

ЛАНТАНОИДЛӘР (57—71)

АКТИНОИДЛӘР (89—103)

IA																
1 H 1,0079	IIA															
3 Li 6,941	4 Be 9,01218															
11 Na 22,9898	12 Mg 24,305	IIIB														
19 K 39,098	20 Ca 40,08	21 Sc 44,9559														
37 Rb 85,4678	38 Sr 87,62	39 Y 88,9059														
55 Cs 132,9054	56 Ba 137,33	57 La 138,91	58 Ce 140,12	59 Pr 140,9077	60 Nd 144,24	61 Pm [145]	62 Sm 150,4	63 Eu 151,96	64 Gd 157,25	65 Tb 158,9254	66 Dy 162,50	67 Ho 164,9304	68 Er 167,26	69 Tm 168,9342	70 Yb 173,04	71 Lu 174,967
87 Fr [223]	88 Ra 226,0254	89 Ac [227]	90 Th 232,0381	91 Pa 231,0359	92 U 238,029	93 Np 237,0482	94 Pu [244]	95 Am [243]	96 Cm [247]	97 Bk [247]	98 Cf [251]	99 Es [254]	100 Fm [257]	101 Md [258]	102 (No) [255]	103 (Lr) [256]
s		d	f													

													VIIA	VIIIA	дөвр
									IIIA	IVA	VA	VIA	H	2 He 4,0026	1
									5 B 10,81	6 C 12,011	7 N 14,0067	8 O 15,9994	9 F 18,9984	10 Ne 20,179	2
IVB	VB	VIB	VIIB	VIIIB			IB	IIB	13 Al 26,9815	14 Si 28,086	15 P 30,9738	16 S 32,06	17 Cl 35,453	18 Ar 39,948	3
22 Ti 47,90	23 V 50,9415	24 Cr 51,996	25 Mn 54,9380	26 Fe 55,847	27 Co 58,9332	28 Ni 58,70	29 Cu 63,546	30 Zn 65,38	31 Ga 69,72	32 Ge 72,59	33 As 74,9216	34 Se 78,96	35 Br 79,904	36 Kr 83,80	4
40 Zr 91,22	41 Nb 92,9064	42 Mo 95,94	43 Tc 98,9062	44 Ru 101,07	45 Rh 102,9055	46 Pd 106,4	47 Ag 107,868	48 Cd 112,41	49 In 114,82	50 Sn 118,69	51 Sb 121,75	52 Te 127,60	53 I 126,9045	54 Xe 131,30	5
72 Hf 178,49	73 Ta 180,9479	74 W 183,85	75 Re 186,207	76 Os 190,2	77 Ir 192,22	78 Pt 195,09	79 Au 196,9665	80 Hg 200,59	81 Tl 204,37	82 Pb 207,2	83 Bi 208,9804	84 Po [209]	85 At [210]	86 Rn [222]	6
104 Ku [261]	105 (Ns) [261]														7
d									p						

НОРМАЛ ВӘЗИЈЈӘТДӘ АТОМЛАРЫН ЕЛЕКТРОН ГУРУЛУШУ

1. **H** $1s$
2. **He** $\boxed{1s^2}$
3. **Li** $\boxed{K}\,2s$
4. **Be** $\boxed{K}\,2s^2$
5. **B** $\boxed{K}\,2s^22p$
6. **C** $\boxed{K}\,2s^22p^2$
7. **N** $\boxed{K}\,2s^22p^3$
8. **O** $\boxed{K}\,2s^22p^4$
9. **F** $\boxed{K}\,2s^22p^5$
10. **Ne** $\boxed{K}\boxed{2s^22p^6}$
11. **Na** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s$
12. **Mg** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^2$
13. **Al** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p$
14. **Si** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^2$
15. **P** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^3$
16. **S** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^4$
17. **Cl** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^5$
18. **Ar** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^6$
19. **K** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^6\ 4s$
20. **Ca** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^6\ 4s^2$
21. **Sc** $\boxed{K}\boxed{L}\,3s^23p^63d$ „
22. **Ti** $\boxed{K}\boxed{L}$ „ „ $3d^24s^2$
23. **V** $\boxed{K}\boxed{L}$ „ „ $3d^34s^2$
24. **Cr** $\boxed{K}\boxed{L}$ „ „ $3d^54s$
25. **Mn** $\boxed{K}\boxed{L}$ „ „ „ $4s^2$
26. **Fe** $\boxed{K}\boxed{L}$ „ „ $3d^64s^2$
27. **Co** $\boxed{K}\boxed{L}$ „ „ $3d^74s^2$
28. **Ni** $\boxed{K}\boxed{L}$ „ „ $3d^84s^2$
29. **Cu** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{3s^23p^63d^{10}}\,4s$
30. **Zn** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\,4s^2$
31. **Ga** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ $4p$
32. **Ge** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ $4p^2$
33. **As** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ $4p^3$
34. **Se** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ $4p^4$
35. **Br** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ $4p^5$
36. **Kr** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ $4p^6$
37. **Rb** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\,4s^24p^6\ 5s$
38. **Sr** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $5s^2$
39. **Y** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d\ 5s^2$
40. **Zr** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d^2$ „
41. **Nb** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d^45s$
42. **Mo** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d^5$
43. **Tc** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d^55s^2$
44. **Ru** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d^75s$
45. **Rh** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d^85s$
46. **Pd** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ $4d^{10}$
47. **Ag** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $5s$
48. **Cd** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $5s^2$
49. **In** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ „ $5p$
50. **Sn** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ „ $5p^2$
51. **Sb** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ „ $5p^3$
52. **Te** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ „ $5p^4$
53. **I** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ „ $5p^5$
54. **Xe** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ „ $5p^6$
55. **Cs** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\,4s^24p^64d^{10}\ 5s^25p^6\ 6s$
56. **Ba** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $5s^25p^6\ 6s^2$
57. **La** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ „ „ $5d6s^2$
58. **Ce** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^2$ „ „ „
59. **Pr** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^3$ „ „ „
60. **Nd** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^4$ „ „ „
61. **Pm** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^5$ „ „ „
62. **Sm** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^6$ „ „ „
63. **Eu** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^7$ „ „ „
64. **Gd** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^8$ „ „ $5d$ „
65. **Tb** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^9$ „ „ „
66. **Dy** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^{10}$ „ „ „
67. **Ho** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^{11}$ „ „ „
68. **Er** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^{12}$ „ „ „
69. **Tm** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^{13}$ „ „ „
70. **Yb** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}$ „ „ „ $4f^{14}$ „ „ „
71. **Lu** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{4s^24p^64d^{10}4f^{14}}$ „ „ $5d$ „
72. **Hf** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}\,5s^25p^65d^26s^2$
73. **Ta** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ $5d^3$ „
74. **W** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ $5d^4$ „
75. **Re** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ $5d^5$ „
76. **Os** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ $5d^6$ „
77. **Ir** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ $5d^7$ „
78. **Pt** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ $5d^96s$
79. **Au** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ $5d^{10}6s$
80. **Hg** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $6s^2$
81. **Tl** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ $6p$
82. **Pb** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ $6p^2$
83. **Bi** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ $6p^3$
84. **Po** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ $6p^4$
85. **At** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ $6p^5$
86. **Rn** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ $6p^6$
87. **Fr** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}\,5s^25p^65d^{10}\ 6s^26p^6\ 7s$
88. **Ra** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ „ $7s^2$
89. **Ac** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ „ $6d$ „
90. **Th** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ „ $6d^2$ „
91. **Pa** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^2$ „ „ $6d$ „
92. **U** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^3$ „ „ „ „
93. **Np** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^4$ „ „ $6d$ „
94. **Pu** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^6$ „ „ „
95. **Am** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^7$ „ „ „
96. **Cm** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^7$ „ „ $6d$ „
97. **Bk** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^8$ „ „ $6d$ „
98. **Cf** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^{10}$ „ „ „
99. **Es** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^{11}$ „ „ „
100. **Fm** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^{12}$ „ „ „
101. **Md** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^{13}$ „ „ „
102. **(No)** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^{14}$ „ „ „
103. **(Lr)** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ $5f^{14}$ „ „ $6d$ „
104. **Ku** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ „ „ $6d^2$ „
105. **(Ns)** $\boxed{K}\boxed{L}\boxed{M}\boxed{N}$ „ „ „ „ „ „ $6d^3$ „

$\boxed{}$ — тамамланмыш електрон табагаси