

Қазақстан Республикасы білім және ғылым министрлігі

А.Қ. Ахметов

**КВАНТТЫҚ МЕХАНИКАҒА
КІРІСПЕ**

Алматы

ҒЫЛЫМ

2003

Ш.Есенов атындағы Ақтау мемлекеттік университетінің Ғылыми Кеңесінің
шешімімен баспаға ұсынылған

РЕЦЕНЗЕНТТЕР: – физика-математика ғылымдарының докторы,
профессор М. Құлбеков
– физика-математика ғылымдарының кандидаты,
профессор А. Жалғасов
– педагогика ғылымдарының кандидаты,
профессор Ғ. Имашев

А.Қ. Ахметов

Кванттық механикаға кіріспе. – Алматы: Ғылым, 2003. – 229 б.

Қазақстан Республикасы білім және ғылым министрлігі университеттер мен педагогикалық институттардың студенттеріне оқулық ретінде ұсынуды мақұлдаған.

Кітапта кванттық механиканың негізгі ұғымдары мен кейбір физикалық құбылыстардың түсіндірілуі қарастырылған. Кванттық механиканың негізгі оқулықтарына көмекші құрал ретінде пайдалануға болады. Әңделіп және толықтырылып 2-ші рет басылуы.

ISBN 5-628-020240-0

© Ахметов А.Қ., 2003

Мазмұны

	стр.
Кіріспе	6
1– тарау. Кванттық механиканың тәжірибелік негіздері.	7
§ 1. Абсолют қара дененің сәуле шығаруы.	7
§ 2. Жарық кванттары.	12
§ 3. Атомның планеталық моделі. Бор постулаттары .	19
2 – тарау. Бөлшектердің толқындық қасиеттер.	28
§ 1. Де Бройль болжамы.	28
§ 2. Фазалық және группалық жылдамдықтар. Толқындық пакет.	31
3-тарау. Кванттық механиканың негізгі ұғымдары.	39
§ 1. Еркін қозғалыстағы бөлшектің толқындық функциясы.	39
§ 2. Кванттық механикадағы суперпозиция принципі.	40
§ 3. Микробөлшектердің кеңістіктің әртүрлі нүктелерінде болу ықтималдылығы.	42
4-тарау. Кванттық механиканың математикалық аппараты.	44
§ 1. Физикалық шамаларды сызықтық, өзара түйіндес операторлармен сипаттау.	44
§ 2. Негізгі физикалық шамалардың операторлары.	50
5-тарау. Кванттық механиканың негізгі теңдеуі – Шредингер теңдеуі.	54
§ 1. Шредингер теңдеуі және оның негізгі қасиеттері.	54
§ 2. Ток үзіліссіздігінің теңдеуі.	59
§ 3. Шредингер теңдеуінен классикалық қозғалыс теңдеулеріне шектік өту.	60
§ 4. Операторларды уақыт бойынша дифференциалдау. Классикалық және кванттық Пуассон жақшалары.	64
§ 5. Эренфест теоремалары.	67
6-тарау. Кванттық механикадағы сақталу заңдары.	69
§ 1. Стационар күйлер. Энергияның сақталу заңы.	70
§ 2. Импульстің сақталу заңы.	72
§ 3. Импульс моментінің сақталу заңы.	73
§ 4. Күйлердің жұптылығы және жұптылықтың сақталу заңы.	74
7-тарау. Бір өлшемді қозғалыстардың жалпы қасиеттері.	74
§ 1. Потенциалық шұңқырдағы бөлшек қозғалысы жайындағы есеп.	78
§ 2. Бөлшектің еркін қозғалысы.	84
§ 3. Квазиклассикалық жуықтау (ВКБ - тәсіл).	91
§ 4. Бөлшектің потенциалық тосқауыл арқылы тікелей өтуі. Туннельдік эффект.	97
§ 5. Электрондардың металл бетінен салқын эмиссиясы.	100
8-тарау. Сызықтық гармоникалық осциллятор.	100
§ 1. Классикалық және Бор теорияларындағы гармоникалық осциллятор.	102
§ 2. Гармоникалық осциллятор энергиясының меншікті мәндері мен меншікті функциялары.	108
§ 3. Гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясы және анықталмағандық қатынас.	111
§ 4. Гармоникалық осциллятордың сұрыптау ережелері.	113
9-тарау. Көріністер теориясының негіздері.	113
§ 1. Координаталық көрініс (x – көрініс).	116

	стр.
§ 2. Импульстік көрініс (P – көрініс).	118
§ 3. Матрицалық көрініс.	120
10-тарау. Орталық симметриялы күш өрісіндегі бөлшек қозғалысының жалпы теориясы.	120
§ 1. Сфералық координаттар жүйесіндегі Шредингер теңдеуі.	123
§ 2. Толқындық функцияның бұрыштық бөлігі үшін Шредингер теңдеуін шешу.	130
§ 3. Импульс моменті операторының меншікті мәндері мен меншікті функциялары.	132
§ 4. Кванттық және классикалық нәтижелерді салыстыру.	136
11-тарау. Ротатордың кванттық теориясы.	136
§ 1. Ротатордың меншікті функциялары.	140
§ 2. Сұрыптау ережелері.	143
§ 3. Екі атомды молекулалардың спектрі.	150
12-тарау. Сутегі тәріздес атом теориясы (Кеплер мәселесі).	150
§ 1. Толқындық функцияның радиалдық бөлігінің шешуі.	157
§ 2. Сутегі тәріздес атомның кванттық теориясының нәтижелерін классикалық тұрғыдан сипаттау.	159
§ 3. Сұрыптау ережелері. Сутегі тәріздес атомның сәуле шығару спектрлері	
§ 4. Ядро қозғалысын ескеру.	162
13-тарау. Сәуле шығарудың қарапайым кванттық теориясы.	164
§ 1. Ерікті және еріксіз кванттық өтулер. Эйнштейн коэффициенттері.	164
§ 2. Ерікті және еріксіз өтулердің ықтималдылығын анықтау.	168
14-тарау. Шредингер теңдеуін жуықтап шешу әдістері.	173
§ 1. Ұйытқу теориясының негізгі теңдеулері.	173
§ 2. Энергиялық деңгейлерінің азғындалмайтын жағдайы.	176
§ 3. Энергиялық деңгейлердің азғын жағдайы үшін ұйытқу теориясы.	178
§ 4. Штарк эффектісі.	181
15-тарау. Электронның спині. Сыртқы магнит өрісіндегі атом.	188
§ 1. Электронның спиндік қасиетінің бар екендігінің тәжірибеде дәлелденуі.	188
§ 2. Спиндік операторлар. Олардың меншікті функциялары.	192
§ 3. Электронның спинді ескергендегі толқындық функциясы. Паули теңдеуі	195
§ 4. Сыртқы магнит өрісіндегі атом. Қарапайым Зеeman эффектісінің теориясы.	198
16-тарау. Бірдей бөлшектер жүйесі.	207
§ 1. Бірдей бөлшектердің ажыратылмау қағидасы.	207
§ 2. Симметриялы және антисимметриялы күйлер.	212
§ 3. Бозе және Ферми бөлшектер. Паули қағидасы.	215
§ 4. Элементтердің периодтық таблицасы.	218
17-тарау. Гелий атомының қарапайым теориясы.	219
§ 1. Моменттерді қосу және Рессел – Саундерс байланысы.	219
§ 2. Пара – және ортогелий.	225
§ 3. Гелий атомының энергиялық спектрі.	226
Әдебиеттер.	229

КІРІСПЕ

Кванттық механика атомдық деңгейдегі бөлшектердің қозғалысы мен әсерлесулерінің жалпы заңдылықтарын зерттейді және осы заңдылықтарға сүйене отырып атом ядросының, атомның, молекулалар мен қатты денелердің құрылысы теориялары мен қасиеттерін тағайындайды.

Классикалық физиканың атомдардың қасиеттері мен құрылысын және олардың жарықпен әсерлесуін түсіндіре алмауына байланысты физиканың жаңа бөлігі— кванттық механика пайда болды.

Кванттық механика, физиканың басқа да бөліктері сияқты, нақты физикалық құбылыстарды математикалық кескіндер (өрнектер, қатынастар) түрінде сипаттайды. Бұл кескіндер негізгі математикалық объектілерден: функциялардан, матрицалардан, операторлардан және олардың арасындағы қатынастардан құралады. Осы математикалық образдар мен физикалық объектілер – электрондар, атомдар және молекулалар арасындағы сәйкестік негізгі физикалық ұғымдар арқылы тағайындалады. Бір жағынан, бұл физикалық ұғымдар математикалық заңдылықтар мен әдістерді пайдалануға болатын математикалық объектілермен сипатталуы қажет, ал екінші жағынан, физикалық құбылыстың мазмұны осы физикалық ұғымдар арқылы сипатталатын физикалық құбылыстар мен тәжірибелерді қарастыру нәтижесінде тағайындалады.

Кванттық механика теориялық физиканың өте тез дамып келе жатқан тарауы. Ол – кванттық электродинамика, кванттық мезодинамика, қатты денелердің кванттық теориясы, тағы сол сияқты көптеген жаңа ғылымдардың негізінде жатыр. Бұл оқулық орыс тілінде жарық көрген көптеген оқулықтар мен қосымша әдебиеттерді басшылыққа ала отырып және педагогикалық институттарда кванттық механиканы оқытудың қазіргі бағдарламасына сәйкестендіріліп жазылған.

Бұл кітап өзінің алдына қойған мақсаты жөнінен кванттық механикаға тек кіріспе ғана. Кітаптың негізіне автордың ұзақ жылдар бойы Атырау және Ақтау мемлекеттік университеттерінде оқыған лекцияларының қолжазбалары алынған. Кванттық механика жайындағы білімін әрі қарай жалғастырып, тереңдете түскісі келетін оқырмандарды кітаптың соңында келтірілген қосымша әдебиеттерге жолдаймыз.

Профессор А.Қ. Ахметов.

КВАНТТЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ ТӘЖІРИБЕЛІК НЕГІЗДЕРІ

§1. Абсолют қара дененің сәуле шығаруы. Планк болжамы.

Электромагниттік құбылыстардың ішінде тепе-теңдік қалыптағы сәуле шығару құбылысының алатын орны ерекше. Осы құбылыстың теориясын жасау үрдісі

нде физиканың жаңа бөлімі - кванттық механика тағайындалды. Сырты жылулық сәуле шығармайтын материалмен қапталған, T - температураға дейін қыздырылған, іші қуыс дененің жылу сәулелерін шығаруын тепе-теңдік қалыптағы сәуле шығару деп қарастыруға болады. Осы қуыста кішкене саңылау жасалса, онда сырттан түсірілген электромагниттік сәулелер қуыс ішінде түгел қалады, яғни бұл денені абсолют қара дене ретінде қабылдауға болады.

Қуыстың қабырғалары электромагниттік толқындарды шығарып және жұтып ала алады. Тепе-теңдікте 1 сек ішінде бөлініп шығатын сәулелер мен жұтып алатын сәулелердің шамалары бірдейлігінен, қуыстың ішінде энергия тығыздығы

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

тұрақты электромагниттік өріс пайда болады.

Қуыстың ішінде жылулық сәулелердің спектрі біртұтас болады. Бұл сәулелердің спектрлік құрамын қарастыру үшін спектрлік шамаларды енгізу қажет. Жиіліктің шексіз аз dw аралығы үшін энергия тығыздығы du осы жиілік аралығына пропорционал деп қарастыра аламыз:

$$dU = \rho_w dw \quad (1.1)$$

Коэффициент ρ_w - сәуле шығарудың спектрлік тығыздығы деп аталады. Жиілігі нольден шексіздікке дейін өзгертін біртұтас спектр үшін:

$$U = \int_0^{\infty} \rho_w \cdot dw \quad (1.2)$$

Кирхгоф термодинамиканың екінші бастамасына сүйене отырып, абсолют қара дененің спектрлік тығыздығы оның T -температурасына ғана байланысты да, оның қандай материалдан жасалғанына тәуелсіз екендігін дәлелдеді:

$$\rho_w dw = f(w, T) dU \quad (1.3)$$

Мұнда $f(w, T)$ - универсал функция.

Абсолют қара дененің ішкі қабырғасын осцилляторлардың жиыны ретінде қарастырып, олардың орташа энергиясы \bar{E} -мен спектрлік тығыздығы арасындағы байланысты классикалық физика мынадай түрде тағайындалды:

$$\rho_w = \frac{w^2}{\pi^2 c^3} \bar{E} \quad (1.4)$$

Энергияның орта мәнін анықтау үшін классикалық статистикалық жүйеде әрбір еркіндік дәрежесіне $1/2$ кТ энергия сәйкес келеді деген теореманы пайдалануға болады. Ал гармоникалық осциллятордың орташа энергиясы потенциалық энергияның орта мәніне сәйкес келетіндіктен, орташа энергия кТ-ге тең болады.

$$\bar{E} = kT \quad (1.5)$$

Орташа энергияның осы мәнін (1.4)-ші қатынасқа қойсақ Рэлей-Джинс өрнегін аламыз:

$$\rho_w = \frac{w^2}{\pi^2 c^3} kT \quad (1.6)$$

Бұл өрнек Вин заңын

$$\rho_w dw = w^3 \cdot f\left(\frac{w}{T}\right) dw \quad (1.7)$$

қанағаттандырады, себебі (1.6)-шы өрнекті былай жазуға болады:

$$\rho_w = \frac{w^3}{\pi^2 c^3 \left(\frac{w}{kT}\right)}$$

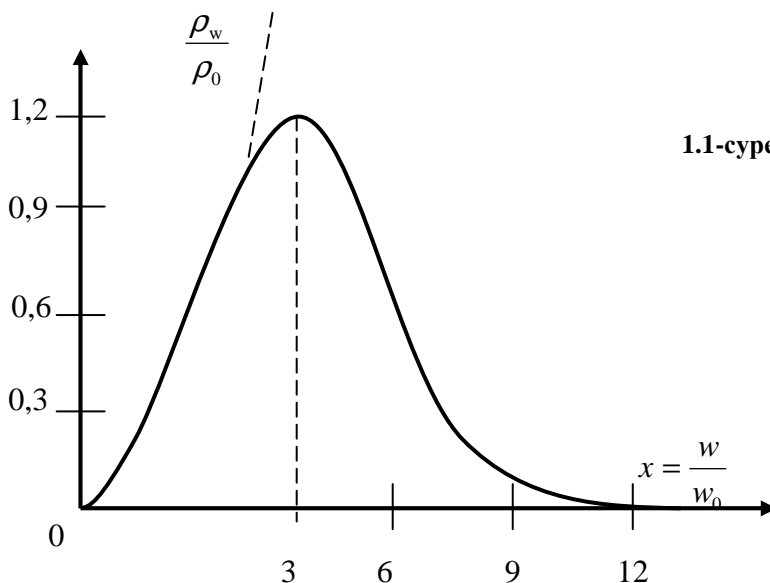
Вин өрнегі термодинамикаға негізделіп, қорытылған. Сондықтан абсолют қара дененің сәуле шығаруын түсіндіру үшін ұсынылған кез келген жаңа теориялар мен болжамдар Вин заңын қанағаттандыруы керек, яғни өрнекке жиіліктің үшінші дәрежесі мен $\left(\frac{w}{T}\right)$ - қатынасы енуі қажет.

Рэлей-Джинс өрнегі сәуле шығару жиілігінің төменгі мәндерінде тәжірибелік деректермен сәйкес келеді де, керісінше, жиіліктің мәні артқан сайын эксперимент пен Вин теориясының арасындағы қайшылық ұлғая береді (1.1-сурет).

Рэлей-Джинс өрнегін пайдаланып, электромагниттік сәуле шығару энергиясының тығыздығын табайық:

$$U = \int_0^{\infty} \frac{w^2}{\pi^2 c^3} \cdot kT dw \rightarrow \infty \quad (1.8)$$

Бұл нәтиже материалдық денелер мен сәуле шығарудың арасындағы тепе-теңдік тек шексіз сәуле шығару жағдайында ғана болатындығын көрсетеді. Яғни сәуле шығарушы денелердің осцилляторлары энергияны температура абсолюттік нольге жеткенше шығара беруі қажет. Бірақ, бұл қорытынды сәуле шығару мен материалдық центрлердің арасындағы тепе-теңдік кез келген температурада бола алады деген тәжірибелік дерекке қайшы келеді. П. Эрэнфест (1.8)-ші қатынасты "ультракүлгін апат" деп атады. Сонымен, классикалық физиканың негізгі заңдарына сүйене отырып, ешқандай қосымша болжамдарсыз қорытылып шығарылған Рэлей-Джинс өрнегі абсолют қара дененің сәуле шығару құбылысын түсіндіре алмады.



1.1-сурет. Абсолют қара дененің сәуле шығару спектрі. Штрих сызық – Рэлей-Джинс теориясы. Үзіліссіз сызық – экспериментпен сәйкес келетін Планк теориясы.

$$\rho_0 = (kT)^3 / \pi^2 c^3 \hbar^2$$

$$w_0 = kT / \hbar$$

Абсолют кара дененің сәуле шығаруын түсіндіру үшін М. Планк (1900 ж.) микроскопиялық денелердің (атомдар, молекулалар) сәуле шығару энергиясы үзіліссіз емес, үзілісті-дискретті мәндерге ғана ие болады деген болжам ұсынды. Бұл осциллятордың энергиясы ең аз ε энергиясына еселі, белгілі дискретті мәндерге ғана ие бола алады:

$$E = n \cdot \varepsilon, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.9)$$

Бұл жағдайда энергияның орта мәні

$$\bar{E} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/kT} - 1} \quad (1.10)$$

(1.10)-шы өрнекті (1.4) қатынасқа қойып, сәуле шығарудың спектрлік тығыздығының өрнегін аламыз:

$$\rho_w = \frac{w^2 \varepsilon}{\pi^2 \cdot c^3 (e^{\varepsilon/kT} - 1)} \quad (1.11)$$

(1.11) өрнекті (1.7)-ші термодинамикалық Вин заңдылығына сәйкестендіру үшін энергия ε жиілік w -ға пропорционал деп алсақ жеткілікті:

$$\varepsilon = \hbar w \quad (1.12)$$

Сонда спектрлік тығыздық үшін Планк өрнегіне келеміз:

$$\rho_w = \frac{\hbar w}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar w/kT} - 1)} \quad (1.13)$$

мұнда $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – Планк тұрақтысы.

Жиіліктің аз мәндері үшін ($\hbar w/kT \gg 1$) (1.13)-ші өрнектегі $\exp(\hbar w/kT)$ экспонентті $-(\hbar w/kT)$ бойынша қатарға жіктеуге болады. Егер бұл қатардың тек сызықтық мүшелерімен шектелсек

$$e^{\hbar w/kT} \cong 1 + \frac{\hbar w}{kT} \quad (1.14)$$

онда (1.13) Планк өрнегі Рэлей-Джинс өрнегіне ауысады. Ал, жиіліктің жоғары мәндерінде ($\hbar w/kT \gg 1$) (1.13)-ші өрнектің бөліміндегі бірлікті ескермеуге болады, сонда спектрлік тығыздықтың өрнегі

$$\rho_w = \frac{\hbar w^3}{\pi^2 c^3} e^{-\frac{\hbar w}{kT}} \quad (1.15)$$

Жылулық сәуле шығарудың спектрлік тығыздығы мен жиіліктің арасындағы тәуелділікті сипаттайтын (1.13)-Планк өрнегі тәжірибеге дәл сәйкес келеді (1.1-сурет).

Енді электромагниттік сәуле шығару энергиясының тығыздығын анықтасақ:

$$U = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \frac{w^3 dw}{e^{\hbar w/kT} - 1} = \frac{k^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}$$

Мұнда $x = \frac{\hbar w}{kT}$ белгілеу енгізілген және интегралдың $\frac{\pi^4}{15}$ тең болатындығын ескерсек, төмендегідей қатынас аламыз:

$$U = \int_0^{\infty} \frac{\hbar w^3 dw}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar w/kT} - 1)} = \frac{\pi^2 k^4}{15 c^3 \hbar^3} T^4 = \sigma T^4 \quad (1.16)$$

Бұл Планк болжамы ұсынылғанға дейін белгілі тәжірибелік деректерге сүйеніп тағайындалған Стефан-Больцман заңы. Мұнда

$$\sigma = \pi^2 k^4 / 15c^3 \hbar^3 = 7.56 \cdot 10^{-15}, \text{ эрг см}^{-3} \text{град}^{-4} \quad (1.17)$$

(1.17) қатынастан Планк тұрақтысының мәнін табуға болады. Планк тұрақтысын Виннің ығысу заңымен де байланыстыруға болады:

$$\lambda_{\max} \cdot T = 2\pi c \hbar / 4.965k = b \quad (1.18)$$

мұнда $b = 0,29$ см град.

Сонымен, Планк болжамына сәйкес жылулық сәуле шығару немесе жұту сияқты процестер кванттық түрде жүреді, яғни бұл процестердегі микробөлшектердің энергиялары классикалық физикадағыдай үзіліссіз түрде емес, керісінше, үзілісті-дискретті мәндерге ғана ие болады.

§2. Жарық кванттары

Абсолют қара дененің ішкі қабырғасын осцилляторлардан тұрады деп алып, олар энергияны үзілісті түрде шығарады деген Планк болжамының жеткілікті физикалық негізі болмады. Сондықтан А. Эйнштейн (1905 ж.) бұл болжамды дамытып, тек абсолют қара дененің жылулық сәуле шығаруы ғана емес, электромагниттік сәулелердің өзі де жеке бөлшектерден-фотондардан тұрады деген жаңа, тың болжам ұсынды. Яғни, Эйнштейн теориясы бойынша, электромагниттік өріс тыныштық массасы нольге тең бөлшектерден-фотондардан тұрады. Бұл болжам бойынша электромагниттік өріс энергиясы:

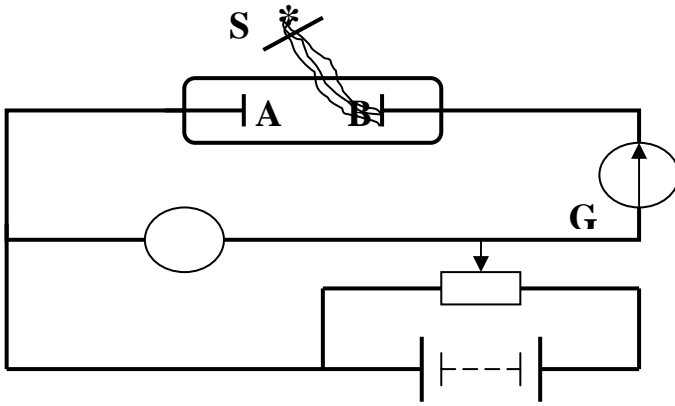
$$E = \hbar \omega \quad (1.19)$$

импульсі:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (1.20)$$

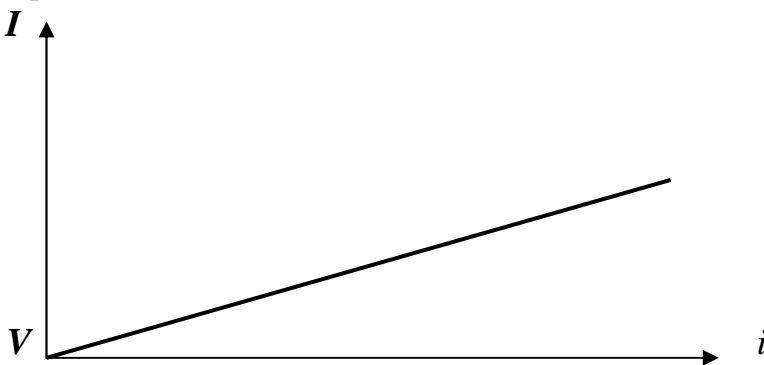
фотондардан тұрады. Мұндағы: $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{k}^0$ – толқындық вектор, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – толқындық сан.

Фотондар болжамына сүйене отырып, Эйнштейн (1905 ж.) фотоэффект құбылысының теориясын жасады. Фотоэффект деп электромагниттік сәуленің әсерінен металдардан электрондардың ұшып шығу процесін айтады. 1.2-суретте жарықтың әсерінен болатын фотоэффект құбылысын бақылайтын тәжірибелік қондырғының схемасы келтірілген. Ауасы сорып алынған колбадағы A және B металл пластиналарының арасындағы потенциалдар айырмасы V болсын. Пластиналар вакуумда болғандықтан тізбекте ток жүрмейді. Пластиналардың бірінің ішкі бетіне жарық ағынын түсіргенде тізбекте электр тогының пайда болатындығын гальванометр C – стрелкасының қозғалуынан білуге болады. Токтың жүру себебі – жарық сәулелері пластина бетінен электрондарды жұлып шығаруы немесе пластиналардың арасындағы кеңістікте бос электрондардың пайда болуының нәтижесі.



1.2-сурет. Тәжірибелік қондырғының схемасы.

Жарықтың жиілігі тұрақты болған жағдайдағы металл бетіне түсетін жарықтың қарқындылығы мен фотоэффект тогының арасындағы тәуелділік 1.3-суретте келтірілген.



1.3 сурет. Фотоэффект тогының жарық қарқындылығына тәуелділігі.

Эйнштейн фотоэффект құбылысындағы электрондармен әсерлесетін жарық ағынын толқын түрінде емес, корпускулалар ағыны – кванттар ретінде қарастыруды ұсынды. Электродты жарықтандырған кезде жарық кванттары электрондармен әсерлеседі, квант жұтылады да, оның энергиясы электронға беріледі. Электронның максимум энергиясы мынадай қатынас бойынша анықталынады:

$$\frac{m v^2}{2} = \hbar \omega - A \quad (1.21)$$

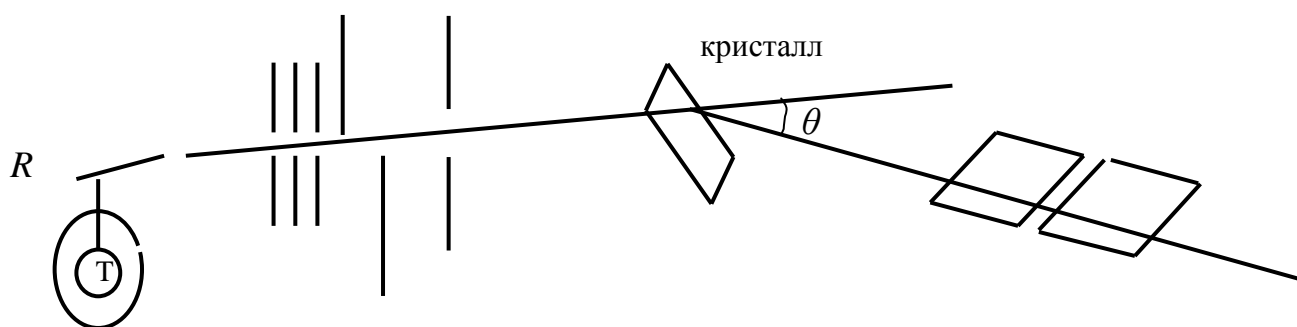
мұндағы: $\hbar \omega$ - металл бетіне түсетін фотондардың энергиясы, A – электрондардың металл бетінен шығу жұмысы. Бұл теңдеу бойынша фотоэлектрондардың энергиясы $\frac{m v^2}{2}$ - жарық сәулелерінің тығыздығына тура пропорционал. Егер электрондардың энергиясын U -үдеткіш потенциал арқылы $e_0 U = m_0 v^2 / 2$ қатынасынан анықтасақ, (U, ω) - графигіндегі түзудің көлбеулігі \hbar / e_0 шамасына тең болады (Милликен тәжірибесі). Тәжірибеден көлбеулікті анықтап және элементар зарядтың $e_0 = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ К}$ мәнін пайдалансақ, Планк тұрақтысы \hbar - тың сан шамасын есептеп шығаруға болады. Милликен тәжірибесінен анықталған Планк тұрақтысының шамасы абсолют қара дененің теориясы есептеген \hbar -тың мәнімен бірдей болды. Бұл (1.21)-ші теңдеуді фотоэффект құбылысына пайдаланудың дұрыс екендігін көрсетеді.

Фотоэффект процесі жүруі үшін металл бетіне түсетін жарықтың жиілігі мынадай шартты қанағаттандыруы қажет:

$$\omega > \frac{A}{\hbar} \quad (1.22)$$

Эйнштейн ұсынған жарықтың кванттық теориясы фотоэффект құбылысын зерттеу нәтижесінде тағайындалған заңдылықтарды толық түсіндіре алды. Кеңістікте электромагниттік толқын түрінде таралатын жарықтың фотоэффект құбылысында бөлшектік табиғаты айқын байқалды.

Эйнштейннің фотондар теориясының дұрыстығы рентген сәулелерінің еркін (байланысы әлсіз) электрондарда шашырауын зерттеу нәтижесінде толық дәлелденді (Комптон эффектiсi, 1923 ж.). Комптон тәжірибесінің схемасы 1.4-ші суретте көрсетілген. Рентген трубкадан шыққан сәулелер R графитте шашырайды да, бірнеше саңылаулардан өткеннен кейін рентгендік спектрографтың кристаллына келіп түседі. Рентген трубкасының осі мен R-радиаторды бірге бұру нәтижесінде θ –шашырау бұрышын өзгертуге болады. 1.5-ші суретте шашыраған сәулелердің қарқындылығы шашырау бұрышының өзгеруіне байланысты үлестірілуі берілген. Графиктен мынадай заңдылықтарды байқауға болады:

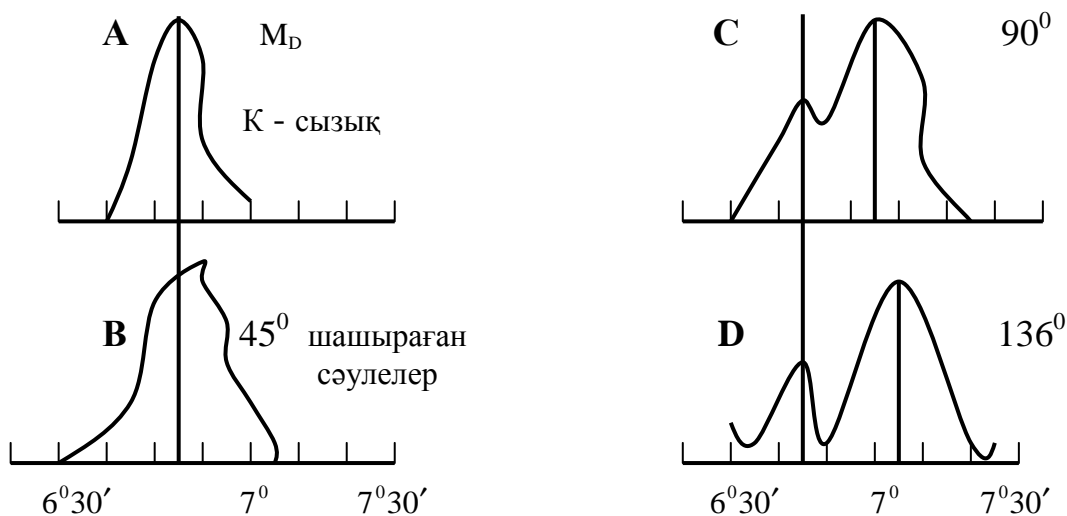


1.4-сурет. Комптон тәжірибесінің схемасы.

1) шашыраған сәулелердің арасында толқын ұзындығы λ , алғашқы рентген сәулелерімен қатар, толқын ұзындығы λ' сәулелер де кездеседі;

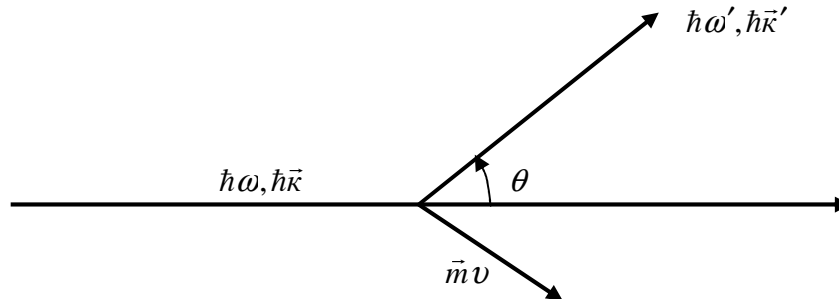
2) толқын ұзындығының өзгеруі $\Delta\lambda = \lambda - \lambda'$ шашырау бұрышына тура пропорционал;

3) шашырау бұрышы артқан сайын түскен рентген сәулелерінің интенсивтілігі төмендеп, шашыраған сәулелердің қарқындылығы арта береді.



1.5-сурет. Графиттегі Комптон эффектiсi.

Енді осы Комптон эффектісінің қарапайым теориясын құрастырайық. Егер жарықта бөлшектік қасиет болмай, оны тек толқын деп қарастырсақ, онда дифракция құбылысы бойынша, жарық толқындары тарау жолындағы кедергілерді айналып өтуге тиіс. Яғни, классикалық теория бойынша еркін электрондарда шашыраған жарықтың жиілігі өзгермейді ($w = w'$). Ал, кванттық теория бойынша, фотон энергиясының белгілі бір бөлігін электронға беріп, оның шашырағаннан кейінгі жиілігі бастапқы жиіліктен кем болады.



1.6 – сурет. Комптон тәжірибесінің диаграммасы

Рентген сәулелерін шашыратқыштар ретінде құрамындағы электрондары атомдармен әлсіз байланысқан денелер (парафин, графит) алынған. Рентген сәулелерінің энергиясы өте үлкен болғандықтан есептеулерде атомдағы электрондардың энергияларын ескермей, оларды еркін, тыныштық күйде деп қарастыра аламыз. Сондықтан әсерлескенге дейін электронның энергиясы $E_0 = m_0 c^2$, ал, импульсы P_0 нольге тең деп қабылдаймыз (1.6-сурет).

Рентген сәулелерімен соқтығысқаннан кейін электрондар өте үлкен энергия алуы мүмкін болғандықтан, есептеулерде бөлшектердің массалары үшін салыстырмалы теорияның негізгі өрнектерін пайдаланамыз:

$$E_e = mc^2 ; \quad m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (1.23)$$

Жарық жиілігінің шашырау бұрышына тәуелділігін анықтау үшін, фотондарды бөлшектер деп қарастырып, энергия мен импульстің сақталу заңдарын жазалық:

$$hw + mc^2 = hw' + m_0 c^2 \quad (1.24)$$

$$h\vec{k} = h\vec{k}' + m\vec{v} \quad (1.25)$$

бұдан

$$mc^2 = h(w - w') + m_0 c^2$$

$$m\vec{v} = h \cdot (\vec{k} - \vec{k}')$$

теңдеудің екі жағын да квадраттап, толқындық санның $\kappa = \frac{w}{c}$ екендігін ескеріп,

теңдеулерді қоссақ, теңдеулердің сол жағы: $m^2 \cdot c^4 - m^2 \cdot c^2 \cdot v^2 = m^2 \cdot c^4 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m_0^2 \cdot c^4$

сонда жалпы теңдеу:

$$m_0^2 \cdot c^4 = m_0^2 \cdot c^4 + h^2(w^2 - 2ww' + w'^2) - h^2(w^2 - 2ww' \cos \theta + w'^2) + 2m_0 \cdot c^2 \cdot h(w - w')$$

Жақшаларды ашып ұқсас мүшелерді жинақтайық, сонда:

$$m_0^2 \cdot c^2(w - w') = hww'(1 - \cos \theta)$$

Мұнда θ – рентген сәулелерінің шашырау бұрышы. Енді $\frac{w}{c} = \lambda$ рентген сәулелерінің толқын ұзындығын пайдаланамыз:

$$(\lambda - \lambda') \cdot \frac{m_0 c}{2\pi\hbar} = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

λ' - шашыраған рентген сәулелерінің толқын ұзындығы. Сонда рентген сәулелерінің толқын ұзындықтарының өзгерісі:

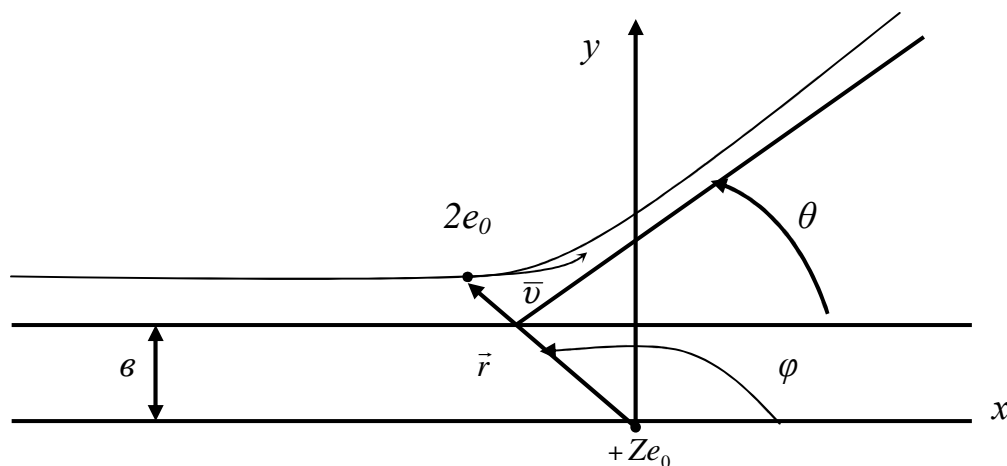
$$\Delta\lambda = (\lambda - \lambda') = 2 \cdot \lambda_0 \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.26)$$

мұндағы $\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar}{m_0 c} = 2,426 \cdot 10^{-11} \text{ см}$ - электронның комптондық толқын ұзындығы.

Сонымен, жарық сәулелерінің әрі толқындық, әрі бөлшектік қасиеттері (бөлшектік – толқындық дуализм) бар екендігін байқадық. Комптон эффектісінің кванттық теориясы электрон мен жарық квантының арасындағы импульстық, энергиялық, бұрыштық байланыстарды толық сипаттай алды.

§ 3. Атомның планеталық моделі. Бор постулаттары.

Атомның Бор – Резерфорд жасаған моделі Планктың кванттар жөніндегі болжамын атом құрылысына пайдаланудың алғашқы қадамы болды. Бор теориясының негізіне Резерфорд тағайындаған атомның планеталық моделі алынған. Резерфорд моделін классикалық теория тұрғысынан қарастырайық.



1.7-ші сурет.

Мұнда Ze_0 - ядроның заряды, θ – зарядталған бөлшектің атом ядросында шашырау бұрышы, φ – азимуттық бұрыш.

Заряды $+Ze_0$ ядро мен сыртқы электрондық қабықшасында бір электрон бар жүйені қарастырайық. Мұндай жүйелер – сутегі тәріздес атомдар деп аталады (сутегі, литий, натрий т.б.). Полярлық координаттар системасында (r, φ) электронның жылдамдығы

$$v^2 = v_{11}^2 + v_1^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2 \quad (1.27)$$

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt}, \quad \dot{\varphi} = \frac{d\varphi}{dt}$$

Кинетикалық энергия:

$$T = \frac{m_0}{2} \cdot (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) \quad (1.28)$$

Потенциалдық энергия:

$$U(r) = -\frac{Ze_0^2}{r} \quad (1.29)$$

m_0 - электронның массасы. Осы жүйені сипаттайтын Лагранж функциясы:

$$L = T - U = \frac{m_0}{2} \cdot (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{Ze_0^2}{r} \quad (1.30)$$

Жеке, тәуелсіз қозғалыстар үшін жалпы түрдегі қозғалыс теңдеулері:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (1.31)$$

мұндағы q_i – жалпылама координаттар, \dot{q}_i – жалпылама жылдамдықтар, $i = 1, 2, 3, \dots$ жүйенің еркіндік дәрежесі.

Енді біздің жағдайымыз үшін (1.31)-ші теңдеулерді мынадай түрде жазуға болады:

$$\frac{d}{dt} P_r - \frac{\partial L}{\partial r} = 0 \quad (1.32)$$

$$\frac{d}{dt} P_\varphi - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \quad (1.33)$$

φ - циклдік координата болғандықтан: $\frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0$, сонда

$$P_\varphi = m_0 r^2 \cdot \dot{\varphi} = \text{const} \quad (1.34)$$

(1.34)-бұрыштық моменттің сақталу заңы. Энергияның сақталу заңы (1.30)-Лагранж функциясына уақыттың айқын түрде еңбегендігінен шығады ($E = T + U = \text{const}$).

Қарастырып отырған есебімізді жеңілдету үшін, атомдағы электронның орбитасын дөңгелек деп алалық:

$$r = \text{const}, \quad \dot{r} = 0, \quad P_r = m_0 \dot{r} = 0 \quad (1.35)$$

сонда: $\frac{dL}{dr} = 0$ немесе: $\frac{dL}{dr} = \frac{m_0}{2} \cdot r \dot{\varphi}^2 - \frac{Ze_0^2}{r^2} = 0$ бұдан:

$$\dot{\varphi}^2 = \frac{Ze_0^2}{r^3} \quad (1.36)$$

Сонда жүйенің энергиясы:

$$E = T + U(r) = 1/2 \cdot U(r) \quad (1.37)$$

II. Эренфест атомды сипаттайтын негізгі параметрлерді жүйенің адиабаттық инварианты деп аталатын шама арқылы өрнектеуді ұсынды:

$$\oint P_i dq_i = J_i \quad (1.38)$$

мұндағы P_i – жалпылама импульстар, q_i – жалпылама координаттар. Адиабаттық инварианттар системаның параметрлері баяу (адиабаттық) өзгергенде тұрақты болуы қажет. Біздің жағдайымызда жүйенің тек бір еркіндік дәрежесі болғандықтан:

$$P_\varphi = m_0 r^2 \dot{\varphi} = \frac{J}{2\pi} \quad (1.39)$$

бұдан

$$\dot{\varphi}^2 = \frac{J^2}{4\pi^2 m_0^2 r^4} \quad (1.40)$$

(1.36)-шы және (1.40)-шы формулалардан:

$$r = \frac{J^2}{4\pi^2 m_0 Z e_0^2} \quad (1.41)$$

$$\dot{\varphi} = w = 2\pi\nu = \frac{8\pi^3 m_0 Z^2 e_0^4}{J^3} \quad (1.42)$$

атомның толық энергиясы:

$$E = -\frac{Z e_0^2}{r} = -2\pi^2 = \frac{m_0 Z^2 e_0^4}{J^2} \quad (1.43)$$

электронның сәуле шығару жиілігі

$$\nu_0 = \frac{w_0}{2\pi} = \frac{dE}{dJ} = \frac{4\pi^2 m_0 Z^2 e_0^4}{J^3} \quad (1.44)$$

$$\nu = \kappa \cdot \nu_0, \quad \kappa = 1, 2, 3, \dots \quad (1.45)$$

Сонымен, атомның классикалық теориясы бойынша электронның сәуле шығару жиілігі электронның механикалық айналу жиілігіне тең немесе пропорционал. Классикалық электродинамикада үдемелі қозғалыстағы зарядталған бөлшек үзіліссіз энергия бөліп шығаруы қажет:

$$-\frac{dE}{dt} = \frac{2e_0^2 a^2}{3c^3} \quad (1.46)$$

яғни, атомның Резерфорд ұсынған планетарлық моделі бойынша, ядроны айнала қозғалатын электрон үзіліссіз энергия бөліп шығара отырып, белгілі бір уақыттан кейін ядроға құлауы керек. Бірақ бұл тұжырым атомның электрлік бейтарап және орнықты жүйе екендігіне қайшы келеді. Осы қайшылықты жою үшін Бор (1913 ж.) атомның классикалық планетарлық моделін төмендегідей екі постулатпен толықтырды.

1 постулат: Әрбір атом дискретті стационар күйлерге ие, бұл күйлердегі электрондар үдей қозғалғанмен де, энергия бөліп шығармайды. Бор теориясы бойынша, бұл стационар күйлер адиабатты инварианттарды \hbar – Планк тұрақтысын кванттау арқылы анықталады.

$$\oint P_i dq_i = J_i = n\hbar \quad (1.47)$$

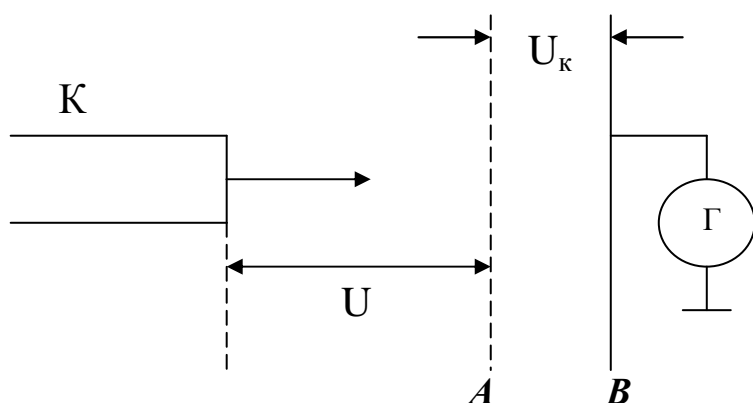
мұнда n – кванттық сан, ол тек бүтін мәндерге ие болады. $n = 1, 2, 3, \dots$

2 постулат: Электрон энергиясы E_n , n кванттық күйден, энергиясы $E_{n'} - n'$ кванттық күйге $|E_{n'} < E_n|$ ауысқанда атом энергиясы тең сәуле бөліп шығарады және бұл сәулелердің жиілігі мынадай қатынас бойынша анықталады:

$$W_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad (1.48)$$

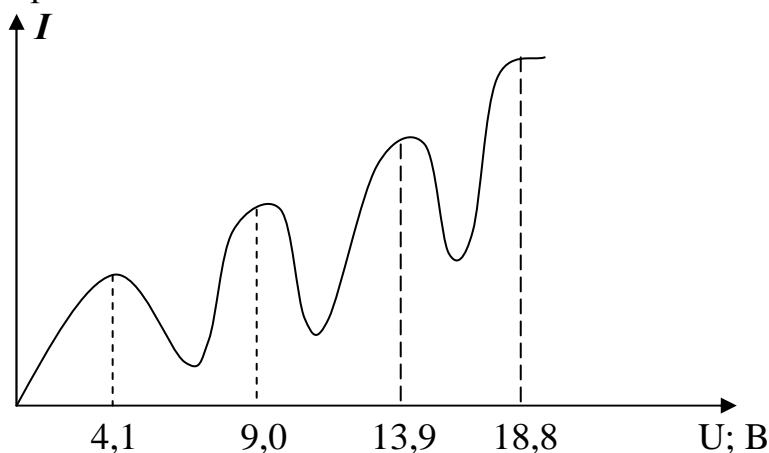
Бор постулаттарының дұрыстығы 1913 ж. Франк-Герц тәжірибесінің негізінде тағайындалды. Атом күйлерінің дискретті екендігі Франк-Герц (1913 ж.) тәжірибелерінде дәлелденді (1.8 сурет). Қыздырылған катодқа U – үдеткіш потенциал берілсін. Үдетілген электрондар қысымы $I_{\text{атм}}$ сынап буында қозғалып алдына A тор орналасқан B пластинаға бағытталады. Тор мен пластинаның арасына U_κ – кедергі

потенциал берілген ($\sim 0,5$ В). Сонда энергияларының шамасы осы кедергі потенциалдан артық электрондар ғана **B** пластинаға жетеді. Гальванометр пластинаға түскен электрондардың тогын көрсетеді.



1.8 сурет. Франк – Герц тәжірибесінің схемасы.

Тәжірибеде вольтамперлік тәуелділік зерттелген (1.9 сурет). Ток максимумдары бірінен бірі бірдей қашықтықта орналасқан. Бірінші максимум $U = 4,1$ В нүктесінде, ал қалған максимумдардың арасы $4,9$ В тең. Вольтамперлік тәуелділіктің графигін түсіндіру үшін электрондар сынап атомдарымен серпімсіз соқтығысқанда, атомдар шамасы $4,9$ В болатын дискретті энергияны жұтып алады деп қабылдау қажет. Ал, электрондардың энергиясы $4,9$ Вольттан кем жағдайда, олардың атомдармен соқтығысуы серпімді түсуге жеткілікті болады. Яғни, **B** пластинаға соқтығысуынан серпімді электрондар ғана келіп түседі, сондықтан потенциалдар айырымы $4,9$ В болғанда ток күші төмендей бастайды. Электрондардың бөлігі серпімсіз соқтығысудан кейін **A** тордан өтіп, **B** пластинаға түсуге жеткілікті потенциалдар айырымында ток күші кері ұлғая бастайды. Потенциалдар айырымы $9,8$ В болғанда, электрондар бірінші серпімсіз соқтығысудан кейін торға екінші серпімсіз соқтығысуға жеткілікті $4,9$ В энергиямен жетеді. Екінші серпімсіз соқтығысқаннан кейін электрон энергиясынан түгел айырылып **B** пластинаға жете алмайды. Сондықтан ток күші кері төмендей бастайды (графиктегі екінші максимум). Кейінгі максимумдар да осылай түсіндіріледі. Тәжірибеден сынап атомдарының негізгі күйі мен бірінші қозған күйінің энергияларының айырымы $4,9$ В, яғни атомның күйлері дискретті болады деген тұжырымға келеміз.



1.9 сурет. Франк – Герц тәжірибесіндегі Вольтамперлік тәуелділік.

Бор постулаттарын сүтегі тәріздес атомдар теориясын құруға пайдаланайық. (1.47)-ші қатынаста бір ғана айнымалы бар: $q_i = \varphi$ Сонда:

$$J = 2\pi \cdot n\hbar \quad (1.49)$$

Бұдан: n -ші орбитаның радиусы (1.41)-ші өрнектен:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_0 Z e_0^2} \quad (1.50)$$

n деңгейдегі электронның энергиясы

$$E_n = -\frac{m_0 Z e_0^4}{2 \hbar^2 n^2} \quad (1.51)$$

егер $n=1$ болса,

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} \cdot \frac{1}{Z} = a_0 \frac{1}{Z} \quad (1.52)$$

мұндағы $a = \frac{\hbar^2}{m_0 e_0^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ (1.53)

электронның 1-ші бор орбитасының радиусы.

Енді бор орбиталарымен қозғалатын электронның толық энергиясын табалық. Бұл энергия потенциалдық энергия:

$$U(r) = -\frac{Z e_0^2}{r_n} = -\frac{Z^2 e_0^4 m_0}{\hbar^2 n^2} \quad (1.54)$$

мен кинетикалық энергияның

$$T = \frac{m_0 v_n^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{Z^2 e_0^4 m_0}{\hbar^2 n^2} \quad (1.55)$$

қосындысына тең болады:

$$E_n = T + U = -\frac{1}{2} \cdot \frac{Z^2 e_0^4 m_0}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1.56)$$

Сонда бірінші бор орбитасындағы электронның энергиясы:

$$E_n = -\frac{Z^2 e_0^4 m_0}{2 \hbar^2} \quad (1.57)$$

Электрон бір орбитадан келесі орбитаға ауысқанда бөлінетін сәуленің жиілігі

$$W_{m'm'} = -\frac{m_0 e_0^4}{2 \hbar^3} \cdot Z^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R Z^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.58)$$

(1.58)-ші өрнек Бальмер формуласы деп аталады, ол Бор постулаттарынан бұрын тәжірибе негізінде тағайындалған (1885 ж.).

$$R = \frac{m_0 e_0^4}{2 \hbar^3} = 2,07 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1} - \text{Ридберг тұрақтысы.}$$

Бальмер формуласы мен Ридберг тұрақтысының мәндерінің дұрыс алынуы Бор теориясының негізгі жетістіктерінің бірі болды. Жартылай кванттық теория болып табылатын Бор теориясының негізгі кемшіліктері мыналар:

Біріншіден, бұл теория бойынша спектрлік сызықтардың тек жиіліктерін есептеуге болады, ал олардың қарқындылығын есептеу мүмкін болмады.

Екіншіден, Бор теориясын пайдаланып, көп электронды атомдар теориясын жасау мүмкін емес.

Сондықтан Н. Бор негізгі постулаттарды сәйкестендіру қағидасымен толықтыруды ұсынды. Бұл қағидаға сәйкес тәжірибеде дәлелденген ескі теорияның негізгі қорытындысы жаңа теорияның шекті жағдайы болуы тиіс. Мысалы: кванттық механиканың нәтижелері $\hbar \rightarrow 0$ жағдайда толығынан классикалық теорияның нәтижелеріне айналуы керек.

2 ТАРАУ

БӨЛШЕКТЕРДІҢ ТОЛҚЫНДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

§ 1. Де Бройль болжамы

Жарықтың бөлшектік және толқындық қасиеттері тәжірибеде дәлелденген. Жарықтың осы қасиеттеріне сүйене отырып француз физигі Луи де Бройль бөлшектердің де толқындық қасиеттері бар деген болжам жасады (1924). «Оптикада, - деп жазады ол, - жүздеген жылдар бойы жарықтың тек толқындық қасиеттері қарастырылып, корпускулалық қасиеттеріне толық көңіл бөлінбеді, ал материя теориясында осыған керісінше қате жасалынған жоқ па екен? Мүмкін біз "бөлшек" көрінісі жайында көбірек ойлап, толқындық көрінісіне енжар қараған шығармыз?» Де Бройль қойған негізгі сұрақ осы болды. Материялық бөлшектердің толқындық қасиеттері бар деп болжаудың мынадай себептері болды: XIX ғасырдың басында Гамильтон геометриялық оптика мен механиканың арасында терең ұқсастық бар екендігін байқады. Әртүрлі табиғат құбылыстарын сипаттайтын физиканың негізгі екі саласының негізгі заңдылықтарын математикалық жағынан бірдей түрде тепе-теңдік формада беруге болатындығы тағайындалды. Де Бройль болжамы бойынша энергиясы

$$E = mc^2 \quad (2.1)$$

импульсі

$$\vec{P} = m\vec{v}$$

массасы

$$m = m_0 / \sqrt{1 - v^2/c^2} \quad (2.2)$$

Бөлшектер ағынына энергиясы:

$$E = \hbar\omega \quad (2.3)$$

импульсі

$$\vec{P} = \hbar\vec{k} \quad (2.4)$$

толқындар сәйкес келеді.

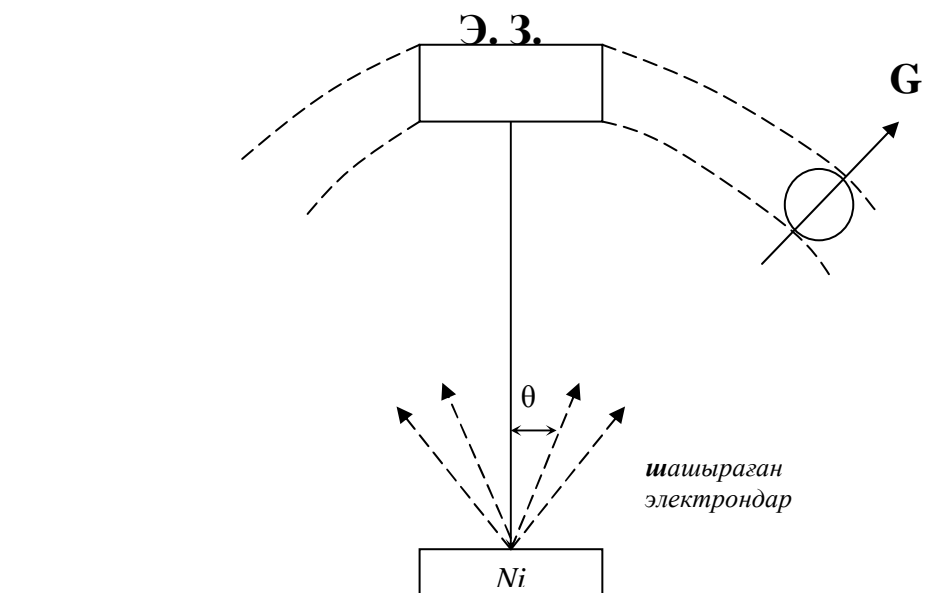
(2.1-2.4) қатынастардан бөлшектің толқындық және корпускулярлық қасиеттерін байланыстыратын мынандай қатынас аламыз:

$$P = \frac{h}{\lambda} \quad \text{немесе} \quad \lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{mv} \quad (2.5)$$

λ - бөлшектің де Бройль толқын ұзындығы, $h = 2\pi\hbar$.

Егер материялық бөлшек потенциалдық $U(x, y, z)$ өрісте қозғалса, жарық сәулесі қозғалысын көрсеткіші $\mu(x, y, z)$ оптикалық біртекті емес ортада қарастыруға болады. Мұндай ұқсастық тек классикалық механика мен геометриялық оптиканың арасында ғана болады. Бірақ геометриялық оптика жарықтың барлық қасиеттерін түгел түсіндіре алмайды. Интерференция, дифракция сияқты құбылыстарды түсіндіру үшін толқындық оптиканы пайдалану қажет. Ал геометриялық оптика толқындық оптиканың шектік жағдайы болып табылады. Екінші жағынан, механиканың да

қолданылу шегі бар. Мысалы, ол атомдық жүйелердегі энергиялық деңгейлердің дискреттілігін түсіндіре алмайды. Де Бройльдің негізгі идеясы механика мен оптиканың арасындағы ұқсастықты кеңейтіп, толқындық оптиканы классикалық механикаға қарағанда тереңірек, атомдық деңгейдегі құбылыстарды түсіндіре алатын толқындық механикаға сәйкестендіру. Электрондардың толқындық қасиеттерінің бар екендігі Дэвидсон-Джермер тәжірибесінде, электрондардың дифракция құбылысын бақылау нәтижесінде тағайындалды. (2.1 сурет).



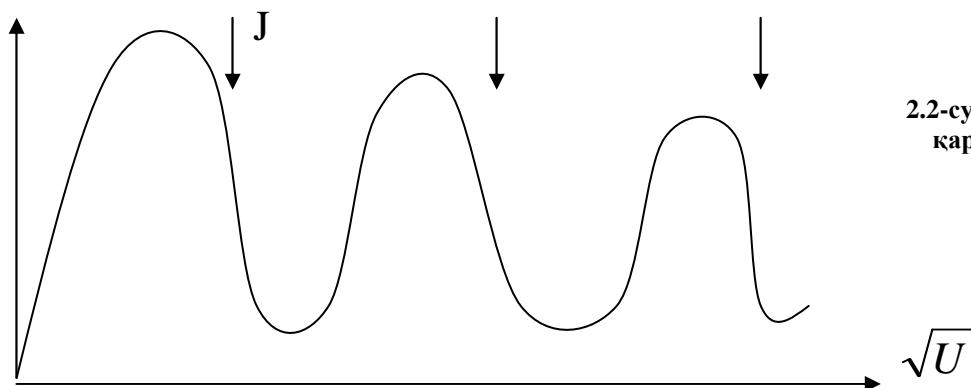
2.1-сурет. Дэвидсон-Джермер тәжірибесінің схемасы.

Электрондық зеңбіректен (Э.З.) ~ 50 эВ энергиямен шыққан электрондар никель кристалына перпендикуляр бағытталған. Кристалл бетін жазық дифракциялық тор ретінде қарастырып, одан шығатын электрондардың қандай бұрышқа бағытталатынын гальванометр арқылы анықтайды. Егер электрондардың дифракциялық қасиеті болса, онда дифракциялық максимумның орнын төмендегіше анықтайды:

$$d \sin \theta = n\lambda \text{ немесе } d \sin \theta = n \cdot \frac{1 \cdot 2 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{U}} \quad (2.6)$$

U – үдеткіш потенциал, n – дифракциялық максимумның орналасу реті, d – дифракциялық тор тұрақтысы.

Тәжірибенің нәтижелері 2.2-ші суретте келтірілген. Дэвидсон-Джермер тәжірибелері электрондардың толқындық қасиетінің бар екендігін және (2.5)-ші де Бройль формуласының дұрыс екендігін дәлелдеді.



2.2-сурет. Шашыраған электрондардың қарқындылығының бөлшектердің энергиясынан тәуелділігі.

2. Фазалық және группалық жылдамдықтар. Толқындық пакет.

Де Бройль бос бөлшектердің қозғалысын толқындық функциямен сипаттауды ұсынды. Жеке жағдайда мұндай функцияның орнына жарық қозғалысын сипаттайтын монохроматты жазық толқынды пайдалануға болады:

$$\psi(x, t) = Ae^{-2\pi i \left(vt - \frac{x}{\lambda} \right)} \quad (2.7)$$

немесе
$$\psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t - kx)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - px)} \quad (2.8)$$

Де Бройль толқындарының кеңістікте таралуын қарастырып, олардың фазалық және топтық жылдамдықтарын табалық. Егер толқын x нүктесінен $X = x + \Delta x$ нүктесіне Δt уақыттың ішінде орын ауыстырса яғни Δt ішінде фаза $\varphi = (Et - px) \frac{i}{\hbar}$ x нүктесінен x_1 нүктесіне ауысады, сонда фазаның тұрақтылық шартынан

$$Et_1 - px_1 = Et - px = const \quad (2.9)$$

$E(t_1 - t) - p(x_1 - x) = 0$ бұдан фазалық жылдамдық

$$u = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} > c \quad (2.10)$$

(2.10)-қатынастан микробөлшектер қозғалысына сәйкес келетін монохроматты жазық толқынының фазалық жылдамдығының жазық жылдамдығынан артық болатындығын көреміз. Арнайы салыстырмалы теориясы бойынша бөлшектердің таралу жылдамдығы, жалпы кез келген мәліметтің берілу жылдамдығы жарық жылдамдығынан артық болмауы тиіс. Сондықтан (2.10)-қатынас монохроматты жазық толқындардың жеке бөлшектердің қозғалысын сипаттай алмайтындығын көрсетеді. Жеке бөлшектердің қозғалысын сипаттау үшін жиілігі біріне бірі жақын, бірнеше монохроматты жазық толқындарды жинастырып, толқындық пакет құрған дұрыс. Мұндай толқындық пакеттің қорытқы амплитудасын бөлшектің кеңістіктің әртүрлі нүктелерінде болуы ықтималдығымен байланыстыруға болады. Толқындық пакеттің қорытқы амплитудасының таралу жылдамдығы, бөлшектердің топтық жылдамдығынан кем, ал Де Бройль толқындары үшін толқындық пакеттің фазалық жылдамдығы бөлшектердің топтық жылдамдығына тең болатындығын дәлелдейік. Ол үшін толқындық сандары

$$\kappa_0 - \frac{\Delta \kappa}{2} \text{ мен } \kappa_0 + \frac{\Delta \kappa}{2}$$

аралығында жататын жазық толқындардан толқындық пакет құрамыз. Мұндай пакеттің таралуын сипаттайтын толқындық функция

$$\Psi(x, t) = \int_{\kappa_0 - \frac{\Delta \kappa}{2}}^{\kappa_0 + \frac{\Delta \kappa}{2}} a(\kappa) l^{-i(\omega t - \kappa x)} dx \quad (2.11)$$

мұнда $\omega = f(\kappa)$, ал амплитуда $a(\kappa) = \frac{A}{\Delta \kappa}$ яғни берілген аралықта тұрақты деп қарастырайық. $\omega = f(k)$ функциясын $k = k_0$ нүктесінің аймағында Тейлор қатарына жіктейміз:

$$w = w(\kappa_0) + \kappa - \kappa_0 \left. \frac{\partial w}{\partial \kappa} \right|_{\kappa = \kappa_0} + \frac{(\kappa - \kappa_0)^2}{2!} \cdot \left. \frac{\partial^2 w}{\partial \kappa^2} \right|_{\kappa = \kappa_0} + \dots = w_0 + w_1 + w_2 \dots \quad (2.12)$$

(2.12)-ші қатардың алғашқы екі мүшесімен шектелелік, $w = w_0 + w_1$. Екінші ретті аз шама деп ескермеген мүшеміз:

$$w_2 = \frac{(\kappa - \kappa_0)^2}{2} \frac{\partial^2 w}{\partial \kappa^2} \quad (2.13)$$

Сонда (2.11) толқындық функция мынадай түрге келеді:

$$\Psi(x, t) = B e^{-i(w_0 t - \kappa_0 x)} \quad (2.14)$$

мұнда $B = A \frac{\sin \xi}{\xi}$ (2.15)

$$\xi = \frac{\Delta \kappa}{2} (x - w'_0 \cdot t) \quad (2.16)$$

(2.15), (2.16)-шы қатынастардан микробөлшек қозғалысын сипаттайтын толқындық пакеттің кеңістікте де, уақыт бойынша да тұрақты болмайтындығын көреміз. Енді толқындық пакеттің қозғалыс жылдамдығын табу үшін амплитуданың белгілі бір мәнінде ξ

$$\xi = \frac{\Delta \kappa}{2} (x - w'_0 \cdot t) = \text{const} \quad (2.17)$$

деп қарастырып, бұдан жылдамдық \bar{U}

$$\bar{U} = \frac{\partial x}{\partial t} = w'_0 = \frac{\partial w}{\partial \kappa} \quad (2.18)$$

Толқындық пакеттің кеңістікте шоғырлануын қарастыралық. (2.17)-ші өрнектен $t = 0$ деп алсақ, онда

$$\xi = \frac{\Delta \kappa}{2} x \quad (2.19)$$

Толқындық пакеттің амплитудасының квадраты, өзінің максимум мәніне $\xi \rightarrow 0$ болғанда жетеді:

$$B^2 = A^2 \quad (2.20)$$

Амплитуда квадратының басқа салыстырмалы максимумдерінің мәндері $\xi = \pm \frac{3\pi}{2}, \pm \frac{5\pi}{2}, \pm \frac{7\pi}{2} \dots$ үшін амплитудалар:

$$B^2 \left(\pm \frac{3\pi}{2} \right) = A^2 \frac{4}{9\pi^2}, B^2 \left(\pm \frac{5\pi}{2} \right) = A^2 \frac{4}{25\pi^2}, \dots \quad (2.21)$$

Ал, $\xi = \pm \pi, \pm 2\pi, \dots$ мәндерінде толқындық пакеттің амплитудасы нольге тең.

Толқындық пакеттің кеңістікте шоғырлануының негізгі облысы $[-\pi, +\pi]$ аралығы. Яғни

$$\xi = \frac{1}{2} (2\xi_0) = \frac{1}{2} \Delta \kappa \cdot \Delta x = \pi \quad (2.22)$$

Бірақ толқындық пакеттің амплитудасы бұл облыстың сыртында да нольден өзгеше болатындықтан (2.22) теңдікті теңсіздікпен алмастыралық:

$$\Delta \kappa \cdot \Delta x \geq 2\pi \quad (2.23)$$

(2.23)-шы өрнектен монохроматты жазық толқындардан құрылған толқындық пакеттің микробөлшектердің қозғалысын сипаттай алмайтындығын көреміз. Енді толқындық пакеттің уақыт бойынша шоғырлануын қарастыралық, ол үшін (2.16) қатынастан $x = 0$ деп алсақ

$$\xi = -\frac{\Delta k}{2} \cdot w \quad (2.24)$$

Жоғарыдағы талдауды қайталасақ, төмендегі қатынасқа келеміз

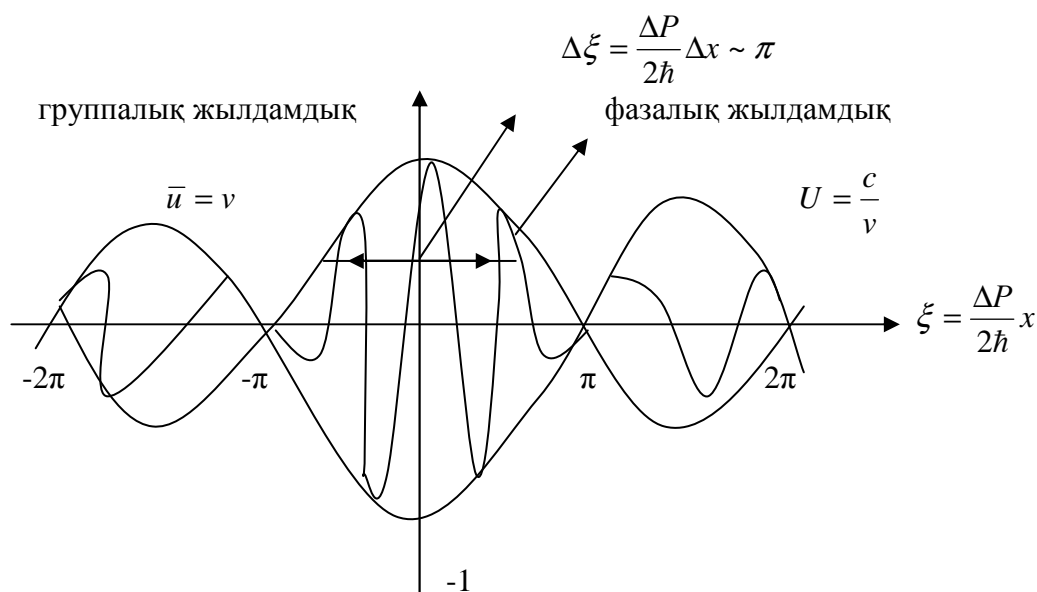
$$\Delta w \cdot \Delta t \geq 2\pi \quad (2.25)$$

Толқындық пакеттің кеңістікте таралуында екінші ретті аз шама деп ескерілмеген мүшенің толқындық процеске тигізетін әсерін қарастыралық:

$$w_2 = \frac{(k - k_0)^2}{2!} \cdot \frac{\partial^2 w}{\partial k^2} \Big|_{k = k_0}$$

Егер толқындық пакеттің дисперсиясы болмай, яғни пакет тек монохроматты жазық толқындардан тұрса, онда (2.13) теңдеуді ескермеуіміз дұрыс. Себебі, мұндай кеңістікте пакет өзгермейді, тұрақты фазалық жылдамдықпен қозғалады. Керісінше, дисперсия құбылысы болса, онда (2.13) мүшені ескермеу мүмкін емес, себебі мұндай толқындық пакеттің фазалық жылдамдығы тұрақты болмайды, толқындық пакеттің формасы уақыт бойынша өзгеріп, сейіле бастайды.

Осы алынған нәтижелерді де Бройль толқындарына қолданайық (2.3 сурет). (2.18)-ші қатынас бойынша толқындық пакеттің жылдамдығы мынаған тең:



Сурет 2.3. Де Бройль толқындарынан құрылған толқындық пакеттің кеңістіктегі t уақыт моментіндегі формасы.

$$\bar{v} = \frac{\partial w}{\partial k} = \frac{\partial E}{\partial P} \quad (2.26)$$

Ал бөлшектің энергиясы $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ бұдан

$$\bar{v} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v \quad (2.27)$$

яғни де Бройль толқындарынан тұратын толқындық пакеттің топтық жылдамдығы бөлшектің қозғалыс жылдамдығына тең. (2.24) қатынасты түрлендіру нәтижесінде

$$\frac{2\pi}{\kappa} = \frac{h}{p}, \quad \Delta \kappa = \frac{2\pi \Delta p}{h} \quad (2.28)$$

мұндай өрнекке келуге болады:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq h \quad (2.29)$$

(2.29) теңсіздік кванттық механикада анықталмаған қатынас деп аталады, оны В. Гейзенберг тағайындаған. Бұл қатынас бойынша микробөлшектердің координаталары мен импульстерін нольге тең дәлдікпен анықтау мүмкін емес. Сондықтан кванттық механикада классикалық физиканың негізгі ұғымдарының бірі— материалдық нүктенің траекториясы ұғымы өзінің мағынасын жояды. Мысалы, атомдағы электронның траекториясының болмауы, оның басқа да динамикалық характеристикаларының жойылуына соқтырады. Бұл тек кванттық объектілерден тұратын жүйелерден логикалық тұйықталған механика құруға болмайтындығын көрсетеді. Электронның қозғалысын сандық тұрғыдан сипаттау үшін классикалық механика заңдылықтарына бағынатын физикалық объектілер қажет болады. Егер электрон мұндай "классикалық объектімен" әсерлессе, онда бұл объектінің де күйі өзгереді. Бұл өзгерістің түрі мен мөлшері электронның күйіне байланысты болады. Сондықтан кванттық механикада классикалық объектіні — "прибор" деп, ал оның электронмен әсерлесуін "өлшеу" деп атайды. Бірақ мұндай "өлшеу" физик-экспериментатордың өлшеу процесімен бірдей емес екендігін ескерген дұрыс. Кванттық механикада "өлшеу" деп бақылаушыға байланысты емес және тәуелсіз жүретін классикалық және кванттық объектілердің арасындағы кез келген әсерлесуді айтады. Сонымен, "прибор" деп жұмыс принципі классикалық физика заңдылықтарына бағынатын физикалық объектіні айтамыз.

Енді бөлшектердің толқындық қасиетінің бөлшектердің құрылымымен тікелей қатынасы бар ма, жоқ па соны қарастыралық. Э. Шредингер толқындық қасиет микробөлшектердің құрылымымен тікелей байланысты және бөлшектің кеңістікте "қожырауы" - $(\Psi\Psi^*)$ -ге тең деген интерпретация ұсынды. Мұндай түсініктің қате екені тағайындалды. Анықталмағандық қатынастан толқындық пакеттің сейілу уақыты

$$t = \frac{m_0}{\hbar} (\Delta x)^2 \quad (2.30)$$

теория бойынша өлшемі микробөлшектің радиусына жуық толқындық пакетті құрастыруға әр уақытта да болады. Бірақ мұндай бөлшек орнықты болмайды. Себебі пакетті құрайтын әрбір монохроматты жазық толқынның фазалық жылдамдығы толқындық санға не импульске тәуелді болады. Сондықтан толқындық пакет уақыт өткен сайын ұлғайып, сейіле бастайды. Егер қарастырылып отырған бөлшек микробөлшек болса, мысалы массасы $m = 1$ г., мөлшері $\Delta x = 0,1$ см, бұл жағдайда толқындық пакеттің сейілу уақыты $t = 10^{25}$ с. яғни мұндай толқындық пакет іс жүзінде сейілмейді. Керісінше, бөлшек – электрон болса, $m = 10^{-31}$ г., $x = 10$ см., онда сейілу уақыты $t = 10^{-26}$ с. Мұндай толқындық пакет лезде сейіледі, яғни, электрондарды жеке толқындардың жиыны деп қарастыруға болмайды.

Қазіргі уақытта толқындық функцияның М. Борн ұсынған статистикалық интерпретациясы қабылданған. Борн бойынша толқындық функцияның модулінің квадраты $|\Psi|^2$ бөлшектің кеңістіктің әртүрлі нүктелерінде болу ықтималдылығының тығыздығын сипаттайды:

$$W \sim |\Psi|^2$$

Статистикалық интерпретация бойынша толқындық қасиет бөлшектің структурасымен тікелей байланысты емес, сондықтан электрондарды немесе басқа да бөлшектерді нүктелік бөлшек деп қарастыра беруге болады. Толқындық функцияның уақыт бойынша өзгеруі микробөлшектердің кеңістіктің әртүрлі нүктелерінде болу

ықтималдылығының өзгеруін көрсетеді. Ал микробөлшектің құрылымы Борн интерпретациясында мүлдем қарастырылмайды. Бірақ бұл интерпретация жеке микробөлшектердің қозғалысын түсіндіре алмады.

3 ТАРАУ. КВАНТТЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ НЕГІЗГІ ҚҒЫМДАРЫ

§1. Еркін қозғалыстағы бөлшектің толқындық функциясы

Классикалық механикада бөлшектің қозғалысы динамикалық айнымалылар деп аталатын координата, импульс сияқты физикалық шамалар арқылы сипатталады. Әрбір уақыт моментінде бұл физикалық шамалар нақты мәндерге ие болады. Сондықтан классикалық механикада бөлшектің қозғалысын сипаттаудың негізгі мақсаты осы динамикалық айнымалылардың уақытқа тәуелділігін тағайындау болып табылады. Ал, кванттық механикада динамикалық айнымалылардың әртүрлі мәндерінің ықтималдылығы мен олардың орта мәндері ғана қарастырылады.

Кванттық механикада атомдық объектілердің қасиеттері толқындық функция немесе күй функциясы деп аталатын арнайы функциямен сипатталады. Жалпы жағдайда, толқындық функция координаталар мен уақытқа байланысты күрделі функция $\psi(x, y, z, t)$. Толқындық функция микробөлшектердің қозғалысын сипаттайтын белгілі бір дифференциалдық теңдеуді қанағаттандыруы қажет. Бұл теңдеу Шредингер теңдеуі деп аталады. Шредингер теңдеуінің кванттық механикадағы орны классикалық физикадағы Ньютон заңдарымен шамалас.

Массасы m_0 , импульсі p , энергиясы $E = p^2/2m_0$ релятивті микробөлшектің еркін қозғалысын қарастырайық. Мысал ретінде потенциал айырмашылық U электрондық түтінше арқылы өтетін электрондар ағынының қозғалысын алайық. Бұл электрондардың

Импульсі $p = \sqrt{2m_0e_0U}$

мұнда e_0 - электронның заряды, m_0 - массасы.

Дэвидсон-Джермер тәжірибелерінің нәтижесінде электрондар ағыны периодтық құрылымды денелермен (кристалдар, фольга) әсерлескенде электрондардың кеңістікте үлестірілуін бақылауға болатындығы тағайындалған еді. Бұл толқындық процесті сипаттайтын толқындардың ұзындығы мен электрондардың қозғалыс жылдамдығы арасындағы байланыс

$$\lambda = \frac{h}{m_0v} = \frac{2\pi}{k} \quad (3.1)$$

Осы тәжірибелік деректерге сүйене отырып, импульсі \vec{p} электронның еркін қозғалысына де Бройльдің жазық толқындарын сәйкестендіруге болады:

$$\Psi(\vec{r}, t) = A e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})} \quad (3.2)$$

мұнда

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m_0\hbar}, \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (3.3)$$

Сонымен белгілі бір энергиясы мен импульсі бар еркін бөлшектің қозғалысы (3.2) формуламен өрнектелетін толқындық функциямен сипатталады.

§2. Кванттық механикадағы суперпозиция принципі

Кванттық механиканың негізгі ұғымдарының бірі – күйлерді суперпозициялау принципі. Қысқаша түрде бұл қағида мынадай екі тұжырымнан тұрады:

1. Егер система Ψ_1 және Ψ_2 толқындық функцияларымен сипатталатын кванттық күйлерде болса, онда система осы функциялардың сызықтық түрлендіруі болатын мынадай күйде де бола алады

$$\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 \quad (3.4)$$

a_1, a_2 — уақытқа тәуелсіз, кез келген комплекс сандар.

2. Егер бір күйді сипаттайтын толқындық функцияны кез келген, нольге тең емес комплекс санға көбейтсек, жаңа алынған B функция да сол күйді сипаттайды.

Күйлердің суперпозициялық қағидасы орындалуы үшін толқындық функциялар қанағаттандыратын Шредингер теңдеулері сызықтық теңдеулер болуы қажет. Жалпы жағдайда, жүйе бірінен бірі айырмашылығы аз физикалық шамалармен сипатталатын күйлерден тұрып, олар Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 - толқындық функциялармен өрнектелсе, кванттық суперпозиция қағидасы бойынша,

$$\Psi = a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2 + a_3 \Psi_3 + \dots + a_n \Psi_n \quad (3.5)$$

немесе

$$\Psi = \sum_{i=1}^n a_i \Psi_i \quad (3.6)$$

толқындық функциямен сипатталатын күрделі күйде де болуы қажет. Егер суперпозицияға енетін күйлердің бірінен бірінің айырмашылығы шексіз аз шама болса, (3.6)-шы формуладағы қосындыны интегралға ауыстыру қажет. Мұндай жағдайдың мысалы ретінде $\Psi(x, y, z, t)$ функциясымен сипатталатын кез келген толқындық өрісті де Бройль толқындарының суперпозициясы ретінде қарастыруға болатындығын көрсетейік:

$$\Psi_p(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\frac{(Et - \vec{p}\vec{r})}{\hbar}} \quad (3.7)$$

Кез келген кванттық күйдің толқындық функциясы

$$\Psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} a(p_x, p_y, p_z, t) \Psi_p(x, y, z, t) dp_x dp_y dp_z \quad (3.8)$$

мұнда $a(p_x, p_y, p_z, t)$ мен $\vec{p}(p_x, p_y, p_z, t)$ - де Бройль толқындарының амплитудасы және импульсі.

(3.5)-ші қатынас $\Psi(x, y, z, t)$ функциясын үшінші ретті Фурье қатарына жіктеумен пара-пар. Бұл тұжырымды дәлелдеу үшін мынадай белгілеу

$$\varphi(p_x, p_y, p_z, t) = a(p_x, p_y, p_z, t) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (3.9)$$

Сонда (3.7)-ші өрнектің негізінде (3.8)-ші теңдеуді былай жазуға болады:

$$\Psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p_x, p_y, p_z, t) e^{i \frac{p_x \cdot x + p_y \cdot y + p_z \cdot z}{\hbar}} \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (3.10)$$

Сонымен, кванттық суперпозиция принципі бойынша кезкелген күйді де Бройль толқындарының импульсі $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ бөлшек күйлерінің суперпозициясы ретінде қарастыруға болады.

§ 3. Микробөлшектердің кеңістіктің әртүрлі нүктелерінде болу ықтималдылығы

Кванттық механикада жүйенің күйін сипаттау үшін $\Psi(x, y, z, t)$ толқындық функция берілсін. Осы функцияның модулінің квадраты

$$\Psi(x, y, z, t) \Psi^*(x, y, z, t) = |\Psi|^2 \quad (3.11)$$

бөлшектің кеңістіктің белгілі бір бөлігінде болу ықтималдылығына пропорционал болады. Ал, бөлшекті q_1, q_2, \dots, q_n нүктесінің төңірегінде $d\vartheta = dq_1 \cdot dq_2, \dots, dq_n$ кішкене көлемде табу ықтималдылығы:

$$dW = \Psi^* \cdot \Psi dq_1 \cdot dq_2, \dots, dq_n = |\Psi|^2 d\vartheta \quad (3.12)$$

Жеке жағдайда, бір бөлшек үшін декарт координаталар жүйесінде (3.12)-ші қатынасты былай жазуға болады:

$$dW = \Psi^*(x, y, z) \cdot \Psi(x, y, z) dx dy dz = |\Psi(x, y, z)|^2 dx dy dz \quad (3.13)$$

Кванттық механиканың негізгі ерекшелігі – жүйенің күйі комплексті толқындық функциямен сипатталады және оның модулінің квадраты $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$ бөлшектердің кеңістіктің белгілі бір бөлігінде болу ықтималдылығының тығыздығына тең болады. Бұл тұжырымнан мынадай екі салдар шығады: біріншіден, Ψ – функцияны кез келген l фазалық көбейткішке көбейткеннен бөлшектердің кеңістікте болу ықтималдылық тығыздығы:

$$dw = |\Psi|^2 \quad (3.14)$$

және толқындық функция сипаттайтын физикалық шаманың мағынасы өзгермейді. Мұнда l – кез келген нақты сан. Екіншіден, микробөлшекті кез келген V -көлемде табу ықтималдылығы (3.14)-ші формула бойынша

$$W = \int_{\gamma} dw = \int |\Psi|^2 dv \quad (3.15)$$

Егер соңғы өрнектегі интеграл бүкіл кеңістік бойынша алынса, онда ықтималдылық анықтыққа ауысады, бөлшек кеңістікте қалай да табылады. Сондықтан, Ψ – функцияны бірге нормалай аламыз:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dv = 1 \quad (3.16)$$

Сонымен, толқындық функция нормалануы қажет, яғни оның модулінің квадраты интегралдануы керек. Бұл шарт толқындық функцияның шексіздікте өте тез кемитін (өшетін) функция болуы керек екендігін талап етеді.

4 ТАРАУ.

КВАНТТЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ АППАРАТЫ

§1. Физикалық шамаларды сызықтық, өзара түйіндес операторлармен сипаттау

Кванттық механиканың математикалық аппаратының негізіне – кванттық жүйе координаталарға тәуелді $\Psi(x, y, z, t)$ функциясымен сипатталып, осы функцияның модулінің квадраты координаталар мәндерінің кеңістікте үлестірілуінің ықтималдылығын көрсетеді деген тұжырым жатыр.

Көптеген тәжірибелер кейбір физикалық шамалардың белгілі бір жағдайларда үзілісті мәндерге ие болатынын көрсетеді. Классикалық физикада мұндай жағдай белгісіз еді. Сондықтан классикалық физикада физикалық шамалар үзіліссіз, дифференциалданатын функциялармен сипатталады. Ал кванттық механикада физикалық шамалар үзіліссіз де, дискретті де мәндерге ие болуы мүмкін. Мысалы: бос электрондардың координатасы, импульсі үзіліссіз мәндерге, ал атомдардағы электронның энергиясы E мен импульс моменті M дискретті мәндерге ие болады.

Мысалы, Бор теориясы бойынша сутегі атомындағы электронның энергиясының мәндері үзілісті:

$$E = -\frac{m_0 Z^2 e_0^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.1)$$

Үзіліссіз, дифференциалданатын функциялармен дискретті мәндерге ие болатын физикалық шамаларды сипаттау мүмкін емес. 1925 жылы алдымен Гейзенберг, кейін Дирак кванттық механикадағы физикалық шамалардың математикалық көрінісі ретінде функцияларды емес, операторларды пайдалану керек екендігін тағайындады.

Математикада функция деп белгілі бір нақты сандарға басқа бір сандарды сәйкестендіруді айтады. Ал, операторлар деп белгілі бір функцияларға басқа белгілі функцияларды сәйкестендіруді айтамыз.

$$\hat{L}U(x) = v(x) \quad (4.2)$$

$$\text{Мысалы: } \hat{L} = \frac{\partial}{\partial x}, \quad U(x) = x^2, \ln x, e^x, \quad \text{онда } v(x) = 2x, 1/x, e^x$$

Классикалық механикада қозғалыстың үзіліссіз болуына байланысты пайдаланылатын функциялар белгілі бір талаптарға сәйкес болу керек. Үзіліссіз, дифференциалданатын, шектелген және модулінің квадраты интегралданатын функцияларды регуляр функциялар деп атайды. Осы сияқты кванттық механикадағы операторлар да белгілі бір талапқа жауап беруі қажет. Кванттық механикада күйлерді суперпозициялау қағидасы бұзылмауы үшін тек сызықтық және өзара түйіндес операторлар ғана пайдаланылады. Оператор \hat{L} сызықтық деп аталады, егер төмендегі шарт орындалса:

$$\hat{L}[C_1 U_1(x) + C_2 U_2(x)] = C_1 \hat{L}U_1(x) + C_2 \hat{L}U_2(x) \quad (4.3)$$

Оператор \hat{L} өзара түйіндес деп аталады, егер мынандай теңдік орындалса

$$\int U_1^*(x) \hat{L}U_2(x) dx = \int U_2(x) \hat{L}U_1^*(x) dx \quad (4.4)$$

Мысалы $\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ операторының өзара түйіндес оператор екендігін дәлелдейік:

$$-i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} U_1^*(x) \frac{\partial U_2}{\partial x} dx = -i\hbar U_1^*(x)U_2(x)|_{+\infty} + i\hbar \int U_2(x) \frac{\partial U_1^*(x)}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} U_2(x) \hat{P}_x^* U_1^*(x) dx$$

мұнда $U_1^* U_2|_{\pm\infty} = 0$.

Сызықтық және түйіндес операторлар эрмиттік операторлар деп аталады.

\hat{L} операторының өзара түйіндестігін сипаттайтын (4.4)-ші функционалдык теңдеуді қысқаша мынадай түрде жазуға болады:

$$\hat{L} = \hat{L}^* \quad (4.5)$$

Сызықтық операторлардың негізгі қасиеттері:

1. \hat{C} операторы \hat{A} және \hat{B} операторларының қосындысы деп аталады, егер мынадай қатынас орындалса:

$$\hat{C}\Psi = \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi, \quad \hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \quad (4.6)$$

2. C операторы A және B операторларының көбейтіндісі болады, егер

$$\hat{C}\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi) \quad (4.7)$$

шарты орындалса.

Операторларды қосуға, көбейтуге, тағы басқа амалдарды қолдануға болады, бірақ олардың орындарын ауыстыруға болмайды. Ψ -толқындық функциясымен сипатталатын кванттық күйдегі физикалық шама L -дің орта мәні кванттық механикада мынадай қатынас бойынша анықталады:

$$\bar{L} = \int \Psi^*(x) \hat{L} \Psi(x) dx \quad (4.8)$$

Мұнда \hat{L} - физикалық шама L – ге сәйкес келетін сызықтық, өзара түйіндес оператор.

(4.8)-ші теңдеудің комплекс түйіндесін анықталық:

$$\bar{L}^* = \int \Psi^*(x) \hat{L}^* \Psi^*(x) dx \quad (4.9)$$

(4.8)-ші және (4.9)-шы теңдеулерді (4.4) – ші теңдеуімен салыстырсақ:

$$\bar{L} = \bar{L}^* \quad (4.10)$$

Яғни, кванттық механикада физикалық шаманың орта мәні әр уақытта да нақты болады. Сонымен кванттық механикада барлық физикалық шамаларға сызықтық (суперпозиция қағидасы сақталуы үшін) және өзара түйіндес (физикалық шаманың орта мәні нақты болуы қажет) операторлар сәйкестендіріледі.

Физикалық шаманың орта мәні жайындағы қосымша деректерді орташа квадраттық ауытқу деп аталатын шама арқылы да алуға болады: $\Delta \hat{L} = \hat{L} - \bar{L}$

$$(\overline{\Delta L})^2 = \int \Psi^*(x) (\Delta \hat{L})^2 \Psi(x) dx \quad (4.11)$$

$$\overline{\Delta L^2} \geq 0 \quad (4.12)$$

осы (4.12) теңсіздікті дәлелделік.

(4.11) теңдеуге сызықтық операторлардың өзара түйіндестік қасиетін пайдалансақ:

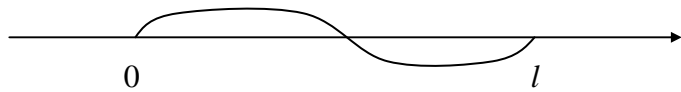
$$\overline{\Delta L^2} = \int \Psi^*(x) (\Delta \hat{L} \Psi(x)) dx = \int (\Delta \hat{L} \Psi(x))^2 dx \geq 0$$

енді қарастырылып отырған физикалық шама бір ғана мәнге ие болсын, онда $\bar{L} = L, \Delta \hat{L} = \hat{L} - \bar{L} = 0, \overline{\Delta L^2} = 0, \Delta \hat{L} \Psi = 0$ немесе, $(\hat{L} - L)\Psi = 0$ бұдан

$$\hat{L} \Psi(x) = L \Psi(x) \quad (4.13)$$

Кванттық механикада көбінесе L операторы дифференциалдық оператор түрінде берілетін болғандықтан (4.13) теңдеу операторына сәйкес келетін меншікті мәндерді анықтауға мүмкіндік беретін дифференциалдық теңдеу болып табылады. Ал,

дифференциалдық теңдеулердің шешуі L операторының кез келген мәндерінде бола бермейді. (4.13)-ші дифференциалдық теңдеудің шешуі болатын мәндер: L_1, L_2, L_3, \dots L -операторының меншікті мәндері деп, ал оларға сәйкес келетін теңдеудің шешулері: $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ – меншікті функциялар деп аталады. Мысал ретінде екі жағынан бекітілген сымның тербелісін қарастыралық. Тербеліс теңдеуі:

$$\frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} + K^2 U(x) = 0$$


$U(x) = 0$, егер $x=0$ және $x=l$ болса, осы қатынасты (4.3) теңдеумен салыстырсақ:

$\hat{L} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ – оператор: меншікті функциялар. $L_n = K^2 = \frac{\pi^2 n^2}{l^2}$ – операторының меншікті мәндері. $L_n : \frac{\pi^2}{l^2}, \frac{4\pi^2}{l^2}, \frac{9\pi^2}{l^2}, \dots$ егер $n=1, 2, 3, \dots$ болса $\Psi_n : \sin \frac{\pi}{l} x, \sin \frac{2\pi}{l} x, \sin \frac{3\pi}{l} x, \dots$ меншікті функциялары.

Оператордың меншікті мәндерінің жиыны спектр деп аталады. Егер оператор дискретті меншікті мәндерге ие болса, онда оның спектрі дискретті болады. Ал, оператордың меншікті мәндері үзіліссіз болса, онда оның спектрі де біртұтас немесе үзіліссіз болғаны. Кейбір операторлар кей жағдайда дискретті, кей жағдайда үзіліссіз меншікті мәндерге де ие болуы мүмкін. \hat{L}, \hat{M} операторлары коммутативті деп аталады, егер төмендегі қатынас орындалса

$$[\hat{L}, \hat{M}] = \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 0 \quad (4.14)$$

р физикалық шамалар L және M бір мезгілде нақты мәндерге ие болса, онда олардың операторлары коммутативті болады. Егер осы екі \hat{L} және \hat{M} операторлар коммутативті болса, оларға ортақ меншікті функция пайдалануға болады

$$\Psi_L = \Psi_M = \Psi_{LM} \quad (4.15)$$

Сонымен, оператордың коммутативтілігі физикалық шамалардың бір мезгілде өлшенетіндіктерінің керекті және жеткілікті шарты болып табылады.

Теорема: Ψ_m, Ψ_n меншікті функциялары өзара ортогоналды болады, егер

$$\int \Psi_m^* \Psi_n dx = 0 \quad (4.16)$$

қатынас орындалса.

Дәлелделік:

$$\begin{aligned} \hat{L}\Psi_n &= L_n \Psi_n \\ \hat{L}^* \Psi_m &= L_m \Psi_m^* \end{aligned}$$

жоғары теңдікті сол жағынан Ψ_m^* – функциясына, ал төменгі теңдікті дәл солай Ψ_n – функциясына көбейтіп, екі теңдікті бірінен бірін алып, интегралдасақ:

$$\int \Psi_m^* \hat{L}\Psi_n dx - \int \Psi_n \hat{L}^* \Psi_m^* dx = (L_m - L_n) \int \Psi_m^* \Psi_n dx \quad (4.17)$$

(4.17)-ші теңдеудің сол жағын (4.4) қатынасымен салыстырарлық, сонда (4.17)-ші теңдеудің сол жағы нольге тең, демек

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

$$\text{егер } m \neq n \text{ болса, } \int \Psi_m^* \Psi_n dx = 0 \quad (4.18)$$

ал, егер $m = n$ болса (4.17)-ші қатынастан $\int \Psi_m^* \Psi_n dx = 1$ бұл толқындық функцияларды нормалау шарты. (4.16) және (4.18) қатынастарды біріктіріп жазуға болады:

$$\int \Psi_m^* \Psi_n dx = \delta_{mn} \quad (4.19)$$

(4.19) меншікті функциялардың ортонормалдық шарты деп аталады.

Мұнда:

$$\delta_{mn} \begin{cases} 0 & \text{егер } m \neq n \\ 1 & \text{егер } m = n \end{cases} \quad (4.20)$$

δ_{mn} - Кронекер белгісі.

\hat{L} және \hat{M} операторлар өзара түйіндес операторлар болсын, яғни олар үшін (4.4)-ші шарт орындалсын. Енді осы операторлардың көбейтіндісін қарастырайық: \hat{L} -операторы өзара түйіндес болғандықтан

$$\int U_1^*(x) \hat{L} \hat{M} U_2(x) dx = \int (\hat{M} U_2)(x) \hat{L}^* U_1^*(x) dx$$

Ал \hat{M} операторының өзара түйіндестігінен:

$$\int (\hat{M} U_2) \hat{L}^* U_1^* dx = \int (\hat{L}^* U_1^*)(\hat{M} U_2) dx = \int U_2(x) \hat{M}^* \hat{L}^* U_1^*(x) dx$$

Бұдан

$$\int U_1^*(x) \hat{L} \hat{M} U_2(x) dx = \int U_2(x) \hat{M}^* \hat{L}^* U_1^*(x) dx$$

Демек, екі өзара түйіндес операторлардың көбейтіндісі де өзара түйіндес оператор болуы үшін бұл операторлар коммутативті болуы қажет.

§2. Негізгі физикалық шамалардың операторлары

Динамиканың айнымалыларды сипаттайтын операторлар сызықтық және өзара түйіндес операторлар болуы қажет. $\psi^*(x) \cdot \Psi(x)$ – шамасы бөлшектің кеңістіктің x -нүктесінде болу ықтималдылығын көрсетеді. Сонда, координатаның орта шамасы

$$\bar{x} = \int \Psi^*(x) \hat{x} \Psi(x) dx \quad (4.21)$$

(4.8)-ші қатынасты (4.21) теңдікпен салыстырсақ, x координата операторының кез келген $f(x)$ функциясына әсері осы функцияны x – қа көбейткенмен бірдей:

$$\hat{X} f(x) = X f(x)$$

демек бұдан x шамасының операторы осы координатаның өзіне тең болғаны

$$\hat{X} = X$$

Координата

$$\hat{X} = X, \hat{Y} = Y, \hat{Z} = Z \quad (4.22)$$

координаталардың операторлары сол шамалардың өзіне тең болады. Сонда, тек координаталарға байланысты функция $\hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z)$ – потенциалдық энергия операторы. Импульстің операторын анықтау үшін, де Бройль болжамы бойынша P импульсі бар микробөлшекке толқындық саны $K = \frac{P}{\hbar}$ және жиілігі $\omega = \frac{E}{\hbar}$ жазық толқын сәйкестендірілетіндігін пайдаланайық. Ал, импульстің меншікті мәндерін анықтайтын

$$\hat{P}_x \Psi = P_x \Psi \quad (4.23)$$

теңдеудің шешуі

$$\Psi(x) = Ae^{-i(wt - k_x x)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - P_x x)} \quad (4.24)$$

(4.23)-ші және (4.24)-тегі қатынастарды салыстыру нәтижесінде \hat{P}_x операторы

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.25)$$

түрінде берілетіндігін көреміз.

Импульс: $\hat{P}_x = -i\hbar \nabla$, ал компоненттері

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{P}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (4.26)$$

мынадай коммутативтік қатынасты қарастырайық

$$\begin{aligned} \hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X} &= ? \\ \hat{X}\hat{P}_x &= -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}, \quad \hat{P}_x\hat{X} = -i\hbar x \frac{\partial f}{\partial x} - i\hbar f \end{aligned}$$

егер осы теңдіктерді бірінен бірін алып, f - тің шамасы бірге тең кез келген функция екендігін ескерсек:

$$\hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X} = i\hbar \quad (4.27)$$

ал координаталар мен импульстердің басқа компоненттері үшін:

$$\begin{aligned} \hat{Y}\hat{P}_y - \hat{P}_y\hat{Y} &= i\hbar \\ \hat{Z}\hat{P}_z - \hat{P}_z\hat{Z} &= i\hbar \end{aligned} \quad (4.28)$$

бұл өрнектер анықталмағандық қатынастардың операторлық түрде жазылуын сипаттайды.

Бұрыштық момент - \vec{M} . Классикалық физикада импульс моменті бөлшектің радиус-векторының оның импульсіне векторлық көбейтіндісіне тең

$$\vec{M} = [\vec{Z}\vec{P}]$$

Кванттық теорияда импульс моментінің проекцияларына операторлар сәйкестендіріледі:

$$\vec{M}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = -i\hbar \left(Y \frac{\partial}{\partial z} - Z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (4.29)$$

$$\vec{M}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = -i\hbar \left(Z \frac{\partial}{\partial x} - X \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (4.30)$$

$$\vec{M}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar \left(X \frac{\partial}{\partial y} - Y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (4.31)$$

ал,

$$\vec{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 \quad (4.32)$$

Импульс моменті векторы компоненттерінің арасындағы коммутативтік қатынастар:

$$\vec{M}_y\hat{M}_z - \hat{M}_z\hat{M}_y = i\hbar\hat{M}_x \quad (4.33)$$

$$\vec{M}_z\hat{M}_x - \hat{M}_x\hat{M}_z = i\hbar\hat{M}_y \quad (4.34)$$

$$\vec{M}_x\hat{M}_y - \hat{M}_y\hat{M}_x = i\hbar\hat{M}_z \quad (4.35)$$

яғни, бұрыштық момент векторы компоненттерінің операторлары өзара коммутативті емес. Ал, \vec{M}^2 – импульс моменті операторының квадраты $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ операторларымен коммутативті:

$$\begin{aligned}\bar{M}^2 \hat{M}_x - \hat{M}_x \hat{M}^2 &= 0 \\ \bar{M}^2 \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}^2 &= 0 \\ \bar{M}^2 \hat{M}_z - \hat{M}_z \hat{M}^2 &= 0\end{aligned}\tag{4.36}$$

Кинетикалық энергия операторы:

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2\tag{4.37}$$

мұнда
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\tag{4.38}$$

Толық энергия операторы.

Толық энергияның операторын осы оператордың меншікті мәні бөлшектің энергиясына E тең болатындай етіп таңдап алу қажет. Яғни $\hat{E}\Psi = E\Psi$ теңдеуі қанағаттануы үшін, бұл теңдеудің шешуін (4.28)- монохроматты жазық толқын түрінде алу керек. Сонда:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tag{4.39}$$

Гамильтон функциясының операторы.

Классикалық физикада Гамильтон функциясы деп бөлшектердің импульсі мен координаталары арқылы өрнектелген толық энергияны айтады. Бір бөлшектің толық энергиясы кинетикалық және потенциалдық энергиялардың қосындысына тең:

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\hat{P}^2}{2m_0} + U(r)$$

Кванттық механикада Гамильтон функциясына оператор сәйкес келуі қажет.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(\vec{r})\tag{4.40}$$

5 ТАРАУ. КВАНТТЫҚ МЕХАНИКАНЫҢ НЕГІЗГІ ТЕҢДЕУІ – ШРЕДИНГЕР ТЕҢДЕУІ

§ 1. Шредингер теңдеуі және оның негізгі қасиеттері

Планк болжамы, Эйнштейннің фотондар теориясы және де Бройльдің бөлшектердің толқындық қасиеті жайындағы болжамы микробөлшектер қозғалысының жалпы теориясын жасаудың алғашқы қадамдары ғана болды.

Кванттық механиканың фундаменталдық негізін қалауда ең ірі қадам жасаған австрия ғалымы Э. Шредингер болды. Ол микробөлшектердің қозғалысын толқындық теңдеумен сипаттауды ұсынды. Шредингер теңдеуі кванттық механиканың негізгі постулаты болып табылады және оны ескі классикалық физикаға сүйене отырып, қорытып шығаруға болмайды.

Классикалық электродинамикадан белгілі толқындық теңдеуден Шредингер теңдеуіне қалай келуге болатындығын қарастырайық

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{U^2} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0\tag{5.1}$$

Мұндағы $\Psi(\vec{r}, t)$ - толқындық функция, ол U – фазалық жылдамдықпен тарайтын толқындық процесті сипаттайды. Егер толқын монохроматты жазық толқын болса, онда (5.1) теңдеудің шешуін мынадай түрде іздестіреміз:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{r})} = \Psi(\vec{r})e^{-i\omega t} \quad (5.2)$$

Мұнда,

$$\Psi(\vec{r}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}} \quad (5.3)$$

тек координаталарға ғана байланысты функция.

(5.2) теңдеуді (5.1) - ге қойсақ

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{w^2}{u^2} \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (5.4)$$

Мұндағы w, u - екі параметрдің орнына монохроматты жазық толқынның толқын ұзындығын алалық:

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (5.5)$$

Енді толқын ұзындығын λ -ның орнына микробөлшектің де-Бройль толқындарының толқын ұзындығын алалық. (Монохроматты жазық толқынды де-Бройль толқындарымен ауыстырамыз!);

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (5.6)$$

p - микробөлшектің импульсі.

Микробөлшектің толық энергиясынан:

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + U(\vec{r}) \quad (5.7)$$

импульсті анықтап $P = 2m_0[E - U(\vec{r})]$

(5.6)-шы теңдеуге қойсақ:

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (5.8)$$

(5.8)-ші теңдеуді Шредингердің стационар теңдеуі деп атайды. Бұл стационар теңдеуді сфералық координаталар (r, θ, φ) жүйесінде де жазуға болады:

$$\frac{\partial^2 \Psi(r, \theta, t)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi(r, \theta, t)}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(\vec{r})] \Psi(r, \theta, t) = 0 \quad (5.9)$$

Стационар теңдеумен қатар Шредингердің уақытқа байланысты толық теңдеуін де алуға болады. Ол үшін (5.2)-ші формуладан $\Psi(\vec{r})$ -ді табамыз:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}, t) e^{i\omega t} \quad (5.10)$$

(5.10)-ды (5.8)-ші теңдеуге қойып, түрлендірсек:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (5.11)$$

(5.11)-ші теңдеу Шредингердің уақытқа байланысты толық теңдеуі деп аталады. Шредингер теңдеуіне дербес туындылы екінші ретті Штурм-Лиувилль теңдеулер типін қанағаттандыратын мынадай талаптар қойылады:

1) Толқындық функция $\Psi(\vec{r}, t)$ үзіліссіз, шектелген және бір мәнді болуы керек. Бұл шарт орындалу үшін толқындық теңдеудің тек кейбір мәндерде ғана болады. Бұл жағдайда мұндай параметр энергия E және оның меншікті мәндері E_1, E_2, E_3, \dots осы мәндерге сәйкес келетін толқындық теңдеудің шешулері меншікті функциялар деп аталады: $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$. Энергияның мүмкін мәндерінің жиыны энергетикалық спектр құрайды. Егер бөлшектің қозғалысы кеңістікте шектелген болса, онда энергетикалық спектрдің үзіліссіз болатындығын көреміз.

2) Толқындық функцияның бірінші туындысы болуы керек, және ол үзіліссіз, әрі шектелген болуы қажет.

3) Толқындық функцияның модулінің квадраты $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ интегралдануы қажет және интеграл шектелген болуы керек. Шредингер теңдеуінің шешулерінің физикалық мағынасын қарастырайық. Классикалық физикадағы U – фазалық жылдамдықпен таралатын толқындық процесті сипаттайтын теңдеуді алып

$$i\nabla^2\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{U^2} \frac{\partial^2\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2}$$

оны уақытқа байланысты Шредингер теңдеуімен салыстырайық:

$$i\hbar \frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2\Psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r}, t) = 0$$

Классикалық физикадағы толқындық теңдеудің шешулерінің түрі:

$$a \cos[(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + \delta]$$

Бірақ мұндай нақты шешулер Шредингер теңдеуін қанағаттандыра алмайды. Себебі оның шешуі тек комплексті болуы қажет. Мысалы $U = 0$ болғанда $\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$

Шредингер теңдеуінің ерекшелігі – бұл теңдеуге уақытқа бірінші ретті, координаталарға екінші ретті тәуелді туындылардың шешуі параметрдің кез келген мәнінде емес, меншікті мәндер деп аталатын енуінде. Екінші жағынан, біз іздестіріп отырған толқындық теңдеу де-Бройль толқындарының ω – жиілікке бірінші дәрежеде тәуелді дисперсия заңдылығына сәйкес келеді:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m_0} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$$

Бұл фактінің Шредингер теңдеуін түсінуде маңызы зор. Ол Шредингер теңдеуінің дербес жағдайда бұл теңдеудің физикалық ортада таралатын нақты толқындарды сипаттай алмайтындығын көрсетеді. Ал, кейбір әдебиеттерде материяның тұрғын немесе қозғалыстағы толқындары, олардың түйіні немесе жалы туралы айтылса, олар тек кванттық процестің көрнекі болуы үшін ғана пайдаланылғаны. Қазіргі уақытта қабылданған кванттық механиканың статистикалық интерпретациясы бойынша Шредингер теңдеулерінің шешулерінің мағынасының мүлдем басқа болатындығы 2-ші тараудан белгілі. (5.11)-ші теңдеуді мынадай түрде де жазуға болады:

$$i\hbar \frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t) \quad (5.12)$$

(5.12)-ші теңдеу уақыт бойынша бірінші дәрежелі теңдеу болғанмен де, жорамал санның болуына байланысты бұл теңдеудің периодтық шешулері болады. Сондықтан Шредингер теңдеуін көптеген жағдайда толқындық теңдеу деп те атайды, ал оның шешулері – уақытқа тәуелді функциялар – толқындық функциялар деп аталады. Егер \hat{H} -гамильтон операторының түрі берілген болса, (5.12)-ші теңдеуден алғашқы уақыт моменттерінде белгілі $\Psi(\vec{r}, t)$ толқындық функцияның кейінгі уақыт моменттеріндегі

барлық мәндерін де анықтауға болады. Сондықтан Шредингер толқындық теңдеуі кванттық механикада себеп-салдар принципін сипаттайды.

Энергиясы нақты мәндерге ие болатын күйлер жүйенің стационар күйлері деп аталады. Стационар күйлер \hat{H} – гамильтон операторының меншікті функциялары болып табылады, $\Psi(\vec{r}, t)$ толқындық функцияларымен сипатталады, яғни бұл функциялар (5.12)-ші теңдеуді қанағаттандырады. Энергияның мүмкін мәндерінің ең кішісіне тең болатын стационар күй жүйенің қалыпты немесе негізгі күйі деп аталады.

§2. Ток үзіліссіздігінің теңдеуі

Классикалық электродинамикада ток тығыздығы \vec{j} мен электр заряды тығыздығы ρ арасындағы байланысты тағайындайтын

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (5.13)$$

ток үзіліссіздігінің теңдеуінің кванттық механикада толқындық функция арқылы қалай жазылатындығын қарастыралық. Ол үшін Шредингер теңдеуін түрлендіріп, мынадай түрде жазамыз:

$$\frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + \frac{i}{\hbar} U(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (5.14)$$

Осы теңдеуге комплекс түйіндес теңдеу:

$$\frac{\partial \Psi^*(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) - \frac{i}{\hbar} U(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t) = 0 \quad (5.15)$$

(5.14)-ші теңдеуді сол жағынан Ψ^* -ге (5.15)-ші теңдеуді Ψ -ге көбейтіп, бірінен бірін алсақ:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi \Psi^*) + \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) = 0 \quad (5.16)$$

Бұл теңдеудің екі жағында e_0 қарапайым электр зарядына көбейтсек:

$$\frac{\partial}{\partial t} (e_0 \Psi \Psi^*) + \text{div} \left[\frac{ie_0 \hbar}{2m_0} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \right] = 0 \quad (5.17)$$

(5.13) және (5.17) теңдеулерді салыстырсақ, электр зарядының тығыздығына:

$$\rho = e_0 \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (5.18)$$

шамасының, ал ток тығыздығына

$$\vec{j} = \frac{ie_0 \hbar}{2m_0} (\Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t) - \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t)) \quad (5.19)$$

- ток тығыздығы ықтималдылығының векторы сәйкес келетіндігін көреміз. (5.17)-ші теңдеу кванттық механикада электр зарядының сақталу заңдылығын сипаттайды. Монохроматты толқындар үшін

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad (5.20)$$

сонда заряд тығыздығы

$$\rho = e_0 \Psi \Psi^* \quad (5.21)$$

уақытқа тәуелді болмайды.

Егер толқындық функциялар нақты ($\Psi = \Psi^*$) болса, ток тығыздығы әр уақытта да нольге тең болады. Ал егер бөлшек еркін болса толқындық функция кума толқынмен сипатталады $\Psi = L^{-3/2} e^{i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$, мұндағы L - мерзім ұзындығы, егер осы қатынасты Ψ - дің орнына (5.9) және (5.10) теңдеулерге қойсақ, заряд тығыздығы мен ток тығыздығы үшін төмендегідей теңдіктерді аламыз:

$$\rho = e_0 \Psi \Psi^* = L^{-3} \cdot e_0$$

$$\vec{j} = \frac{e_0}{m_0 L^3} \vec{P} = \rho \vec{v}$$

Бұл өрнектерден егер заряд бүкіл көлемде бірқалыпты ықтималдылықпен үлестірілген болса заряд тығыздығының осы зарядтың бүкіл көлемде қатынасына тең болатындығын, ал ток тығыздығы мен заряд тығыздығының арасындағы байланыс классикалық электродинамикадағы осы шамалар арасындағы қатынаспен бірдей екендігін көреміз.

(5.17)-ші теңдеудегі $\Psi \Psi^* = w$ - бөлшектердің орташа тығыздығы деп қабылда- сақ, ток тығыздығы S - аудан бірлігі арқылы 1 секунд ішінде өтетін бөлшектердің орташа ағынын береді. Сонда (5.17)-ші теңдеуді бөлшектер санының сақталу заңы ретінде қарастыра аламыз.

(5.17)-ші теңдеуді V шектелген көлем бойынша интегралдап, Гаусс теоремасын қолдансақ:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V w dv = - \int_V \text{div} \vec{j} dv = - \int_S j_n ds \quad (5.22)$$

§ 3. Шредингер теңдеуінен классикалық қозғалыс теңдеулеріне шектік ету

Классикалық механикада Гамильтон-Якоби теңдеуі материялық нүктенің қозғалысын сипаттайтын сызықтық емес дифференциалдық теңдеу болып табылады. Осы теңдеудің қорытылып шығарылуын қысқаша еске түсірейік. Тұйықталған жүйе үшін энергияның сақталу заңдылығын жазалық:

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + U(\vec{r}) \quad (5.23)$$

осы жүйенің әсер функциясы

$$S(t) = \int_0^t L dt = S - Et \quad (5.24)$$

мұндағы $L = T - U$, ал

$$S = \int_0^t 2T dt \quad (5.25)$$

қысқа әсер функциясы деп аталады. Осы функцияның уақытқа айқын түрде тәуелді емес екендігін дәлелдейік:

$$dS = 2Tdt = p_x dx + p_y dy + p_z dz \quad (5.26)$$

Екінші жағынан толық дифференциал dS :

$$dS = \frac{\partial S}{\partial t} dt + \frac{\partial S}{\partial x} dx + \frac{\partial S}{\partial y} dy + \frac{\partial S}{\partial z} dz \quad (5.27)$$

(5.26) және (5.27)-ші теңдеулердің сол жақтары тең, демек

$$\frac{\partial S}{\partial t} = 0 \text{ және } \vec{p} = \text{grad}S \quad (5.28)$$

(5.20) - шы теңдеуді былай түрлендіріп жазып:

$$-\frac{p^2}{2m_0} + U(\vec{r}) - E = 0 \quad (5.29)$$

импульстің орнына (5.28)-ді қойсақ, стационар Гамильтон-Якоби теңдеуін аламыз:

$$\frac{1}{2m_0} (\text{grad}S)^2 + U(\vec{r}) - E = 0 \quad (5.30)$$

Гамильтон-Якоби теңдеулерінің уақытқа байланысты толық түрін де алуға болады. Ол үшін (5.24)-ші теңдеуді уақыт бойынша дифференциалдап

$$\frac{\partial S(t)}{\partial t} = -E \quad (5.31)$$

стационар Гамильтон-Якоби теңдеуіндегі толық энергия E -нің орнына қойсақ,

$$\frac{1}{2m_0} [\text{grad}(S)]^2 + U(\vec{r}) + \frac{\partial S(t)}{\partial t} = 0 \quad (5.32)$$

уақытқа байланысты Гамильтон-Якоби теңдеуін аламыз.

Енді Шредингер теңдеуінен осы классикалық қозғалыс теңдеулеріне қалай ауысуға болатындығын көрсетейік. Ол үшін Шредингер теңдеуін түрлендіріп жазалық. Толқындық функцияны мынадай түрде жазсақ

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(-Et + \vec{p}\vec{r})} \quad (5.33)$$

$$S(t) = -Et + \vec{p}\vec{r} \quad (5.34)$$

әсер функциясына сәйкес келеді. Сонда толқындық функция

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}S(t)} \quad (5.35)$$

Шредингердің стационар теңдеуін қарастырғанда да толқындық функция мен қысқа әсер функцияның арасындағы байланысты (5.33)-ші өрнек түрінде қалдырған дұрыс:

$$\Psi(\vec{r}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (5.36)$$

Шредингердің операторлық түрде жазылған теңдеуін пайдаланамыз

$$\left(\frac{\hat{P}^2}{2m_0} + U(\vec{r}) - \hat{E} \right) \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (5.37)$$

Бұл өрнектегі импульстің орнына

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla \quad (5.38)$$

өрнегін алып, оны квадраттасақ

$$\hat{P}^2 \Psi = [(grad S)^2 - i\hbar \nabla^2 S] \Psi \quad (5.39)$$

Енді (5.39)-ны (5.37)-ге қойсақ, қысқа әсер функциясы арқылы жазылған Шредингер теңдеуіне келеміз: $\frac{1}{2m_0} grad(S)^2 + U(r) - E + \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla^2 S = 0$

Осы теңдеуді (5.30) стационар Гамильтон-Якоби теңдеуімен салыстыралық. Бұдан, кванттық механикадағы жүйелердің (бөлшектердің) күйін сипаттайтын Шредингер теңдеуінен классикалық қозғалыс теңдеулеріне шектік өту үшін $\hbar = 0$ деп алсақ жеткілікті болатындығын көреміз.

Ал, егер $\hbar \neq 0$ болмаған жағдайда классикалық теңдеулерге өту үшін

$$(grad S)^2 \gg \nabla^2 S \quad (5.40)$$

шарты орындалса жеткілікті болады. Бұл жағдайда алынған теңдеулер квазиклассикалық теңдеулер деп аталады.

§4. Операторларды уақыт бойынша дифференциалдау. Классикалық және кванттық Пуассон жақшалары.

Кез келген, координаталар мен импульстерге байланысты физикалық шама берілген болсын:

$$L = L(x_i, p_i, t) \quad (5.41)$$

Тұйықталған физикалық жүйенің Гамильтон функциясы

$$H = \frac{P_i^2}{2m_0} + U(\vec{r}) \quad (5.42)$$

Бұдан канондалған қозғалыс теңдеулерін алуға болады:

$$x_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (5.43a)$$

$$p_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (5.43b)$$

Сонда физикалық шама L - дің уақыт бойынша өзгерісі

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} dt + \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} \dot{x}_i + \frac{\partial L}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \quad (5.44)$$

\dot{x}_i және \dot{p}_i шамаларының орнына (5.43a) және (5.43b) қатынастарын қойсақ

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} dt + \{H, L\} \quad (5.45)$$

мұндағы

$$\{H, L\} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{\partial H}{\partial x_i} \frac{\partial L}{\partial p_i} \right) \quad (5.46)$$

классикалық Пуассон жақшалары деп аталады. Егер физикалық шама L уақытқа айқын түрде тәуелді болмаса

$$\frac{dL}{dt} = 0$$

онда

$$\frac{dL}{dt} = \{H, L\} \quad (5.47)$$

яғни Пуассон жақшалары физикалық шаманың уақыт бойынша өзгерісін сипаттайды. Ал, егер Пуассон жақшалары нольге тең болса, онда

$$L = const \quad (5.48)$$

физикалық шама L қозғалыс интегралы болып табылады, оған белгілі бір сақталу заңдылығы сәйкес келеді.

Енді классикалық Пуассон жақшаларын кванттық жағдайға жалпыдайық. Кванттық механикада физикалық шамалардың орнына оларға сәйкес келетін оператордың орта мәндері алынатындығы белгілі.

$$\bar{L} = \int \Psi^*(x) \hat{L} \Psi(x) dx \quad (5.49)$$

(5.49)-шы өрнекті уақыт бойынша дифференциалдайық:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dx + \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{L} \Psi dx + \int \Psi^* \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} dx \quad (5.50)$$

Бұл теңдеулердегі

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi, \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Psi^* \quad (5.51)$$

Сонда (5.50)-ші өрнектің орнына мынадай қатынас аламыз:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \frac{\partial \bar{L}}{\partial t} + \{\bar{L}, H\} \quad (5.52)$$

мұндағы

$$\{\bar{L}, H\} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{L} - \hat{L} \hat{H}) \quad (5.53)$$

кванттық Пуассон жақшалары деп аталады. Егер физикалық шама L -дің орта мәні уақыт t -ға айқын түрде тәуелді болмаса, онда кванттық Пуассон жақшалары осы физикалық шаманың уақыт бойынша өзгерісін сипаттайды.

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = \{\bar{L}, H\} \quad (5.54)$$

Ал, егер де Пуассон жақшалары нольге тең болса, онда физикалық шама L -дің орта мәніне кванттық механикада кеңістік пен уақыттың симметриялығына байланысты белгілі бір сақталу заңдылығы сәйкес келеді:

$$\frac{d\bar{L}}{dt} = 0, \quad L = const$$

яғни физикалық шаманың орта мәні сақталады, және \hat{L} -операторы \hat{H} гамильтонианмен коммутативті болады. Сонымен қатар, осы динамикалық айнымалының \hat{L} - операторына сәйкес келетін L меншікті мәнінің ықтималдығы да сақталады. Бұны дәлелдеу үшін L мәнінің ықтималдығын жазалық:

$$w_n = |a_n|^2 = \left| \int U_n^*(r) \Psi(\vec{r}, t) dv \right|^2$$

мұндағы $U_n(\vec{r})$ - \hat{L} операторының L_n меншікті мәніне сәйкес келетін меншікті функция, Ψ - \hat{L} операторы өлшенетін стационар күйдің толқындық функциясы. w_n - ықтималдылықтың уақытқа тәуелсіздігін дәлелдеу үшін n -күйдің a_n - дербес амплитудасын айқын түрде жазайық:

$$a_n = \int U_n^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) dv = e^{\frac{i E_n t}{\hbar}} \int \Psi(\vec{r}) U_n^*(\vec{r}, t) dv$$

мұнда $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(r) e^{\frac{i E_n t}{\hbar}}$. Сонда

$$|a_n|^2 = \left| \int \Psi(r) U_n^*(r) dv \right|^2 = const$$

яғни ықтималдылықтың уақытқа тәуелді емес екендігін және тұрақты болатындығын көреміз.

§ 5. Эренфест теоремалары

Классикалық қозғалыс теңдеулерінің кванттық механикада қалай жазылатындығын қарастырайық. Ол үшін физикалық шама L - дің орнына координата x -пен импульс p -ны аламыз.

1. $L = x$. Бұл жағдайда (5.54)-ші қатынастан x -тің уақыт бойынша өзгерісі

$$\frac{d\bar{X}}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(\overline{\hat{H}\hat{X} - \hat{X}\hat{H}} \right) \quad (5.55)$$

мұндағы

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m_0} + U_x \quad (5.56)$$

Гамильтон операторы. Осы операторды (5.55)-ші теңдікке қойып, координата x -пен потенциялық энергия операторының коммутативтік екендігін ескерсек:

$$\frac{d\bar{X}}{dt} = \frac{\bar{\hat{P}}_x}{m_0} \quad (5.57)$$

осы сияқты y және z үшін

$$\frac{d\bar{Y}}{dt} = \frac{\bar{\hat{P}}_y}{m_0} \quad (5.58)$$

$$\frac{d\bar{Z}}{dt} = \frac{\bar{\hat{P}}_z}{m_0} \quad (5.59)$$

2. Енді физикалық шама L -дің орнына импульсті алалық

$$L = P_x$$

Сонда

$$\frac{d\bar{P}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(\overline{\hat{H}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{H}} \right) \quad (5.60)$$

Импульстің операторлары өзара коммутативті болғандықтан (5.60)-шы өрнектің орнына мынадай қатынасқа келеміз:

$$\frac{d\bar{P}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left(\overline{U(x)\hat{P}_x - \hat{P}_x U(x)} \right) \quad (5.61)$$

импульс операторының орнына (5.61)-ге оның мәнін қойсақ,

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

онда

$$\frac{d\bar{P}_x}{dt} = -\frac{\partial \overline{U(x)}}{\partial x} = \bar{F}_x \quad (5.62)$$

импульстің басқа компоненттері үшін

$$\frac{d\bar{P}_y}{dt} = -\frac{\partial \overline{U(y)}}{\partial y} = \bar{F}_y \quad (5.63)$$

$$\frac{d\bar{P}_z}{dt} = -\frac{\partial \overline{U(z)}}{\partial z} = \bar{F}_z \quad (5.64)$$

(5.57- 5.69) және (5.62-5.64)-ші өрнектер кванттық механикада Эренфест теоремалары деп аталады. Бұл теоремалар бойынша классикалық қозғалыс теңдеулерінің кванттық баламаларын табу үшін классикалық теңдеулердегі физикалық шаманың орнына оларға сәйкес келетін операторлардың орта мәндерін алса жеткілікті.

6 ТАРАУ

КВАНТТЫҚ МЕХАНИКАДАҒЫ САҚТАЛУ ЗАҢДАРЫ

§1. Стационар күйлер және энергияның сақталу заңы

Тұйықталған жүйенің Гамильтон функциясы уақытқа айқын түрде тәуелді болмайды, себебі мұндай физикалық жүйелер үшін барлық уақыт кезеңдері өзара эквивалентті. Кванттық Пуассон жақшаларынан кез келген оператор өзімен-өзі коммутативті болғандықтан, сыртқы өріске орналаспаған жүйе үшін Гамильтон функциясы сақталатын шама болады. Классикалық механикадан сақталатын Гамильтон функциясы тұйықталған жүйе үшін толық энергияға тең болатындығы белгілі.

Кванттық механикадағы энергияның сақталу заңы былай оқылады: "егер берілген кванттық күйде жүйенің энергиясы нақты мәнге ие болатын болса, онда энергияның осы күйдегі мәні уақыт бойынша өзгермейді".

$$L = H = T + U = \text{const}$$

Энергия нақты мәнге ие болатын кванттық күйлер жүйенің стационар күйлері деп аталады. Стационар күйлерді сипаттайтын функциялар Гамильтон операторының меншікті функциялары болып табылады, Ψ – толқындық функциямен сипатталады және

$$\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$$

(6.1)

теңдеуін қанағаттандырады.

Мұнда E_n — энергияның меншікті мәндері.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = E_n \Psi_n \quad (6.2)$$

бұл теңдеуді уақыт бойынша тікелей интегралдасақ, мынадай өрнек аламыз:

$$\Psi_n(q_n, t) = \Psi_n(q) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (6.3)$$

(6.3)-қатынасы стационар толқындық функция мен t -уақыттың арасындағы тәуелділікті тағайындайды. $\Psi_n(q)$ -координатаға байланысты функция. Энергияның мүмкін мәндерінің ең төменгісі – жүйенің негізгі күйі деп аталады. Кейде стационар күйлердің ішінде энергияның бір меншікті мәніне бірнеше меншікті функциялар сәйкес келетін жағдайлар да кездеседі:

$$\begin{array}{r} \Psi_{n_1} \text{-----} m=+1 \\ E_n \text{-----} \Psi_{n_2} \text{-----} m=0 \\ \Psi_{n_3} \text{-----} m=-1 \end{array}$$

Мұндай жағдай кванттық механикада энергиялық деңгейлердің "азуы" деп аталады.

§ 2. Импульстің сақталу заңы

Тұйықталған бөлшектер жүйесін қарастырайық. Мұндай жүйелер үшін кеңістіктің барлық нүктелері өзара эквивалентті болғандықтан жүйенің гамильтонианы жүйені кеңістікте кез келген параллель бағытқа орын ауыстырғаннан өзгермеуі қажет. Жүйенің кеңістікте аз шамаға параллель орын ауыстыруын қарастырайық. Мұндай орын ауыстырулар нәтижесінде әрбір бөлшектің \vec{r}_n - радиус-векторы $\delta\vec{r}$ өсімше алуы керек:

$$\vec{r}_1 + \delta\vec{r}, \quad \vec{r}_2 + \delta\vec{r}, \quad \vec{r}_3 + \delta\vec{r} \dots\dots$$

Бұл жағдайда жүйені сипаттайтын толқындық функция $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$ -мынадай $\Psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}, \dots)$ - функцияға ауысуы қажет, яғни

$$\Psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}, \dots) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) + \delta\vec{r} \sum_a \nabla_a \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = (1 + \delta\vec{r} \sum_a \nabla_a) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) \quad (6.4)$$

мұндағы

$$(1 + \delta\vec{r} \sum_a \nabla_a) \quad (6.5)$$

қатынасын тұйықталған жүйенің кеңістікте параллель орын ауыстыруын іске асатын оператор ретінде қарастыруға болады. Кеңістіктің біртектілік қасиетінен (6,5)-операторының Гамильтон операторымен коммутативті екендігі шығады:

$$(1 + \delta\vec{r} \sum_a \nabla_a) \hat{H} - \hat{H} (1 + \delta\vec{r} \sum_a \nabla_a) = 0 \quad (6.6)$$

Жақшаларды ашсақ, мынадай қатынасқа келеміз:

$$\left(\sum_a \nabla_a \right) \hat{H} - \hat{H} \left(\sum_a \nabla_a \right) = 0 \quad (6.7)$$

Кванттық Пуассон жақшалары бойынша кез келген оператордың Гамильтон операторымен коммутативтілігі осы оператор арқылы сипатталатын физикалық шаманың сақталатынын көрсетеді. Ал кеңістіктің біртектілігін сипаттайтын физикалық шама жүйенің импульсі, олай болса (6.7)-ші қатынас кванттық механикада

импульстің сақталу заңын сипаттайды. $(\sum_a \nabla_a)$ операторы - тұйықталған жүйенің толық импульсіне сәйкес келеді, ал қосындыға кіретін ербір мүше ∇_a – жеке бөлшектердің импульсін сипаттайды.

Шындығында да, бұрынғы өткен материалдардан жеке бөлшектің импульсі операторының $\hat{P}_x = -i\hbar\nabla_x$, $\hat{P}_y = -i\hbar\nabla_y$, $\hat{P}_z = -i\hbar\nabla_z$, ал толық импульстің $\hat{P} = -i\hbar\nabla$ екендігі белгілі.

3. Импульс моментінің сақталу заңы

Кеңістіктің біртектілігімен қатар тағы бір қасиеті бар, ол кеңістіктің изотроптылық қасиеті. Яғни тұйықталған жүйені кеңістікте кез келген бұрышқа бұрғаннан гамильтониан \hat{H} өзгермеуі тиіс. Жүйенің кеңістікте шексіз аз $\delta\vec{\varphi}$ -бұрышқа бұрылуын қарастырайық. Осы бұрудың нәтижесінде радиус-вектордың алатын үсімшесі:

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

ал әрбір жеке бөлшек үшін радиус вектордың шамасы:

$$r_1 + \delta r_1, \quad r_2 + \delta r_2, \dots$$

Сонда кеңістікте тұйықталған жүйенің шексіз аз $\delta\vec{\varphi}$ бұрышына бұрылуы нәтижесінде осы жүйені сипаттайтын $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$ – толқындық функциясы $\Psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}_2, \dots)$ функциясына ауысады:

$$\Psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n + \delta\vec{r}_n) = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) + \delta\vec{\varphi} \sum_a [\vec{r}_a \vec{\nabla}_a] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = (1 + \delta\vec{\varphi} \sum_a [\vec{r}_a \vec{\nabla}_a]) \Psi \quad (6.8)$$

Мұнда жүйенің шексіз аз бұрышқа бұрылуын іске асыратын оператор ретінде

$$(1 + \delta\vec{\varphi} \sum_a [\vec{r}_a \vec{\nabla}_a]) \quad (6.9)$$

қатынас қарастыруға болады.

Бұл оператор, кеңістіктің изотропиялық қасиеті шартынан, гамильтон операторымен коммутативті болады. Сонда:

$$\left(\sum_a [\vec{r}_a \vec{\nabla}_a] \right) \hat{H} - \hat{H} \left(\sum_a [\vec{r}_a \vec{\nabla}_a] \right) = 0 \quad (6.10)$$

Кеңістіктің изотропиялық қасиетіне сәйкес келетін физикалық шама жүйенің импульс моменті. Сонда (6.10)- қатынасы кванттық механикада импульс моментінің сақталу заңын сипаттайды.

$(\sum_a [\vec{r}_a \vec{\nabla}_a])$ - операторы тұйықталған жүйенің толық импульс моментіне сәйкес келеді.

Мұнда қосындыға кіретін ербір мүше жеке бөлшектердің импульс моментін сипаттайды.

§4. Күйлердің жұптылығы және жұптылықтың сақталу заңы

Кеңістіктің біртектілігі және изотропиялық қасиетінен басқа Гамильтон операторын өзгеріссіз қалдыратын тағы бір қасиеті бар, ол кеңістіктің инверсия, яғни тұйықталған жүйенің бөлшектерінің координаталарының таңбаларын қарама-қарсыға аударғанда, Гамильтон функциясының операторы өзгермейді:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r})$$

Арнайы инверсия операторы ұғымын енгізейік - \hat{P} . Бұл операторды пайдаланып кеңістіктің инверсиялық қасиетін мынадай түрде жазуға болады:

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}) = \Psi(-\vec{r}) = -\Psi(\vec{r}) \quad (6.11)$$

жалпы жағдайда, кез келген сызықтық, өзара түйіндес оператор үшін:

$$\hat{P}\Psi(\vec{r}) = P\Psi(\vec{r}) \quad (6.12)$$

Мұндағы P - \hat{P} операторының меншікті мәні. Бұл меншікті менді анықтау үшін (6.12)-ші теңдеуге тағы бір рет \hat{P} — операторымен есер етелік, сонда (6.11)-ші қатынасты ескерсек:

$$\hat{P}^2\Psi(\vec{r}) = P^2\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}) \quad (6.13)$$

Бұдан

$$P^2 = 1 \text{ немесе } P = \pm 1 \quad (6.14)$$

Сонымен \hat{P} - операторының есері нәтижесінде тұйықталған жүйені сипаттайтын $\Psi(\vec{r})$ -толқындық функциясы таңбасын не өзгертеді, не өзгертпейді. Егер толқындық функция таңбасын өзгертпесе онда ол жұп функция деп, ал таңбасын қарама қарсыға өзгертсе тақ функция деп аталады.

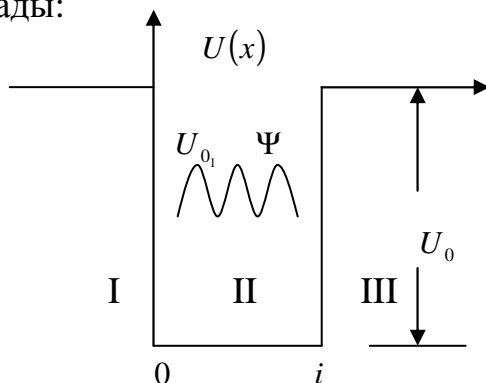
Гамильтон операторының кеңістіктік инверсия операторымен коммутативтілігі жұптылықтың сақталу заңы деп аталады. Ол былай оқылады: "Егер тұйықталған бөлшектер жүйесінің белгілі бір жұптылығы болса, онда осы жұптылық уақыт бойынша өзгермейді".

7 ТАРАУ. БІР ӨЛШЕМДІ ҚОЗҒАЛЫСТЫҢ ЖАЛПЫ ҚАСИЕТТЕРІ

1. Потенциалдық шұңқырдағы бөлшек қозғалысы жайындағы есеп

Бөлшектің энергиясының дискретті мәндерге ие болатындығын көрсететін қарапайым мысалы ретінде шексіз терең потенциал шұңқырдағы микробөлшектің қозғалысын қарастыралық.

Шұңқырдағы бөлшектің энергиясы E болсын. Бұл бөлшектің кинетикалық энергиясы потенциалдық энергиядан кем болатындықтан $T < U(x)$, потенциалдық энергияның нольге тең болатын менін потенциалдық шұңқырдың түбінен алалық. 7.1-ші суретте көрсетілген потенциалдық өріс үшін кеңістікті мынадай үш облысқа бөлуге болады:



$$U(x) = \begin{cases} U_0 & \text{егер } x < 0 \\ 0 & \text{егер } 0 \leq x \leq i \\ U_0 & \text{егер } x > i \end{cases} \quad (7.1)$$

7.1- сурет. Потенциалдық шұңқыр

Біздің мақсатымыз: бір өлшемді қозғалыс үшін 7.1-ші суретте берілген потенциалдық облыстарға сәйкес келетін Шредингердің стационар теңдеулерін шешу. Бірінші және үшінші облыстар үшін:

$$\nabla^2 \Psi_{1,III}(x) + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(x)] \Psi_{1,III}(x) = 0 \quad (7.2)$$

2-ші облыста $U(x) = 0$ болғандықтан (7.2)-ші теңдеу мынадай түрде жазылады:

$$\nabla^2 \Psi_2(x) + \frac{2m_0}{\hbar^2} E \Psi_2(x) = 0 \quad (7.3)$$

Белгілеу енгізейік,

$$\kappa^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E \quad (7.4)$$

Сонда екінші облыс үшін жазылған Шредингер теңдеуі мынадай түрге келеді:

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + K^2 \Psi_2(x) = 0 \quad (7.5)$$

Классикалық механика заңдылықтарымен сипатталатын бөлшек үшін (7.5)-ші теңдеудің шешулерін гармоникалық тербелістер түрінде жазуға болады:

$$\Psi_2(x) \cong \cos kx, \sin kx$$

1-ші және 3-ші облыстар үшін $U = U_0 > E$, сондықтан төмендегідей белгілеу енгізсек,

$$\eta^2 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (7.6)$$

(7.2)-ші теңдеу мынадай түрге келеді:

$$\frac{d^2 \Psi_{1,3}}{dx^2} + \eta^2 \Psi_{1,3} = 0 \quad (7.7)$$

Ал, бұл теңдеудің шешуі экспоненттер түрінде беріледі:

$$\Psi_{1,3}(x) \cong e^{\pm \eta x} \quad (7.8)$$

Шредингер теңдеуі стандарт шарттарды қанағаттандыруы үшін $|x|$ -тің мәндері шексіз өскенде теңдеудің шешуі шексіз кемуі қажет. Сондықтан 1-ші облыста, яғни $X < 0$ болғанда (7.8)-ші теңдеуде жоғарғы таңбаны, ал 3-ші облыста ($X > 0$) төменгі таңбаны алу қажет.

$$\Psi_{1,3}(x) = B_{1,3} e^{-\eta x} + A_{1,3} e^{+\eta x} \quad (7.9)$$

2-ші облыс үшін

$$\Psi_2(x) = B_2 \cos kx + A_2 \sin kx \quad (7.10)$$

Сонымен біз 7.1-ші суретте көрсетілген ербір үш облыс үшін Шредингер теңдеулерінің шешулерін тағайындадық. Қарастырылып отырған есепті жеңілдету үшін потенциалдық шұңқыр шексіз терең ($U_0 \rightarrow \infty$) деп алалық. Онда (7.6)-шы қатынастан η мәндері де шексіздікке ұмтылады. Бұл жағдайда (7.9)-шы теңдеуден $\Psi_1 = \Psi_3 = 0$ болатындығын көреміз. Егер толқындық функция нольге тең болса, онда бұл функциялар сипаттайтын кеңістіктің бөліктерінде бөлшектің жоқ болғаны. Сондықтан бұдан былай 1-ші және 3-ші облыстарды қарастырмауға болады. Енді 2-ші облысқа оралайық. Потенциалдық шұңқырдың ішінде (7.10)-шы теңдеудің шешулері үшін шекаралық шарттар:

$$X = 0 \text{ болғанда} \quad \Psi_2(x)|_{x=0} = 0 \quad (7.11)$$

және

$$X = l \text{ болғанда} \quad \Psi_2(x)|_{x=l} = 0 \quad (7.12)$$

Бұлардан (7.11)-ші шарт орындалуы үшін $B_2=0$, ал энергияның меншікті мендері үшін $\kappa = n\pi$, мұндағы $n = 1, 2, 3, \dots$, т.б. $n = 0$ мәнінде толқындық функция нольге тең болғандықтан, алға қарай бұл менді қарастырмаймыз. Сонда $k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E_n = \frac{n^2 \pi^2}{l^2}$ бұдан,

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 l^2} n^2 \quad (7.13)$$

Энергияның осы меншікті мендеріне сәйкес келетін меншікті функциялар:

$$\Psi_n(x) = A_2 \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (7.14)$$

A_2 коэффициентін толқындық функцияны нормалау шартынан анықтауға болады:

$$\int_0^l |A_2 \sin kx|^2 dx = 1$$

бұдан:
$$A_2 = \sqrt{\frac{2}{l}}$$

Сонымен потенциалық шұңқырдағы микробөлшектің қозғалысын сипаттайтын толқындық функция

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \quad (7.15)$$

Энергияның меншікті мендерімен, меншікті функцияларының кейбір мәндерін жазалық:

$n = 1$	$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 l^2},$	$\Psi_1 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi}{l} x$
$n = 2$	$E_2 = 4E_1,$	$\Psi_2 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{2\pi}{l} x$
$n = 3$	$E_3 = 9E_1,$	$\Psi_3 = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{3\pi}{l} x$
...

Сонымен, егер бөлшектің қозғалысы потенциалық шұңқыр ішімен ғана шектелген болса, онда оның энергиясы тек дискретті мендерге ие болады.

§ 2. Бөлшектің еркін қозғалысы

Кванттық механиканың өте қарапайым, бірақ көрнекті есептерінің бірі-бөлшектің бүкіл кеңістікте ($-\infty < x < +\infty$) еркін қозғалысы. Бөлшекке есер ететін күш жоқ болғандықтан, потенциалық энергия тұрақты болады және оны нольге тең деп қабылдай аламыз, $U = 0$. Классикалық механикада бұл жағдайда Гамильтон функциясы кинетикалық энергияға тең болады:

$$H = T = \frac{p^2}{2m_0} \quad (7.16)$$

Қозғалыс бір өлшемді болғандықтан импульс операторының орнына оның берілген ось бойынша құраушыларын алуға болады $\hat{P}_x = \hat{P}$,

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (7.17)$$

ал Гамильтон операторы

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \hat{P}_x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_x^2 \quad (7.18)$$

Бұл жағдайда Шредингер теңдеуі:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (7.19)$$

егер $\frac{2m_0}{\hbar^2} E = k^2$ деп белгілесек, (7.19)-шы теңдеудің дербес шешуі мынадай болады:

$$\Psi_{1,2} \approx e^{\pm ikx} \quad (7.20)$$

Бөлшектің энергиясы оң менді болғанда $E > 0$, (7.20)-шы шешу бүкіл кеңістікте үзіліссіз және шектелген болады. Яғни, микробөлшек бүкіл кеңістікте еркін қозғалғанда оның энергиясының меншікті мәндерінің спектрі үзіліссіз болады.

Егер Ψ_1 және Ψ_2 функцияларын (7.19)-шы Шредингер теңдеуіне қойсақ, онда осы екі меншікті функцияларға энергияның бір меншікті E мені сәйкес келетіндігін көреміз. Ол бұл энергиялық деңгейдің "азған" екендігін көрсетеді және осы жағдайда азғындық реті екіге тең болады.

Азғандықтың физикалық мағынасын түсіну үшін энергияның меншікті функцияларының импульс операторының да меншікті функциялары бола ала ма, жоқ па соны қарастыралық. Кинетикалық энергия мен импульстің арасындағы байланыс

$$\sqrt{2m_0 E} = P$$

Енді (7.17)-ші қатынасты пайдалансақ,

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} &= -i\hbar \frac{d}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} P_x x} = P \Psi_1 \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial x} &= -i\hbar \frac{d}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} P_x x} = -P \Psi_2 \end{aligned}$$

Бұл қатынастар шындығында да энергия операторының меншікті функцияларының импульс операторының да меншікті функциялары болатындығын көрсетеді және бір меншікті функцияға импульстің $+p$ меншікті мені, екіншісіне $-p$ меншікті мені сәйкес келеді. Сонымен, энергияның меншікті функцияларының азғындығы еркін қозғалыстағы бөлшектің түзу сызықты қозғалысының бағытының анықталмағандығына байланысты болады. Мәндері үзіліссіз спектр болатын меншікті функциялардың тағы бір қасиетін қарастырайық. $e^{\frac{i}{\hbar} P_x x}$ функциясы x -айнымалы $-\infty$ пен $+\infty$ -ке дейін өзгергенде шектелген болғанмен де, оның модулінің квадратынан алынған интеграл (нормалау шарты бойынша) жинақталмайды:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} P_x x} e^{\frac{i}{\hbar} P_x x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty \quad (7.21)$$

яғни, бұл функцияларда бұрыннан белгілі әдістермен нормалау мүмкін емес. Жалпы оператордың меншікті мәндері үзіліссіз болған жағдайдың бәрінде де меншікті функциялардың осы қасиеті сақталады. Дискретті және үзіліссіз спектрлердің арасындағы осы айырмашылықтарға ердайым көңіл бөлу қажет. Спектр дискретті

болғанда, Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 т.б. меншікті функцияларға $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \dots$ т.б. дискретті меншікті мәндер сәйкес келеді, ал үзіліссіз спектр жағдайында $\Psi(x, \lambda)$ меншікті функциясының мәні үзіліссіз болатын λ параметріне теуелді болады. Мұндай функцияларды нормалау мүмкіндіктерінің бірін М. Борн ұсынды. Борн бойынша $\Psi(x)$ толқындық функцияға шекаралық шарттың орнына, мерзімділік шарт қойылады:

$$\Psi(x) = \Psi(x+L) \quad (7.22)$$

Мұнда параметр L - мерзімділік ұзындығы деп аталады. L кез келген үлкен шамаға ($L \rightarrow \infty$) ие бола алады. Себебі, бұл параметр есептеулердің соңғы нәтижелеріне айқын түрде енбейді. (7.22)-ші шарт бойынша

$$e^{ikx} = e^{ik(x+L)} \quad (7.23)$$

бұдан $e^{ikL} = 1$, яғни

$$K = \frac{2\pi n}{L} \quad (7.24)$$

мұнда $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

екінші жағынан $k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E$ болғандықтан, энергияның меншікті мәндері

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \frac{2\pi^2 \hbar^2 n^2}{m_0 L^2} \quad (7.25)$$

L -дің бүкіл мәнінде Ψ периодты функция болғандықтан, нормалау шартын былай жазуға болады:

$$\int_{-L/2}^{L/2} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (7.26)$$

Бұл теңдеуге $\Psi = A e^{ikx}$ мәнін қойсақ, онда

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (7.27)$$

Сонда нормаланған шешу мынадай түрде жазылады:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i \frac{2\pi n}{L} x} \quad (7.28)$$

(7.28)-ші функциялар нормалануы мен қатар ортогонал функциялар екендігін де көрсетуге болады:

$$\int_{-L/2}^{L/2} \Psi_{L'}^* \Psi_L dx = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} e^{-\frac{2\pi i}{L}(L'-L)x} dx = \frac{\sin \pi(L'-L)}{\pi(L'-L)} = \begin{cases} 0 & \text{егер } L \neq L' \\ 1 & \text{егер } L = L' \end{cases} \quad (7.29)$$

Сонымен, жасанды түрде мерзімділік ұзындығы L ұғымын енгізу арқылы, үзіліссіз спектрді қалай дискретті спектрге айналдыруға болатындығын, Борн ұсынған едіспен көрсеттік. Шектік жағдайда, L шексіздікке ұмтылғанда, керісінше үзіліссіз спектрге ауысамыз. Шындығында да

$K = \frac{P}{\hbar} = \frac{m_0 v}{\hbar}$ екендігін ескерсек көршілес

орналасқан деңгейлердің энергияларының ара қашықтықтарын анықтай аламыз:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k}{m_0} \cdot \frac{2\pi}{L} = v \frac{2\pi \hbar}{L} \quad (7.30)$$

Бұдан, $L \rightarrow \infty$ болғанда $\Delta E \rightarrow \infty$, яғни энергия үзіліссіз мәндерге ие болады.

Бөлшектің бір өлшемді еркін қозғалысындағы үзіліссіз спектрді нормалаудың тағы бір мүмкіндігі δ - функцияны пайдалану. Егер Ψ меншікті функциясын мынадай түрде алсақ,

$$\Psi(p) = Ae^{\frac{i}{h}Px}, \quad \Psi^*(p) = Ae^{\frac{i}{h}Px} \quad (7.31)$$

онда δ -функцияны пайдаланып осы нормалау шартын былай жазуға болады:

$$\int \Psi^*(p')\Psi(p)dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ix\left(\frac{p-p'}{h}\right)} = A^2 2\pi h \delta(p-p') = \delta(p-p') \quad (7.32)$$

бұдан

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \quad (7.33)$$

меншікті функция

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} e^{\frac{i}{h}Px} \quad (7.34)$$

Толқындық функцияларды қарапайым нормалау шарты мен δ -функция арқылы нормалауды салыстырайық. Ол үшін қарапайым нормалауды (Борн өдісі) мынадай түрде жазалық:

$$\sum_{n'=n_1}^{n_2} \int \Psi_{n'}^* \Psi_n dx = \begin{cases} 1, & \text{егер мына аралықта } n_1 < n_2 \text{ орналасқан} \\ & \text{болса.} \\ 0, & \text{егер } n' - n_1 > n_2 \text{ аралығының сыртында жатса} \end{cases}$$

δ - функцияға нормаланған толқындық функциялар үшін

$$\int_{p_1}^{p_2} dp' \int \Psi^*(p')\Psi(p)dx = \begin{cases} 1, & \text{егер } p' - p_1 < p_2 \text{ мына аралығының ішінде} \\ & \text{орналасса.} \\ 0, & \text{егер } p' - p_1 < p_2 \text{ аралығының сыртында} \\ & \text{орналасқан болса} \end{cases}$$

Сонымен, микробөлшектің потенциялық шұңқырдағы (шектелген) және кеңістіктегі еркін (шектелмеген) қозғалыстарын қарастыру нәтижесінде, кеңістіктің $U > E$ нүктелерінің барлығында спектр үзіліссіз болады деген қортындыға келеміз.

§ 3. Квазиклассикалық жуықтау (ВКБ — тәсіл)

Алдыңғы тарауда біз $h \rightarrow 0$ болғанда кванттық теңдеулердің толығынан классикалық қозғалыс теңдеулерінде ауысатындығын көргенбіз. Яғни, S есер функциясы арқылы жазылған Шредингер теңдеуі

$$\frac{1}{2m_0} (\text{grad}S)^2 + U - E - ih \frac{1}{2m_0} \nabla^2 S = 0 \quad (7.35)$$

Планк тұрақтысы нольге тең болғанда классикалық механиканың Гамильтон-Якоби теңдеуімен эквивалентті болады.

Бір өлшемді қозғалыс жағдайында (7.35)- ші теңдеу мынадай түрде жазылады:

$$i\hbar S''(x) + S'^2(x) + 2m_0(E - U) = 0 \quad (7.36)$$

(7.36)-шы теңдеудің шешуін шамасы аз \hbar параметрі арқылы іздестіреміз

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \hbar^2 S_2(x) + \dots \quad (7.37)$$

(7.37)-ші қатардың тек алғашқы екі мүшесімен шектеліп,

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) \quad (7.38)$$

оны (7.36)- шы теңдеуге қойсақ, мынадай өрнек аламыз:

$$2m_0(E - U) - S_0'^2 + \hbar(iS_0'' - 2S_0' \cdot S_1') = 0 \quad (7.39)$$

Соңғы теңдеуде тепе- теңдік шарты орындалуы үшін \hbar параметрі жоқ мүшелер нольге тең болуы керек

$$2m_0(E - U) - S_0'^2 = 0 \quad (7.40)$$

$$iS_0'' - 2S_0' \cdot S_1' = 0 \quad (7.41)$$

(7.40)- шы шарттан $2m_0(E - U) = p$ екендігін ескерсек:

$$S_0' = \pm \sqrt{2m_0(E - U)} = \pm p \quad (7.42)$$

бұдан

$$S_0 = \pm \int_{x_0}^x dx \cdot p \quad (7.43)$$

мұнда x_0 – қозғалыс жүретін түзу сызықтың бойынан алынған, бекітілген нүкте. (7.41)-ші теңдеуден $S_1(x)$ - ті табуға болады:

$$S_1 = \frac{i}{2} \frac{S_0''}{S_0'} - \frac{i}{2} \ln(\ln S_0')$$

бұл теңдеуді интегралдасақ

$$S_1(x) = \frac{i}{2} \ln S_0 = \frac{i}{2} \ln p = i \ln \sqrt{p} \quad (7.44)$$

Енді (7.41)-ші және (7.42)-ші нәтижелерді (7.38)- ші жуықтап алынған теңдеуге қойсақ

$$S(x) = \pm \int_{x_0}^x dx \cdot p + i\hbar \ln \sqrt{p} \quad (7.45)$$

Толқындық функция Ψ мен S - әсер функциясының арасындағы байланысты алыш

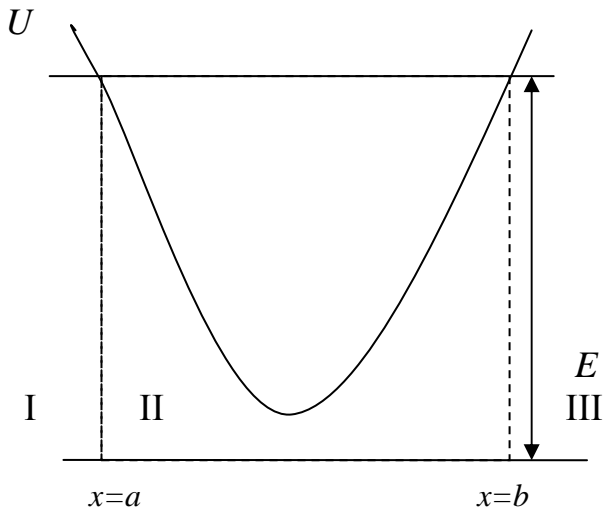
$$\Psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \quad (7.46)$$

ондағы $S(x)$ функциясының орнына (7.45)- ші теңдеуді қойсақ мынадай қатынасқа келеміз

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}} \left(C_1 e^{\frac{i}{\hbar} S p dx} + C_2 e^{\frac{i}{\hbar} S p dx} \right) \quad (7.47)$$

Шредингер теңдеуінің шешуі жуықтап алынған (7.47)-ші толқындық функциямен сипатталуы Вентцель-Крамерс-Бриллюэннің жуықтау тәсілі деп, қысқаша ВКБ - тәсілі деп аталады.

Енді микробөлшектің кез келген формалы, бір өлшемді потенциалдық шұңқырдағы қозғалысын қарастырайық (7.2-сурет). $E > U_{\min}$ – белгілі бір стационар күйдің энергиясы болсын.



(7.2 сурет)

Бір өлшемді қозғалыстың жалпы қасиеттері бойынша энергияның мәндері дискретті спектрге жатады және осы мәндерге сәйкес келетін энергиялық деңгей азбаған болады. Бұл деңгейдің потенциялық қисықпен қиылысу нүктелері $x = a$ және $x = b$ классикалық бұрылыс нүктелеріне сәйкес келеді, бұл нүктелерде кинетикалық энергия нольге тең болады, классикалық микробөлшек шұңқыр қабырғаларына соқтығысып, кері серпіледі. Ал, кванттық механикада

бөлшектердің классикалық физикада өтуге мүмкін емес бірінші ($x < a$) және үшінші ($x > b$) обылыстарға да өту ықтималдығының нольге тең болмайтындығы белгілі.

Кеңістіктің ертүрлі нүктелеріндегі бөлшектің қозғалысын ВКБ—тесілін пайдаланып қарастырайық. Шұңқырдың ішінде, яғни екінші обылыста ($a < x < b$) энергия $E > U$ және импульс p -ның мәні нақты. Сондықтан (7.47)-ші жалпы шешу мынадай түрде беріледі:

$$\Psi_{II} = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_a^x p ds + \theta\right) \quad (7.48a)$$

немесе

$$\Psi_{II} = \frac{C'}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_x^b p ds + \theta'\right) \quad (7.48b)$$

Классикалық шұңқырдағы бөлшек енуі мүмкін емес обылыстар (I, III) үшін энергия $E < U$, ал импульс p жорымал мәндерге ие болады. Бұл жағдайда (7.47)-ші жалпы шешу

$$\Psi = \frac{A'}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int |p| dx} + \frac{B'}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int |p| dx} \quad (7.49)$$

мұнда $|p|$ нақты сан

$$|p| = \sqrt{2m_0(U - E)} \quad (7.50)$$

$|x| \rightarrow \infty$ болғанда толқындық функцияның шектелген болуы қажет деген стандарт шартты қанағаттандыру үшін (7.49)-шы өрнектегі екінші мүшенің алдындағы коэффициент B -ты нольге теңестіреміз. Сонда I-ші облыс үшін ($x < a$) жалпы шешу былай жазылады:

$$\Psi_I = \frac{A}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x |p| d\xi} \quad (7.51)$$

Ал үшінші обылыс ($x > b$) үшін

$$\Psi_{III} = \frac{B}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^b |p| d\xi} \quad (7.52)$$

Бірақ ВКБ-тесілімен алынған үш шешуде (7.48), (7.51), (7.52)- бөлшектің бұрылыс нүктелерінен алыс болғанда ғана дұрыс болады. Себебі $x = a$ және $x = b$ нүктелерінде

$E = U$ болады. Ал импульс p бұрылыс нүктелерінде нольге тең және $1/\sqrt{p}$ шексіздікке ұмтылады. Сондықтан келесі мәселе: $x = a$ және $x = b$ нүктелерінде осцилляциялық және экспоненциалдық шешулерді Шредингер теңдеуін қанағаттандыратын қылып біріктіру (тігу) қажет. Бұл мәселе толығынан едебиетте қарастырылған және мынадай нәтиже алынған. Егер бөлшек потенциалдық шұңқырдың сыртында, I-ші облыста болса, онда толқындық функция (7.51)-ші өрнекпен сипатталады, ал бөлшек потенциалдық шұңқырдың ішінде, II-ші облыста болса, толқындық функция:

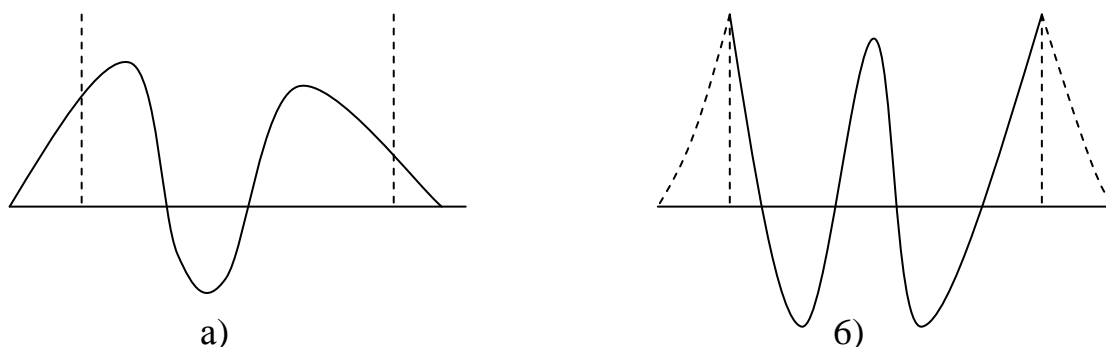
$$\Psi_{II} = \frac{2A}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{h} \int_a^x p d\xi + \frac{\pi}{4}\right) \quad (7.53)$$

Ал, егерде бөлшек x осінен оңға қозғалып, III-ші облыста ($x > b$) болса, онда толқындық функция (7.52)-ші өрнекпен беріледі де, II-ші облыста

$$\Psi_{II} = \frac{2B}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{h} \int^x p d\xi + \frac{\pi}{4}\right) \quad (7.54)$$

толқындық функциямен сипатталады.

Алынған қатынастарды түсіну үшін гармоникалық осциллятор үшін жазылған Шредингер теңдеуінің бесінші энергиялық деңгей үшін табылған дәл шешуі мен ВКБ-тәсілі арқылы жуықтап алынған шешулердің нәтижелерін салыстырайық (7.3, 7.4-суреттер).



7.3—сурет. Шредингер теңдеуінің дәл шешімі мен квазиклассикалық ВКБ—тәсілімен жуықтап алынған шешуді салыстыру.

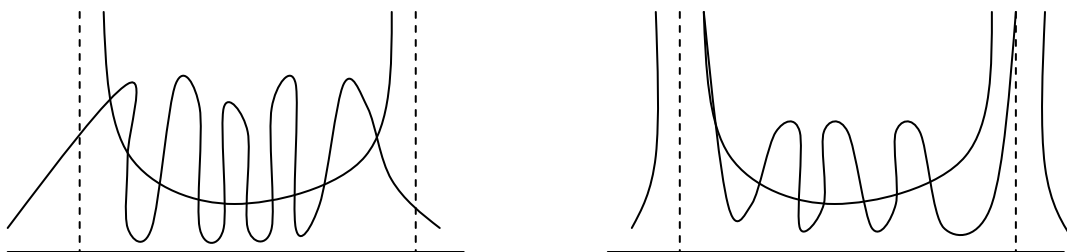
а) Сызықтық гармоникалық осциллятордың $n = 5$ энергиялық деңгей үшін Шредингер функциясы

б) Осы жағдай үшін ВКБ жуықтауы.

Суреттерден классикалық бақылауға мүмкін облыста ВКБ-жуықтаудың кванттық шешуді аппроксимациялайтындығын көреміз. Ал, осы облыстың шекарасында квазиклассикалық жуықтау классикалық шешуге ауысады. ВКБ-тәсілімен алынған толқындық функция бөлшек I-ші облыстан II-ші облысқа және II-

ші облыстан III-ші облысқа ауысқанда үзіліссіз болуы үшін (7.51) және (7.54)-ші функциялар бірдей болуы қажет:

$$A \sin\left(\frac{1}{h} \int_a^x p d\xi + \frac{\pi}{4}\right) = B \sin\left(\frac{1}{h} \int_b^x p d\xi + \frac{\pi}{4}\right) \quad (7.55)$$



а)

б)

7.4-сурет. а) Шредингер шешуін классикалық үлестіру сызығымен салыстыру.

б) Осы жағдай үшін квазиклассикалық жуықтау

Бұл теңдік орындалуы үшін фазалардың қосындысы π – ге пропорционал болуы керек:

$$\left(\frac{1}{h} \int_a^x p d\xi + \frac{\pi}{4}\right) + \left(\frac{1}{h} \int_b^x p d\xi + \frac{\pi}{4}\right) = \pi(n+1) \quad (7.56)$$

мұнда $A = (-1)^n B$ шы қатынастан

$$\int_a^b p(x) dx = wh\pi \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (7.57)$$

мұндағы

$$\int_a^b p dx = \frac{1}{2} \int_a^b p dx$$

екендігін ескерсек (7.57)-ші теңдік мынадай түрге келеді

$$\int_a^b p(x) dx = 2\pi wh \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (7.58)$$

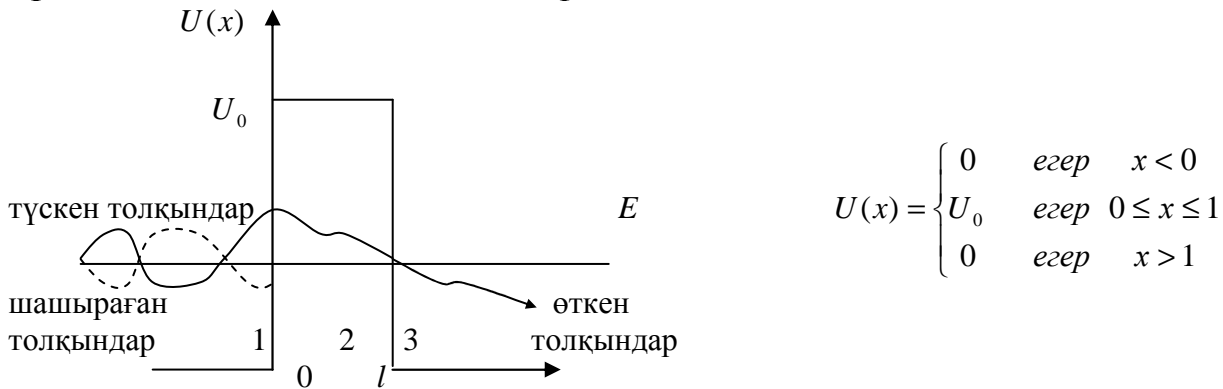
Бұл қатынас ВКБ-жуықтауында микробөлшектің стационар күйлерін анықтайды. Ол жалпы физика курсынан белгілі Бор – Зоммерфельд кванттау ережесіне сәйкес келеді. Айырмашылығы – кванттық сан n емес, $n+1/2$ болуында. (7.58)-ші кванттық теорияда гармоникалық осциллятордың нольдік тербелісі энергиясының $E = \frac{1}{2} wh$ болатындығын көрсетеді, ал Бор – Зоммерфильд теориясында $n=0$ болғанда гармоникалық осциллятордың энергиясы нольге тең болатын. ВКБ – жуықтау тесілін пайдаланып кванттық механиканың көптеген мәселелерін шешуге болады. Солардың біріне микробөлшектердің потенциалық тосқауылдан тікелей өтуі — туннельдік эффект жатады. ВКБ – тесіліне сүйене отырып дифференциалық теңдеулерді зерттеудің жаңа едістері де тағайындалған.

§ 4. Бөлшектің потенциалық тосқауыл арқылы тікелей өтуі. Туннельдік эффект

Классикалық механика бойынша бөлшек кеңістіктің тек толық энергия потенциалық энергиядан артық, болатын нүктелерінде ғана бола алады. Себебі - бөлшектің кинетикалық энергиясы әр уақытта да нольден үлкен шама:

$$\frac{P}{2m_0} = E - U(x) > 0 \quad (7.59)$$

Егер $U(x) < E$ болса, онда (7.59)-шы теңдеуден импульс жорымал мәндерге ие болатындығын көреміз. Бұл классикалық механика бойынша мүмкін емес жағдай. Сондықтан кеңістіктің $U > E$ және $E > U$ болатын облыстары потенциалдық тосқауылмен шектелгенде бөлшектің бір облыстан екінші облысқа тікелей өтуі классикалық механика бойынша мүмкін емес жағдай. Ал кванттық механикада импульстің жорымал мәндері (ВКБ-тәсілі) координатаға экспоненциалды түрде тәуелді толқындық функциямен анықталады. Сондықтан, потенциалдық тосқауыл ішіндегі бөлшектің қозғалысын сипаттайтын толқындық функция нольден өзгеше болады, яғни бөлшектің потенциалдық тосқауылдан тікелей өтуінің ықтималдылығы да нольге тең болмайды. Ал микробөлшектер үшін бұл құбылыс тежірибеде бақылауға болатындай дәрежеде болады. Бөлшектердің потенциалдық тосқауыл арқылы тікелей өту құбылысы туннельдік эффект деп аталады. Туннельдік эффект тек кванттық механикаға ғана тән құбылыс және оның классикалық физикада ешқандай баламасы жоқ.



7.5-сурет. Бөлшектердің потенциалдық тосқауылдан өтуі.

Бөлшек оң бағытта x осінің бойымен қозғалып I-ші облыста ($-\infty < x < 0$) таралу жолында $x=0$ нүктесінде $E < U(x)$ потенциалдық тосқауылға ($0 \leq x \leq l$) жолығып, одан өткеннен кейін кері $E > U(x)$ болатын III-ші облысқа ($x > l$) өтсін (7.5-сурет). Потенциалдық тосқауылдың бастапқы және соңғы нүктелері

$$U(x) = E$$

шартынан анықталады. Осы бөлшектің қозғалысына сәйкес келетін де Бройль толқындарының кейбірі потенциалдық тосқауылдан кері шашырайды, ал бір бөлігі тосқауылдан тікелей өтіп, III-ші облысқа шығады да әрі қарай таралады. Бөлшектердің потенциалдық тосқауылдан тікелей өтуінің ықтималдылығын анықтау үшін осы үш облыста таралатын толқындар үшін Шредингердің стационар теңдеулерін жазалық:

$$\frac{d^2\Psi_1(x)}{dx^2} + k^2\Psi_1(x) = 0 \quad (7.60)$$

$$\frac{d^2\Psi_2(x)}{dx^2} + k^2n^2\Psi_2(x) = 0 \quad (7.61)$$

$$\frac{d^2\Psi_3(x)}{dx^2} + k^2\Psi_3(x) = 0 \quad (7.62)$$

мұндағы $k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} E$, $n^2 = \frac{E - U_m}{E}$

U_m - потенциалдық тосқауылдың биіктігі. Егер $E > U_m$ болса параметр n нақты мәндерге ие болады, ал $E < U_m$ жағдайда n -нің мәні жорымал: $n = i\ln l$. (7.60)- (7.62)-ші тендеулердің шешуін төмендегідей түрде іздейміз:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (7.63)$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{iknx} + B_2 e^{-iknx} \quad (7.64)$$

$$\Psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \quad (7.65)$$

мұнда $A_1 e^{ikx}$ - I-ші облысқа түскен толқындарды, $B_1 e^{-ikx}$ - I-ші облыстан шашыраған толқындарды, $A_3 e^{ikx}$ - III-і облысқа өткен толқындарды сипаттайды.

III-ші облыста шашырайтын толқындар жоқ болғандықтан коэффициент $B_3 = 0$ деп қабылдаймыз. Толқындық функциялардың үзіліссіздігінен шекаралық шарттарды мынадай түрде жазуға болады:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x)|_{x=0} &= \Psi_2(x)|_{x=0} \\ \Psi_2(x)|_{x=l} &= \Psi_3(x)|_{x=l} \end{aligned} \quad (7.66)$$

және толқындық функциялардың бірінші туындыларының үзіліссіздігінен

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_1}{dx} \Big|_{x=0} &= \frac{d\Psi_2}{dx} \Big|_{x=0} \\ \frac{d\Psi_2}{dx} \Big|_{x=l} &= \frac{d\Psi_3}{dx} \Big|_{x=l} \end{aligned} \quad (7.67)$$

Егер (7.66)-шы және (7.67)-ші қатынастарға толқындық функциялардың мөндерін қойсақ, онда

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (7.68a)$$

$$A_2 e^{iknl} + B_2 e^{-iknl} = A_3 e^{ikl} \quad (7.68б)$$

$$A_1 - B_1 = n(A_2 - B_2) \quad (7.68в)$$

$$n(A_2 e^{iknl} - B_2 e^{-iknl}) = A_3 e^{ikl} \quad (7.68г)$$

Сонымен біз A_1, A_2, B_1, B_2, A_3 - бес белгісіз коэффициенттері бар (7.68 а, 7.68 г) төрт теңдеу алдық. A_1 коэффициенті арқылы қалған A_2, B_1, B_2, A_3 коэффициенттерін сипаттайық.

$$B_2 = \frac{2(n-1)e^{iknl}}{(1+n)^2 e^{-iknl} - (1-n)^2 e^{iknl}} A_1 \quad (7.69)$$

$$A_2 = \frac{2(n+1)e^{-iknl}}{(1+n)^2 e^{-iknl} - (1-n)^2 e^{iknl}} A_1 \quad (7.70)$$

$$B_1 = \frac{(1-n)^2 (e^{-iknl} - e^{iknl})}{(1+n)^2 e^{-iknl} - (1-n)^2 e^{iknl}} A_1 \quad (7.71)$$

$$A_3 = \frac{4ne^{-ikl}}{(1+n)^2 e^{-iknl} - (1-n)^2 e^{iknl}} A_1 \quad (7.72)$$

Микробөлшектердің потенциалдық тосқауылда шашырау коэффициенті ұғымын енгізейік. Шашырау коэффициенті деп тосқауыл бетінен шашыраған толқындар ағынының потенциалдық тосқауыл бетіне түскен толқындар ағынына қатынасына тең шаманы түсінеміз:

$$R = \frac{j_{\text{шашыр}}}{j_{\text{төскен}}} \quad (7.73)$$

Сонымен қатар потенциялық тосқауылдың "мөлдірлік" коэффициенті ұғымын да енгізелік:

$$D = \frac{j_{\text{түскен}}}{j_{\text{төксен}}} \quad (7.74)$$

Бұл коэффициент тосқауыл бетіне түскен толқындардың қандай бөлігі одан тікелей өтіп шығатындығын көрсетеді. Толқындар ағынының шамасын есептеу үшін бұрыннан белгілі (5.19) өрнегін пайдаланамыз:

$$j = \frac{\hbar k}{2m_0} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \quad (7.75)$$

Бұл өрнекке (7.63)-(7.65)-ші қатынастардың керекті бөліктерін қойсақ, түскен толқындар ағыны үшін:

$$j_{\text{төксен}} = \frac{\hbar k}{m_0} |A_1|^2 \quad (7.76)$$

осы сияқты түскен толқындардың шашыраған және өткен бөліктері:

$$j_{\text{шашыр}} = -\frac{\hbar k}{m_0} |B_1|^2 \quad (7.77)$$

$$j_{\text{түскен}} = \frac{\hbar k}{m_0} |A_3|^2 \quad (7.78)$$

Енді де Бройль толқындарының потенциялық тосқауылдан шашырау және мөлдірлік коэффициенттерін анықтасақ:

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad (7.79)$$

$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad (7.80)$$

Классикалық теория бойынша, егер бөлшектің энергиясы E потенциялық энергиядан артық болса, $E > U_m$ онда

$$R = 0 \quad \text{және} \quad D = 1$$

ал, кванттық теория бойынша

$$R \neq 0 \quad \text{және} \quad D \neq 1$$

Керісінше, бөлшектің толық энергиясы E потенциялық тосқауыл биіктігінен кем $E < U_m$ болса, онда классикалық теория бойынша

$$R = 1 \quad \text{және} \quad D = 0$$

ал, кванттық теория бойынша

$$R \neq 1 \quad \text{және} \quad D \neq 0$$

$E > U_m$ болғанда кванттық механика бойынша мөлдірлік коэффициенттерінің нольге болмайтындығын дәлелдейік. Қарастырып отырған жағдайымызда параметр $n = i|n|$, ал

мөлдірлік коэффициенті $D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$ мұндағы

$$|A_3|^2 = A_3 \cdot A_3^* = \frac{16|n|^2 e^{-2k|n|}}{(1+|n|^2)^2} |A_1|^2 \quad (7.81)$$

осы қатынасты (7.80)-ші өрнектегі D –ның орнына қойып, түрлендірулер жасасақ

$$D = \frac{16|n|^2}{(1+|n|^2)^2} e^{-2k|n|l} \quad (7.82)$$

$$D = D_0 e^{\frac{2\sqrt{2}l}{\hbar} \int \sqrt{2m_0(U_m - E)} dx}$$

(7.82)-ші өрнекке мынадай белгілеулер енгізсек

$$D_0 = \frac{16|n|^2}{(1+|n|^2)^2}$$

және

$$|n| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_0(U_m - E)}$$

екендігін ескерсек, потенциялық тосқауылдың мөлдірлік коэффициенті

$$D = D_0 e^{\frac{2\sqrt{2}l}{\hbar} \int \sqrt{2m_0(U_m - E)} dx} \quad (7.83)$$

мұнда l - потенциялық тосқауылдың ені. Егер потенциялық тосқауылдың формасы кез келген болса (7.83)-ші өрнек мынадай түрге келеді:

$$D = D_0 e^{\frac{2\sqrt{2}l}{\hbar} \int \sqrt{2m_0(U_m - E)} dx} \quad (7.84)$$

Планк тұрақтысының мені $\hbar \rightarrow 0$ болғанда мөлдірлік коэффициенті нольге тең болады, яғни бөлшектің потенциялық тосқауылдан тікелей өтуі мүмкін емес. Бұл классикалық шектік жағдай.

Микробөлшектердің потенциялық тосқауыл арқылы тікелей өту құбылысы бөлшектердің толқындық қасиеті бар екендігінің тікелей салдары болып табылады.

§ 5. Электрондардың металл бетінен салқын эмиссиясы

Туннельдік эффект теориясы металдар теориясында, ядролық физикада және физиканың басқа тарауларындағы классикалық физика түсіндіре алмаған құбылыстарды түсіндіре алады. Солардың ішіндегі ең маңыздыларының бірі-электрондардың металл бетінен салқын эмиссиясы яғни, сыртқы электр өрісінің есерінен электрондардың металл бетінен ұшып шығуы. Фотоэффект құбылысынан металлдағы электрондардың сырттан түскен фотонның hw энергиясының бір бөлігін жұтып алатындығы белгілі. Осы құбылыстың нәтижесінде электрон металл бетінен

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 = hw - A \quad (7.85)$$

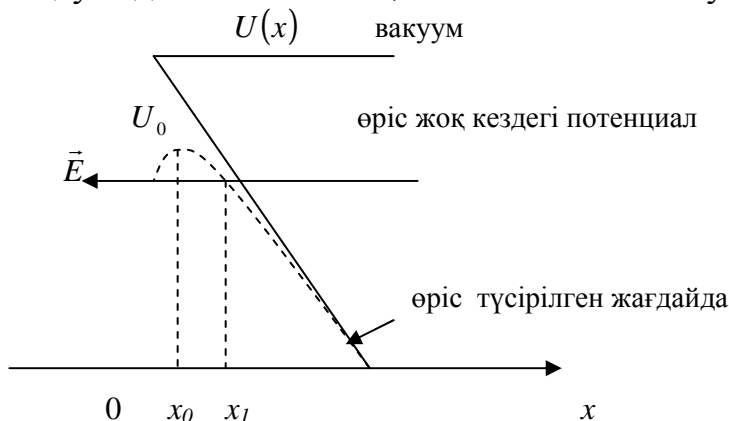
кинетикалық энергиямен ұшып шығады (Эйнштейн теңдеуі). Бұл теңдеуден электрондардың металл бетінен ұшып шығу жұмысының электрондардың энергиясының потенциялық тосқауыл энергиясынан артық қылуға жеткілікті минимум энергияның мөлшері екендігін көреміз. Егер металлдағы электрондардың (электрондық газдың) температурасы абсолюттік нольден жоғары болса, электрондардың бір бөлігі Ферми деңгейінен жоғары энергиялық деңгейлерге орналасады. Электрондық газдың кинетикалық энергиясын металды қыздыру нәтижесінде арттырса онда кейбір электрондардың энергиясы потенциялық тосқауыл энергиясынан артық болып, олар металл бетіне ұшып шығады, металда электр тогы

пайда болады. Мұндай құбылыс термоэлектрондық эмиссия деп аталып, оның электрондық лампаларда пайдаланылатындығы белгілі. Металда электр тогы сонымен қатар төменгі температураларда сыртқы электр өрісінің есерінен де пайда болуы мүмкін.

Металл бетіне x осіне қарсы бағытталған, кернеулігі \vec{E} электр өрісін түсірелік. Өріс түсірілгеннен кейінгі потенциалдық энергия

$$U(x) = U_0 - e_0 \vec{E}x \quad (7.86)$$

Потенциалдық энергияның графигінен (7.6-сурет) – сыртқы электр өрісінің есерінен екі жағынан шектелген потенциалдық тосқауылдың пайда болатындығын көреміз. Туннельдік эффектінің салдарынан электрондардың осы потенциалдық тосқауылдан тікелей өтіп, металл бетіне шығуының мөлдірлік коэффициенті



$$D = D_0 e^{\frac{2}{h} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m_0(U(x)-E)} dx} \quad (7.87)$$

Мұндағы интегралдың шегі x_1 -дің мені мынадай шарттардан анықталады:

7.6 - сурет. Электрондардың салқын эмиссиясы.

$$U_0 - e_0 E x_1 = E \quad \text{бұдан} \quad x_1 = \frac{U_0 - E}{e_0 E} \quad (7.88)$$

Сонда интеграл

$$\sqrt{2m_0} \int_0^{x_1} \sqrt{U(x) - E} dx = \frac{2}{3} \sqrt{2m_0 e_0 E} \cdot x_1^{3/2} \quad (7.89)$$

(7.88) және (7.89) қатынастарын пайдаланғанда, потенциалдық тосқауылдың мөлдірлік коэффициенті былай жазылады:

$$D = D_0^{\frac{3}{4}} \sqrt{2m} \frac{(U_0 - E)}{e_0 h E} = D_0 e^{\frac{\epsilon_0}{\epsilon}} \quad (7.90)$$

мұндағы ϵ_0 – электрондардың металл бетіне шығу жұмысына теуелді шама. Салқын эмиссия тогының тығыздығы мөлдірлік коэффициентіне пропорционал шама:

$$j = j_0 D = j_0 e^{\frac{\epsilon_0}{\epsilon}} \quad (7.91)$$

Бұл өрнектен салқын эмиссия құбылысын бақылау үшін қажетті сыртқы электр өрісінің кернеулігінің $\epsilon^{-1} 10^6$ в/см болуы керек екендігін есептеп шығаруға болады. Бұл шама тежірибелік деректерге сәйкес келеді.

8 ТАРАУ. СЫЗЫҚТЫҚ ГАРМОНИКАЛЫҚ ОСЦИЛЛЯТОР

§ 1. Классикалық және Бор теорияларындағы гармоникалық осциллятор

Гармоникалық осциллятор жайындағы есеп теориялық физиканың негізгі тарауларына жатады. Гармоникалық осциллятор теориясын пайдаланып қарапайым тербелістер теориясын құруға болады және оны механикада, классикалық электродинамикада, радиофизикада, физиканың басқа да тарауларында пайдаланады. Көптеген жағдайда жүйенің күрделі қозғалысын қарапайым тербелістерге жіктеуге болады.

Алдымен классикалық теориядағы гармоникалық осцилляторды қарастырайық. Массасы m_0 , заряды e_0 материалдық нүктеге

$$F = -kx \quad (8.1)$$

серпімді күш есер етсін, k – серпімділік коэффициенті, $k = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} |_{x=0}$

Сонда гармоникалық осциллятордың қозғалыс теңдеуін мынадай түрде жаза аламыз:

$$m_0 \ddot{x} + kx = 0 \quad (8.2)$$

ал, оның шешуі

$$x = a \cos \omega t \quad (8.3)$$

мұнда $\omega = \sqrt{\frac{k}{m_0}}$ – дүңгелек жиілік. Классикалық электродинамикадан зарядталған бөлшектің сәуле шығару қарқындылығы

$$W^{k^a} = \frac{2e_0^2}{3c^3} \ddot{x}^2 = \frac{e_0^2 a^2}{3c^3} \omega^4 \quad (8.4)$$

Потенциалдық энергия:

$$U(x) = -\int_0^x F(x) dx = \frac{kx^2}{2} = \frac{m_0 \omega^2 a^2}{2} \cos^2 \omega t \quad (8.5)$$

Кинетикалық энергия

$$T = \frac{m_0 \dot{x}^2}{2} = \frac{m_0 a^2 \omega^2}{2} \sin^2 \omega t \quad (8.6)$$

Сонда, толық энергия

$$E = T + U(x) = \frac{m_0 a^2 \omega^2}{2} \quad (8.7)$$

Сонымен, классикалық теорияда гармоникалық осциллятор энергияны үзіліссіз шығарады, сәуле шығару жиілігі механикалық тербеліс жиілігіне тең немесе пропорционал болады. Жартылай кванттық Бор теориясы да гармоникалық осциллятор теориясына кейбір жаңа моменттер қосады. Бұл теория бойынша адиабаттық инварианта:

$$\int P_x dx = nh \quad (8.8)$$

мұнда $n = 1, 2, 3, \dots$ кванттық сан.

$$P_x dx = m_0 \dot{x} \frac{dx}{dt} = m_0 a^2 \omega^2 \sin^2 \omega t dt \quad (8.9)$$

Сонда

$$E = \frac{m_0 a^2 \omega^2}{2} \quad (8.10)$$

екендігін ескерсек

$$\int P_x dx = nh = E_n \frac{2\pi}{\omega}$$

бұдан Бор теориясындағы гармоникалық осциллятордың толық энергиясы

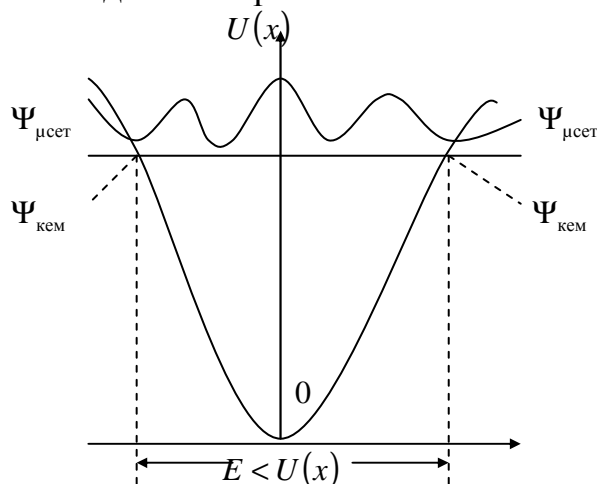
$$E_n = nh\omega \quad (8.11)$$

мұнда $n = 1, 2, 3, \dots$ Егер $n = 0$, энергия $E_{\text{Бор}} = 0$.

Сонымен, жартылай кванттық Бор теориясы бойынша гармоникалық осциллятордың энергиясы дискретті мәндерге ие болады, электромагниттік сәулелер осциллятор бірінші, жоғары энергиялық деңгейден екінші, төмен энергиялық деңгейге ауысқанда бөлініп шығады.

§ 2. Гармоникалық осциллятор энергиясының меншікті мәндері мен меншікті функциялары

Енді кванттық теориядағы гармоникалық осцилляторды қарастырайық. Ол үшін потенциалдық энергияның X -ке тәуелділігін қарастырайық. Графиктен, потенциалдық тосқауылдың сыртында толқындық функцияның өсетін де, кемитін да шешулері болатындығын көреміз.



Біздің мақсатымыз, толқындық функцияның өсетін мәндерінен құтылып, бір өлшемді қозғалыс үшін Шредингер теңдеуін шешіп, энергияның меншікті мәндері мен оларға сәйкес келетін меншікті функцияларды анықтау. Гармоникалық осциллятор үшін Шредингер теңдеуі:

8.1-сурет. Энергияның кез келген мәніне сәйкестендірілген толқындық функция.

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left[E - \frac{m_0 w^2 x^2}{2} \right] \Psi(x) = 0 \quad (8.12)$$

Мынадай белгілеулер енгізелік:

$$\alpha = \frac{2m_0}{\hbar^2} E, \quad \beta = \frac{1}{x_0^2} = \frac{m_0 w}{\hbar}, \quad \frac{\alpha}{\beta} = \frac{2E}{\hbar w} \quad (8.13)$$

және $\xi = x \sqrt{\beta} = \frac{x}{x_0}$ - өлшемсіз айнымалы.

Сонда (8.12)-ші теңдеудің орнына мынадай теңдеу аламыз:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi(\xi) = 0 \quad (8.14)$$

Бұл функцияның айнымалысы $\xi \rightarrow \pm\infty$ ұмтылса ($\lambda \ll \xi^2$), онда (8.14)-ші теңдеу былай жазылады:

$$\Psi'' - \xi^2 \Psi = 0 \quad (8.15)$$

Бұл теңдеудің шешуін мынадай түрде іздестіреміз:

$$\Psi_{\infty} e^{a\xi^2} \quad (8.16)$$

Бұл қатынасты (8.16)-ші теңдеуге қойсақ, онда

$$4a^2 \xi^2 e^{a\xi^2} - \xi^2 e^{a\xi^2} = 0 \quad (8.17)$$

Бұдан $4a^2 - 1 = 0$ бұдан $a = \pm \frac{1}{2}$

Сонда (8.16)-шы шешудің орнына мынадай қатынас аламыз:

$$\Psi_{\infty} = C_1 e^{\frac{1}{2}\xi^2} + C_2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \quad (8.18)$$

$\xi \rightarrow \pm\infty$ ұмтылғанда, толқындық функция шектелген болуы керек шартынан, $C_2 = 0, C_1 = 1$ болуы қажет. Енді (8.18) мынадай түрге келеді:

$$\Psi_{\infty} = e^{\frac{1}{2}\xi^2} \quad (8.19)$$

Сонда (8.14)-ші теңдеудің шешуі былай жазылады:

$$\Psi(\xi) = \Psi_{\infty} U(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} U(\xi)$$

Енді (8.14)-ші теңдеу мынадай түрге келеді:

$$U''(\xi) - 2\xi U'(\xi) + (\lambda - 1)U(\xi) = 0 \quad (8.20)$$

Бұл теңдеудің шешуін қатар ретінде іздестіреміз:

$$U(\xi) = a_0 + a_1 \xi + a_2 \xi^2 + \dots + a_n \xi^n = \sum_{k=1}^n a_k \xi^k \quad (8.21)$$

(8.21)-ші қатарды (8.20)-шы теңдеуге қойып, қосындының индексін бір менге келтіреміз:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \xi^k [(k+2)(k+1)a_{k+2} - a_k(2k+1-\lambda)] = 0 \quad (8.22)$$

Бұл рекурренттік қатынас:

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (8.23)$$

Бұдан $k \rightarrow \infty$ жағдайда

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} \approx \frac{2}{k}$$

(8.21)-ші дәрежелі қатардың e^{ξ^2} түрінде өсетіндігін көреміз. Мұны делелдеу үшін функциясын қатарға жіктейік

$$e^{\xi^2} = 1 + \xi^2 + \frac{\xi^4}{2!} + \frac{\xi^6}{3!} + \dots + \frac{\xi^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!} + \frac{\xi^{k+2}}{\left(\frac{k}{2}+1\right)!} + \dots = 1 + \xi^2 + \dots + b_k \xi^k + \dots + b_{k+2} \xi^{k+2}$$

бұдан

$$\frac{b_{k+2}}{b_k} = \frac{\left(\frac{k}{2}\right)!}{\left(\frac{k}{2}+1\right)!} = \frac{k}{2}$$

- жоғарыда айтылған тұжырым делелденді.

(8.21)-ші қатар $k_{\max} = n$ менімен шектеліп, $a_n \neq 0$ және $a_{n+2} = 0$ болса, онда

$$\lambda = 2n + 1 \quad (8.24)$$

(8.13)-ші қатынас бойынша $\lambda_n = 2E_n / h\omega$

Сонда кванттық механикадағы гармоникалық осциллятордың энергиясының меншікті мәндері:

$$E_n = h\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (8.25)$$

мұндағы $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Егер $n=0$ болса, гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясы:

$$E_0 = \frac{1}{2} h\omega \quad (8.26)$$

(8.26)-ші рекуренттік қатынастан (8.21)-ші полиномның жұптылығы n санының менінің жұптылығына байланысты екендігін көреміз. Сондықтан полиномды былай жазуға болады:

$$U_n(\xi) = a_n \xi^n + a_{n-2} \xi^{n-2} + \dots + \begin{cases} a_0, & \text{егер } n - \text{жұп болса} \\ a_1 \xi, & \text{егер } n - \text{тақ болса} \end{cases} \quad (8.27)$$

$a_n = 2^n$ деп қабылдап, (8.23)-ші рекуренттік формуладан қалған коэффициенттердің мәндерін анықтайық.

a_k коэффициенттері үшін $\lambda = 2n + 1$ болғанда

$$a_k (\lambda - 1 - 2k) = a_k (2n + 1 - 1 - 2k) = a_k (2n - 2k) = -a_{k+2} (k + 2)(k + 1)$$

немесе

$$a_{n-2} = -a_n (n-1) / (2 \cdot 2) = -2^n n(n-1) / 2!$$

$$a_{n-4} = -a_{n-2} (n-2)(n-3) / (2 \cdot 4) = 2^{n-4} n(n-1)(n-2)(n-3) / 2!$$

$a_n = 2^n$ және $\lambda = 2n + 1$ болатын (8.21)-ші дәрежелі қатар Эрмит полиномы деп аталады:

$$U(\xi) = H_n(\xi) = (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} + \dots + \begin{cases} a_1 \xi, & \text{егер } n - \text{тақ болса} \\ a_0, & \text{егер } n - \text{жұп болса} \end{cases} \quad (8.28)$$

$$\begin{aligned}
\text{жеке жағдайларда } H_0(\xi) &= 1 & \text{егер } n &= 0 \\
H_1(\xi) &= 2\xi & \text{егер } n &= 1 \\
H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 & \text{егер } n &= 2 \\
H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi & \text{егер } n &= 3 \dots
\end{aligned} \tag{8.29}$$

Эрмит полиномын тұйықталған күйде де жазуға болады:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{-\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \tag{8.30}$$

Сонымен, энергияның меншікті E_n менін сипаттайтын толқындық функция мынадай түрде жазылады:

$$\Psi_n(\xi) = C_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) \tag{8.31}$$

C_n -коэффициентін толқындық функцияны нормалау шартынан анықтауға болады.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n|^2 d\xi = C_n^2 x_0 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1$$

$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}$ болғандықтан теңдіктің оң жағындағы интегралды былай

түрлендіріп жазуға болады: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = (-1)^n \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = \frac{C_n^{-2}}{x_0}$

Енді

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n \cdot n!$$

және $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}$; екендігін ескерсек:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \sqrt{\pi} x_0}} \tag{8.32}$$

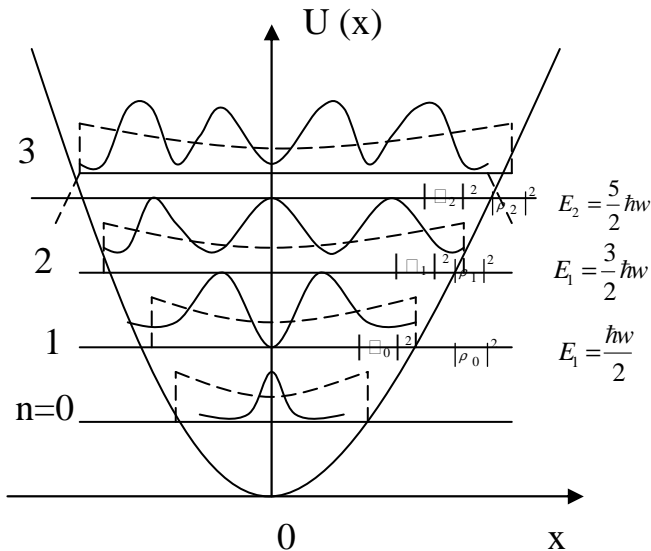
Сонда толық шешу

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \sqrt{\pi} x_0}} \tag{8.33}$$

Сонымен, кванттық механикадағы гармоникалық осциллятордың энергиясының меншікті мөндері мен оларға сәйкес келетін меншікті функциялар (8.25)-ші және (8.33)-ші өрнектермен анықталады. Энергияның меншікті мөндерінің спектрлерін қарастырайық.

$$\begin{aligned}
n=0 \quad E_0 &= \frac{1}{2} h\nu, & \Psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \\
n=1 \quad E_1 &= \frac{3}{2} h\nu, & \Psi_1(x) &= \frac{2\left(\frac{x}{x_0}\right)}{\sqrt{2\sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \\
n=2 \quad E_2 &= \frac{5}{2} h\nu, & \Psi_2(x) &= \frac{4\left(\frac{x}{x_0}\right)^2 - 2}{\sqrt{8\sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}
\end{aligned}$$

Бірінші толқындық функция x -тің ($x \rightarrow \pm\infty$ менінен басқа) қандай мәндерінде болса нольге тең болмайды. Екінші толқындық функция $x=0$ нүктесінде нольге тең болады. Толқындық функция нольге тең болатын нүкте түйін деп аталады. Ал үшінші толқындық функция $x = \frac{x_0}{\pm\sqrt{2}}$ нүктелерінде нольге тең, яғни түйіндердің саны екіге тең болады. Бұдан меншікті функциялардың түйіндерінің саны n кванттық санының мәндеріне тең болатындығын көреміз.



8.2-сурет. Энергияның меншікті мәндері, кванттық сан $n = 0, 1, 2$ болғанда гармоникалық осциллятордың меншікті функцияларын классикалық теориямен (үзікті сызық) салыстыру

Графиктен n -нің үлкен мәндерінде кванттық механиканың нәтижелерінің классикалық физиканың мәндеріне жуық келетіндігін көреміз.

§ 3. Гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясы және анықталмағандық қатынас

$E = h\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ қатынастан $n=0$ тең болғанда гармоникалық осциллятордың

энергиясының нольге тең болмайтындығын көреміз.

$$E_0 = \frac{1}{2}h\omega - \text{бұл шама}$$

гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясы деп аталады.

Ал, жартылай кванттық Бор теориясы бойынша негізгі күйде гармоникалық осциллятордың энергиясы нольге тең болады. Шредингер теориясындағы гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясының болуы анықталмағандық қатынастың яғни бөлшектердің толқындық қасиеті бар екендігінің тікелей салдары екендігін дәлелдейік. Гейзенбергтің анықталмағандық қатынасын мынадай түрде жазалық:

$$\overline{x^2} \cdot \overline{p^2} \geq \frac{h^2}{4} \quad (8.34)$$

Гармоникалық осциллятордың толық энергиясының орта мәні:

$$\overline{E} = \overline{H} = \frac{\overline{p^2}}{2m_0} + \frac{m_0 w^2}{2} \overline{x^2} \quad (8.35)$$

Егер мұндағы импульстің квадратының орнына (8.34)-ші қатынастағы импульстің менін қойсақ:

$$\overline{E} \geq \frac{h^2}{8m_0 x^2} + \frac{m_0 w^2}{2} \overline{x^2} \quad (8.36)$$

(8.36)-шы қатынастан гармоникалық осциллятордың энергиясының $\overline{x^2}$ –тың қандай менінде де нольге тең болмайтындығын көреміз. Шынында да, егер $\overline{x^2} \rightarrow 0$ ұмтылса, (8.36)-шы өрнектегі бірінші мүше шексіздікке ұмтылады. Ал егерде $\overline{x^2} \rightarrow \infty$ болса, онда (8.36)-шы теңдеудің екінші мүшесі шексіздікке ұмтылады. Енді гармоникалық осциллятор энергиясының $\overline{x^2}$ – тың қандай менінде минимум мәнге тең болатындығын анықталық. Ол үшін (8.36)-шы қатынасты $\overline{x^2}$ бойынша дифференциалдап, нольге теңестіреміз:

$$\frac{m_0 w^2}{2} - \frac{h^2}{8m_0 (\overline{x^2})} = 0 \quad (8.37)$$

бұдан

$$\overline{x^2} = \frac{h^2}{2m_0 w} = \frac{1}{2} x_0^2 \quad (8.38)$$

(8.38)-ші қатынасты (8.38)-ға қойып, энергияның минимум мәнін анықтаймыз:

$$E \geq \frac{hw}{4} + \frac{hw}{4} = \frac{hw}{2} \quad (8.39)$$

Сонымен гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясының $E_0 = \frac{hw}{2}$ екендігін көреміз. Гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясының болуы микробөлшектің толқындық қасиетінің бар болуының тікелей салдары. Егер осциллятордың энергиясы нольге тең болса, бөлшек тыныштық күйде болуы керек. Шектің импульсі мен координаты бір уақытта нольге тең дәлдікпен белгілі болады, бұл Гейзенбергтің анықталмағандық қатынасына қайшы келеді. Көптеген тежірибелік деректер кванттық теорияның тұжырымының дұрыс екендігін көрсетеді.

Кристалдың температурасы өзгергенде онда шашырайтын жарықтардың да өзгеретіндігін делелдейтін тежірибені қарастырайық. Жарықтың шашырауы атомдардың тербелісіне байланысты. Температура төмендеген сайын, классикалық механика бойынша, атомдардың тербеліс амплитудасы да нольге дейін төмендейді және жарықтың жайылып шашырауы қажет. Ал, кванттық механика бойынша температура төмендегенде ($T \rightarrow 0$) тербелістің орташа амплитудасы нольге емес, осциллятордың нольдік энергиясының болуына байланысты, белгілі бір шекті менге ұмтылады. Сондықтан жарық кристалдан жайылып шашырауы тиіс. Кристалдан шашыраған жарықтардың қарқындылығын өлшеу нәтижесінде гармоникалық осциллятордың нольдік энергиясының болатындығы тежірибеде делелденген.

§ 4. Гармоникалық осциллятордың сұрыптау ережелері

Гармоникалық осциллятордың сәуле бөліп шығару мәселесін кванттық теория тұрғысынан қарастырайық. Ол үшін мынадай штрицалық элементтерді

$$X_{n',n} = \int \Psi_{n'}^* \hat{X} \Psi_n dx \quad (8.40)$$

есептеу қажет. Мұндағы

$$\Psi_n(x) = C_n e^{\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) \quad (8.41)$$

(8.41)-ші қатынасты (8.40)-шы матрицалық элементтерге қойсақ, онда

$$X_{n',n} = x_0 \left\{ \frac{1}{2} \frac{C_{n-1}}{C_n} \delta_{n'+1,n} + \frac{1}{2} \frac{C_{n+1}}{C_n} \delta_{n'-1,n} \right\} \quad (8.42)$$

(8.42)-ші формуламен берілген матрицалық элементтер нольден өзгеше болуы үшін n – бас кванттық сан мынадай мөндерге ие болуы қажет: $n' = n - 1$ және $n' = n + 1$. Яғни, гармоникалық осциллятордың сұрыптау ережелері:

$$\nabla n = \pm 1 \quad (8.43)$$

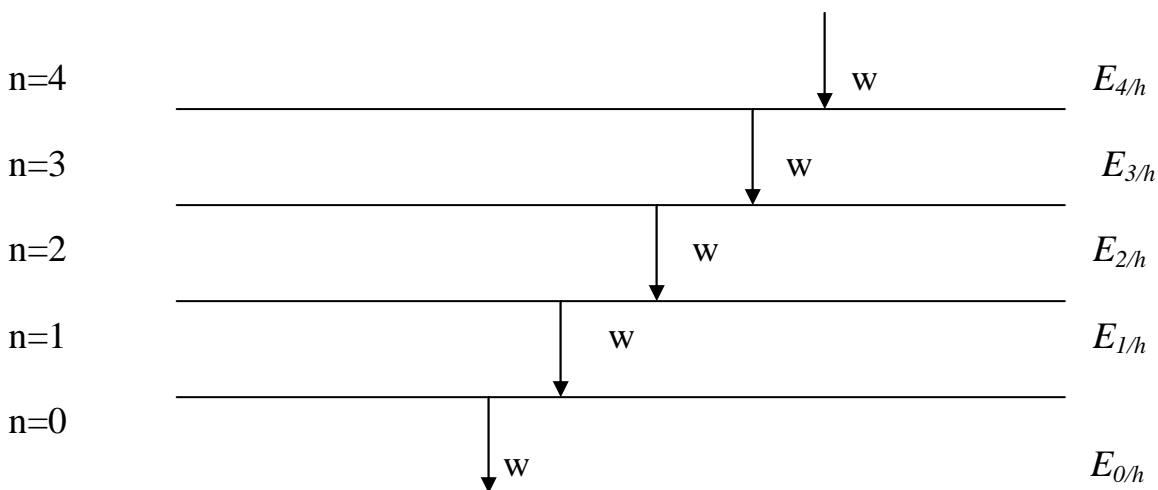
Сонда (8.42)-ші матрицалық элементтер түрге келеді:

$$X_{n-1,n} = X_0 \sqrt{\frac{n}{2}} \quad (8.44)$$

$$X_{n+1,n} = X_0 \sqrt{\frac{n+2}{2}} \quad (8.45)$$

Сәуле шығару жиілігі

$$\omega_{n,n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} \quad (8.46)$$



8.3-сурет. Гармоникалық осциллятордың рұқсат етілген өтулері.

Гармоникалық осциллятордың сеулені ерікті түрде тек жоғары энергиялық деңгейден төменгі деңгейде орын ауыстырғанда ғана бөліп шығаратындықтан, сеуле шығару қарқындылығы мынадай қатынастан анықталады:

$$W_{n,n-1} = \frac{2e_0^2 w^2}{3m_0 c^3} \hbar x \cdot n = \frac{2e_0^2 w^2}{3m_0 c^3} (E_n E_0) \quad (8.47)$$

9 ТАРАУ. КӨРІНІСТЕР ТЕОРИЯСЫНЫҢ НЕГІЗДЕРІ

Шредингер теңдеуі кеңістіктік координаталар мен уақытқа теуелді толқындық функциямен сипатталады. Бұл жағдайда толқындық функция координаталық көріністе берілген деп айтылады.

Кванттық механикада координаталық көріністен басқа импульстік, матрицалық (энергетикалық) және тағы басқа да көріністер пайдаланылады.

Гармоникалық осциллятор теориясы негізінде бұл көріністерді және олардың арасындағы байланысты талқылайық. Осы мақсатта классикалық теориядан белгілі импульс пен координатаның арасындағы байланысты сақтай отырып, гамильтонианды былай жаза аламыз:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m_0} + \frac{m_0 w^2}{2} \hat{X}^2 \quad (9.1)$$

пен арасындағы коммутативтік қатынас мынадай түрде болатындығы белгілі:

$$\hat{P}_x \hat{X} - \hat{X} \hat{P}_x = \frac{\hbar}{i} \quad (9.2)$$

Осы шартты қанағаттандыру үшін кванттық механикада әрқайсысы өзінің көріністерімен байланысты болатын әртүрлі әдістер қарастырылады. Біз негізі үш көріністі және олардың арасындағы байланысты қарастырамыз.

1. Координаталық көрініс (x-көрініс)

Импульсті оператор ретінде қарастырып, x-ті сан деп алайық:

$$\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (9.3)$$

шамасы (9.2)-теңдікпен $\Psi(x)$ - толқындық функциясына есер еткен жағдайда \hat{P}_x операторының меншікті мені болып табылады:

$$(\hat{P}_x \hat{X} - \hat{X} \hat{P}_x) \Psi(x) = \frac{\hbar}{i} \Psi(x) \quad (9.4)$$

(9.3)-ші қатынасты (9.1)-ші қатынасқа қойсақ гамильтониан мынадай түрде жазылады:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m_0 w^2}{2} X^2 \quad (9.5)$$

Бір өлшемді гармоникалық осциллятор үшін Шредингер теңдеуінен (x-көріністе)

$$\left(E - Ax^2 + B \frac{d^3}{dx^2} \right) \Psi(x) = 0 \quad (9.6)$$

$$\text{Мұнда, } A = \frac{m_0 w^2}{2}, B = \frac{\hbar^2}{2m_0}, x_0 = \frac{\sqrt[4]{B}}{A} = \frac{\sqrt{\hbar}}{m_0 w} \quad (9.7)$$

энергияның меншікті мәндерін табамыз:

$$E_n = \hbar w \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (9.8)$$

мұндағы: $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Ал меншікті функциялар мынадай қатынаспен анықталады:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{2_n \cdot n! \sqrt{\pi' x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2} \quad (9.9)$$

және олар нормалау шартын қанағаттандырады:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad (9.10)$$

Кванттық теорияның негізгі қағидалары бойынша тежірибеде бақыланатын шамалар операторлардың орташа мәндері больш табылады, ал толқындық функцияның өзі көмекші роль атқарады. Гармоникалық осциллятор теориясында маңызды шамалардың бірі координаталардың матрицалық элементтері:

$$x_{n'n} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \hat{x} \Psi_n dx \quad (9.11)$$

ал импульс үшін:

$$P_{n'n} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi_n dx \quad (9.12)$$

Соңғы интегралды шешу үшін гармоникалық осциллятордың толқындық функциялары мен ертүрлі мәндерінің арасындағы қатынастарды аламыз:

$$x \cdot \Psi_n = x_0 \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1} \right) \quad (9.13)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\Psi_n}{dx} = -im_0 w x_0 \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \Psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \Psi_{n+1} \right) \quad (9.14)$$

толқындық функциялардың ортонормалау шартын ескере отырып,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_n dx = \delta_{n'n}$$

координатаның матрицалық элементтері үшін 0-ден өзгеше болатын төмендегідей мәндерді табамыз:

$$x_{n-1,n} = \sqrt{\frac{n}{2}}, x_{n+1,n} = x_0 \sqrt{\frac{n+1}{2}} \quad (9.15)$$

және импульс үшін

$$P_{n-1,n} = -im_0 w x_{n-1,n}, P_{n+1,n} = -im_0 w x_{n+1,n} \quad (9.16)$$

§ 2. Импульстік көрініс (P—көрініс)

$\hat{P}_x \hat{X} - \hat{X} \hat{P}_x = \frac{\hbar}{i}$ қатынасында импульсті жей сан деп қабылдап, ал координатаны оператор деп алайық:

$$\hat{X} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dP} \quad (9.17)$$

Бұл оператордың енді импульске тәуелді толқындық функцияға есері нәтижесінде мына теңдеу орындалуы керек:

$$(\hat{P}_x \hat{X} - \hat{X} \hat{P}_x) \varphi(P) = \frac{\hbar}{i} \varphi(P) \quad (9.18)$$

Гармоналық осциллятор теориясын импульстік көріністе тағайындайық:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2}{2} X^2$$

теңдеуіне (9.17)-ден x – тің операторлық мәнін қойсақ мынадай қатынас аламыз:

$$\left(E - A_1 P^2 + B_1 \frac{d}{dP^2} \right) \varphi(P) = 0 \quad (9.19)$$

мұнда
$$A_1 = \frac{1}{2m_0}, \quad B_1 = \frac{m_0 \omega^2 \hbar^2}{2} \quad (9.20)$$

Бұдан гармоналық осциллятор үшін x -көріністен p -көрініске ауысқан кезде толқындық теңдеуге басқа белгілеулер енгізілетіндігін көреміз:

$$\lambda_1 = \frac{E}{\sqrt{A_1 \cdot B_1}} = \frac{2E}{\hbar \omega}$$

Сонда негізгі теңдеу мынадай түрде жазылады:

$$\varphi'' + (\lambda_1 - \eta^2) \varphi = 0 \quad (9.21)$$

Бұл теңдеуді шешу нәтижесінде p – көріністегі энергияның меншікті мендері мен меншікті функцияларын анықтаймыз:

$$E_n = \frac{\lambda_1 \hbar \omega}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (9.22)$$

$$\varphi_n(P) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n \cdot n! \sqrt{\pi P_0}}} e^{\frac{1}{2} \left(\frac{P}{P_0} \right)^2} \cdot H_n \left(\frac{P}{P_0} \right) \quad (9.23)$$

толқындық функция $\varphi(P)$ ортонормалау шартын қанағаттандыруы керек:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dP \cdot \varphi_{n'}^*(P) \varphi_n(P) = \delta_{n'n} \quad (9.24)$$

Бұл жағдайда $\varphi(P) = \Psi(x)$ толқындық функциясының Фурье-бейнесі болып табылады:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(P) e^{\frac{i}{\hbar} P x} dP \quad (9.25)$$

$$\varphi(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} P x} dx \quad (9.26)$$

Егер мынадай қатынасты ескерсек

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dP e^{-i\frac{P}{\hbar}(x-x')} = \delta(x-x')$$

толқындық функция:

$$\Psi(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx' \Psi(x') \int dP e^{-i\frac{P}{\hbar}(x-x')} \quad (9.27)$$

Фурье түрлендіруді пайдаланып, және:

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \sqrt{\pi x_0}}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \cdot H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

екендігін ескерсек, импульстік толқындық функция:

$$\begin{aligned} \varphi_n(P) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \sqrt{\pi x_0}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} \cdot e^{-i\frac{Px}{\hbar}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \sqrt{\pi x_0}}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \cdot e^{-i\frac{Px_0}{\hbar}\xi} H_n(\xi) \end{aligned} \quad (9.28)$$

$\varphi(p)$ – толқындық функцияны импульстер кеңістігінде анықтағаннан кейін координаталар мен импульстер үшін матрицалық элементтерді төмендегідей өрнектер бойынша табамыз:

$$x_{n'n} = \int \Psi_{n'}^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dP} \right) \varphi_n dP \quad (9.29)$$

$$P_{n'n} = \int \varphi_{n'}^* \hat{P} \varphi_n dP \quad (9.30)$$

§ 3. Матрицалық көрініс

(9.2)-ші қатынасты импульс P мен X – координатаны матрицалар түрінде жазу арқылы да қарастыруға болады:

$$\left(\hat{P}_x \hat{X} \right) - \left(\hat{X} \hat{P}_x \right) = \frac{\hbar}{i} I \quad (9.31)$$

мұндағы: I – бірлік матрица. Гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{(\hat{P}_x)^2}{2m_0} + \frac{m_0 \omega^2}{2} (\hat{X})^2 \quad (9.32)$$

Бұл жағдайда (9.17) және (9.18)-ші қатынастардағы матрицалық элементтер мынадай үзіліссіз диагональды матрицалар құрайды:

$$(x) = \begin{pmatrix} x_{00} & x_{01} & x_{02} & \dots \\ x_{10} & x_{11} & x_{12} & \dots \\ x_{20} & x_{21} & x_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = x = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1/2} & 0 & \sqrt{2/2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2/2} & 0 & \sqrt{3/2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (9.33)$$

$$(P) = \begin{pmatrix} P_{00} & P_{01} & P_{02} & \dots \\ P_{10} & P_{11} & P_{12} & \dots \\ P_{20} & P_{21} & P_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = m_0 \omega x_0 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{1/2} & 0 & 0 & \dots \\ i\sqrt{1/2} & 0 & -i\sqrt{2/2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2/2} & 0 & -i\sqrt{3/2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (9.34)$$

Бұл матрицалар $P_{n'n} = P_{n'n}^*$ қатынасы орындалатын эрмиттік матрицалар болып табылады.

Екі матрицаның көбейтіндісі сәйкес жолдың бағанаға көбейтіндісінің қосындысына тең болатындығын ескерсек:

$$(PX)_{n'n} = \sum_{k=0}^{\infty} P_{n'k} X_{k'n} \quad (9.35)$$

(9.33) және (9.34)-ші өрнектердің көмегімен (9.31)-ші қатынас былай жазылады:

$$(PX)_{n'n} - (XP)_{n'n} = \sum_k (P_{n'k} X_{kn} - X_{k'n} X_{kn}) = \frac{\hbar}{i} \delta_{nn'} \quad (9.36)$$

Бұл теңдіктің оң жағы $\frac{\hbar}{i}$ -ге көбейтілген бірлік матрица. Сондықтан кванттық теорияның негізгі қатынасы (9.32)-ші өрнек матрицалық көріністе дұрыс жазылған болады. Енді гамильтонианның матрицалық элементтерін жазалық, (9.33)-ші және (9.34)-ші қатынастардан:

$$H_{n'n} = \sum_k \left(\frac{1}{2m} P_{n'k} P_{kn} - \frac{m_0 \omega^2}{2} X_{n'k} X_{kn} \right) = \frac{\hbar}{i} \delta_{nn'} \quad (9.37)$$

Бұл теңдікке координата мен импульстің матрицалық элементтерінің мендерін қойсақ. Бұдан (H) гамильтонианның диагональды матрица екендігі шығады:

$$(\hat{H}) = \hbar \omega \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (9.38)$$

Егер қарастырылатын шама диагональды матрица құраса, онда ол Шредингер толқындық теңдеуінің тілінде бұл оператордың меншікті мендерінің, матрицаның диагональды элементтерімен анықталатындығын көрсетеді. Сонымен, гармоникалық осциллятор теориясын қарастыру салдарында бұл үш көріністің де координата мен импульстің матрицалық элементтері үшін бірдей нәтиже беретіндігін көреміз.

Осы көріністермен қатар, кванттық механикада тағы басқа да көріністер қатары қарастырылады. Олар: Шредингер көрінісі, Гейзенберг көрінісі, өзара әсер көрінісі.

10 ТАРАУ. ОРТАЛЫҚ СИММЕТРИЯЛЫ КҮШ ӨРІСІНДЕГІ БӨЛШЕК ҚОЗҒАЛЫСЫНЫҢ ЖАЛПЫ ТЕОРИЯСЫ

§ 1. Сфералық координаттар жүйесіндегі Шредингер теңдеуі

Орталық симметриялы күш өрісіндегі бөлшек қозғалысының негізгі ерекшелігі, мұндай күштердің потенциалы тек қашықтыққа ғана байланысты функция және бұрыштарға теуелді болмайды. Бұл теория ротатордың кванттық теориясының ал,

ротатор екі атомды молекулалар спектрін зерттеудің, сутегі және сутегі теріз дес атомдар теориясының негізінде жатыр.

Орталық симметриялы күш өрісіндегі бөлшек қозғалысын сфералық координаттар жүйесінде қарастырған ыңғайлы. Ол үшін осы координаттар жүйесіндегі стационар Шредингер теңдеуін жазалық:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi(r,\theta,\varphi)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\Psi}{dr} + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Psi}{d\theta} \right) + \\ + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(r)]\Psi(r,\theta,\varphi) = 0 \end{aligned} \quad (10.1)$$

Бұл теңдеуге мынадай белгілеулер енгіземіз:

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right), \quad k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} [E - U(r)] \quad (10.2)$$

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 = \frac{1}{\sin\theta r} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{d}{d\varphi^2} \quad (10.3)$$

Сонда сфералық координаттар жүйесіндегі Шредингер теңдеуі мынадай түрге келеді:

$$\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta,\varphi}^2 \right) \Psi(r,\theta,\varphi) + k^2 \Psi(r,\theta,\varphi) = 0 \quad (10.4)$$

(10.4)-ші теңдеудің шешуін екі теуелсіз функцияның көбейтіндісі ретінде қарастырамыз:

$$\Psi(x, y, z) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (10.5)$$

Бұл функцияны Шредингер теңдеуіне қойып, бір типтес айнымалылар бойынша жинақтасақ мынадай теңдік аламыз:

$$\frac{r^2 \nabla_r^2 R(r)}{R(r)} + k^2 r^2 = - \frac{\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)} \quad (10.6)$$

(10.6)-шы теңдеудің оң жағында тек бұрыштарға, сол жағында қашықтыққа байланысты шамалар орналасқан. Бұл теңдік орындалуы үшін теңдіктің екі жағында r – ге де, θ мен φ – ге де теуелсіз A параметріне теңестіруге болады. Сонда:

$$\nabla_r^2 R(r) + \left(k^2 - \frac{A}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (10.7)$$

$$\nabla_{\theta,\varphi}^2 Y(\theta, \varphi) + AY(\theta, \varphi) = 0 \quad (10.8)$$

Енді (10.8)-ші теңдеуде біріне бірі теуелсіз екі бұрыш (θ, φ) болғандықтан, $Y(\theta, \varphi)$ функциясын тағы да екі функцияның көбейтіндісі ретінде қарастырамыз:

$$Y(\theta, \varphi) = \rho(\theta)\Phi(\varphi) \quad (10.9)$$

және бөлу параметрі ретінде m^2 шамасын алсақ, (10.8)-ші теңдеудің орнына мынадай екі теңдеу алынады:

$$\nabla_{\theta}^2 \rho(\theta) + \left(A - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right) \rho(\theta) = 0 \quad (10.10)$$

$$\nabla_{\varphi}^2 \Phi(\varphi) + m^2 \Phi(\varphi) = 0 \quad (10.11)$$

Бұл теңдеулерде мынадай белгілеулер енгізілген

$$\nabla_{\theta}^2 = \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) \quad (10.12)$$

$$\nabla_{\varphi}^2 = \frac{d^2}{d\varphi^2} \quad (10.13)$$

Сонымен, энергияның меншікті мендері E_i мен меншікті функцияларын Ψ_i анықтау үшін (10.7), (10.10) және (10.11)-ші үш теңдеу алдық. Мұнда (10.11)-ші теңдеу бір белгісіз параметрден (m^2), ал (10.7) және (10.10)-шы теңдеулер екі белгісіз параметрлерден (A, m^2 немесе A, k^2) тұрады. $R(r), \rho(\theta), \Phi(\varphi)$ функциялары толқындық функцияны нормалау шартын қанағаттандыруы қажет:

$$\int \Psi^* \Psi d^3x = \int_0^{\infty} r^2 R^*(r) R(r) dr \int_0^{\pi} \rho^*(\theta) \rho(\theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi) \Phi(\varphi) d\varphi = 1 \quad (10.14)$$

Бұл қатынастан нормалау шартының ер функция үшін жеке орындалуы қажет екендігін көреміз:

$$\int_0^{\infty} r^2 R^*(r) R(r) dr = 1 \quad (10.15)$$

$$\int_0^{\pi} \rho^*(\theta) \rho(\theta) \sin \theta d\theta = 1 \quad (10.16)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi) \Phi(\varphi) d\varphi = 1 \quad (10.17)$$

§2. Толқындық, функцияның бұрыштық бөлігі үшін Шредингер теңдеуін шешу

Құрамында тек бір ғана белгісіз параметр болғандықтан, алдымен (10.11)-ші теңдеуден бастап шешелік. Бұл теңдеудің шешуі

$$\Phi(\varphi) = C_m e^{im\varphi} \quad (10.18)$$

түрінде ізделеді. Мұндағы m -оң және теріс мәндерге ие бола алады. Толқындық функцияның бір мәнді болуы керектігінен, $\Phi(\varphi)$ функциясына мерзімділік шарт қоямыз:

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \quad (10.19)$$

Бұл шарттан $e^{2\pi im} = 1$

Эйлер формуласын пайдалансақ,

$$e^{2\pi im} = \cos 2\pi m + i \sin 2\pi m = 1$$

бұдан m - параметрінің меншікті мәндерін аламыз:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (10.20)$$

Параметр m -магниттік кванттық сан деп аталады. C_m коэффициентінің мәнін табу үшін (8.17)-ші $\Phi(\varphi)$ функциясын нормалау шартын пайдаланамыз.

$$\int_0^{2\pi} C_m^* e^{-im\varphi} C_m e^{im\varphi} d\varphi = 1$$

Бұл шарттан C_m коэффициенті

$$C_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (10.21)$$

m параметрінің меншікті мендері анықталғаннан кейін толқындық функцияның сфералық бұрышқа байланысты бөлігі (10.10)-шы теңдеуді шешуге кірісе аламыз. Бұл теңдеуге жаңа айнымалы енгіземіз

$$x = \cos \theta \quad (10.22)$$

Сонда

$$\sin^2 \theta = 1 - x^2, \frac{dx}{d\theta} = -\sin \theta, \frac{d}{d\theta} = -\sin \theta \frac{d}{dx} \quad (10.23)$$

(10.22) және (10.23)-ші теңдеулердің негізінде (10.10)-шы теңдеу мынадай түрде жазылады:

$$\left[(1-x)^2 \rho(x) \right]' + \left(A - \frac{m^2}{1-x} \right) \rho(x) = 0 \quad (10.24)$$

Соңғы теңдеуде $x = \pm 1$ мені айрықша нүктелер болып табылады, яғни $\rho(x)$ функциясының алдындағы коэффициенттердің бірі шексіздікке ұмтылады. Мұндай таралудан арылу үшін (10.24)-ші теңдеудің шешуін мынадай түрде іздестіреміз:

$$U(x) = (1-x^2)^{s/2} \rho(x) \quad (10.25)$$

(10.25)-ші шешуді (10.24)-ші теңдеуге қойып теңдеуді $(1-x^2)^{s/2}$ шамасына қысқартсақ мынадай теңдеу аламыз:

$$(1-x^2)U(x) - 2x(s+1)U(x) + \left(A - s^2 - s + \frac{s^2 - m^2}{1-x} \right) U(x) = 0 \quad (10.26)$$

Бұл теңдеудің соңғы мүшесіндегі ерекшеліктен құтылу үшін

$$s = \pm m \quad (10.27)$$

деп алсақ жеткілікті.

Негізгі теңдеу тек m^2 -қа ғана байланысты болғандықтан, (10.26)-ші теңдеудің шешімі s -тің екі менін де қанағаттандыратындықтан, бұл екі шешімнің арасында сызықтық теуелділік болуы қажет.

$$\rho(m) = A\rho(-m) \quad (10.28)$$

Сондықтан (10.26)-шы теңдеудің шешуін

$$s = m \geq 0 \quad (10.29)$$

болған жағдайда қарастырамыз.

(10.29)-шы қатынастың негізінде (10.26)-шы теңдеу мынадай түрге келеді:

$$(1-x^2)U''(x) - 2x(m+1)U'(x) + [A - m(m-1)]U(x) = 0 \quad (10.30)$$

Соңғы теңдеуде айрықша нүктелер жоқ болғандықтан, оның шешуін полином түрінде іздестіреміз:

$$U(x) = \sum_{k=1} a_k x^k \quad (10.31)$$

Бұл полиномды (10.30)-шы теңдеуге қоюдың

$$\sum_{k=1} \left\{ k(k-1)a_k x^{k-2} + a_k [A - (k+m)(k+m+1)] x^k \right\} = 0 \quad (10.32)$$

және x -тың дәрежелері бірдей мүшелерін жинақтау нәтижесінде, мынадай қатынасқа келеміз:

$$\sum_{k=1} \left\{ (k+2)(k+1)a_{k+2} + [A - (k+m)(k+m+1)]a_k \right\} x^k = 0$$

бұдан рекуренттік қатынас

$$a_{k+2} = \frac{A - (k+m)(k+m+1)}{(k+2)(k+1)} a_k \quad (10.33)$$

(10.31)-ші қатардың барлық коэффициенттерінің арасындағы байланысты тағайындайды. (10.31)-ші қатардың дәрежесінің максимум мені $k = q$ менімен шектеліп,

$$a_{q+2} = 0, \quad a_q \neq 0$$

шарт орындалса, A параметрінің мәні

$$A = (q+m)(q+m+1) \quad (10.34)$$

болады. Мұнда, $q = 0, 1, 2, 3, \dots$

Орбиталық кванттық сан ұғымын енгізсек

$$\ell = q + m \quad (10.35)$$

бұл кванттық санның q және m кванттық сандар сияқты мәндерге ие болатындығын, бірақ тек оң мәндер алатындығын көреміз:

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (10.36)$$

Сонымен қатар (10.35)-ші қатынастың негізінде

$$\ell \geq m \quad (10.37)$$

(10.34)-ші және (10.35)-ші өрнектердің негізінде

$$A = \ell(\ell + 1) \quad (10.38)$$

Енді (10.30)-шы теңдеу мынадай түрге келеді:

$$(1-x)^2 U(x) - 2x(m+1)U(x) + [\ell(\ell+1) - m(m+1)]U(x) = 0 \quad (10.39)$$

мұнда

$$U(x) = a_{\ell-m} x^{\ell-m} + a_{\ell-m-2} x^{\ell-m-2} + \dots + \begin{cases} a_0 \\ a_1 x \end{cases} \quad (10.40)$$

функциясын жинақталған күйде жазалық. Ол үшін

$$(1-x^2)v' + 2x\ell v = 0 \quad (10.41)$$

теңдеуін қанағаттандыратын

$$v = (x^2 - 1)^\ell \quad (10.42)$$

функциясын енгізейік. Лейбниц ережесін пайдаланып (10.41)-ші теңдеуді $(\ell + m + 1)$ рет дифференциалдап, мынадай белгілеу енгізсек:

$$v^{(\ell+m)} = \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^\ell = U_1(x) \quad (10.43)$$

онда $U_1(x)$ функциясы үшін келесі теңдеу аламыз:

$$(1-x^2)U_1''(x) - 2x(m+1)U_1'(x) + (\ell+m+1)(\ell-m)U_1(x) = 0 \quad (10.44)$$

бұл теңдеу тұрақты шамаға тең делдікпен (10.40)-шы теңдеуге сәйкес келеді. Яғни, $U(x)$ және $U_1(x)$ функцияларының арасында сызықтық теуелділік болады:

$$U(x) = C U_1(x) \quad (10.45)$$

$\rho(\theta)$ функциясы әзірге нормаланбағандықтан C коэффициентінің мәнін $m = 0$ болғанда соңғы (10.45)-ші шешу Лежандр полиномына

$$P(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \left. \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell \right| \quad (10.46)$$

ауысатындай қылып, $\frac{1}{2^\ell \ell!}$ - ге теңестірген дұрыс.

Сонда

$$U(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2 - 1)^\ell \quad (10.47)$$

Бұл теңдеудің және (10.25)-ші теңдеудің негізінде

$$P_\ell^m(x) = C_\ell^m P_\ell^m(x) \quad (10.48)$$

мұнда C_ℓ^m -нормалау $P_\ell^m(x)$ -коэффициенті толықтырылған Лежандр полиномы

$$P_\ell^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} \left[\frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \cdot \ell!} \right] \quad (10.49)$$

(10.49)-шы теңдеу Лежандр полиномының төмендегідей қасиетіне

$$P_\ell^m(x) = (-1)^m \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} \rho_\ell^m(x) \quad (10.50)$$

байланысты m – кванттық санының оң және теріс мәндерін түгел қанағаттандырады. (10.49) және (10.50)-ші қатынастандардың негізінде $|m| > \ell$ болғанда P_ℓ^m нольге тең болғандықтан, m – кванттық саны мынадай мәндерге ие болады:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell \quad (10.51)$$

C_ℓ^m -коэффициент $P_\ell^m(\theta)$ функциясын нормалау шартынан анықталады:

$$\int_0^\pi \rho^*(\theta) \rho(\theta) \sin \theta d\theta = \int_{-1}^1 (\rho_\ell^m)^* \rho_\ell^m(x) dx = 1 \quad (10.52)$$

Бұл теңдеуге (10.48)-ші шешімді қойып, (10.50)-ші өрнекті ескерсек төмендегідей:

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

қатынасқа келеміз. Туындылардың ретін ауыстыру теоремасын пайдаланып:

$$\frac{(-1)^m (\ell+m)!}{(2^\ell \cdot \ell!)^2 (\ell-m)!} |C_\ell^m|^2 \int_{-1}^1 (1-x^2)^\ell \frac{d^{2\ell}}{dx^{2\ell}} (x^2-1)^\ell dx = 1$$

және

$$\frac{d^{2\ell}}{dx^{2\ell}} x^n = \begin{cases} 2\ell! & (n = 2\ell) \\ 0 & (n < 2\ell) \end{cases}$$

теңдігін ескерсек және сонымен қатар төмендегідей интегралды

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

пайдалансақ, C_ℓ^m нормалау коэффициенті үшін мынадай өрнекке келеміз:

$$C_\ell^m = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}} \quad (10.53)$$

Сонда толқындық функцияның θ – сфералық бұрышқа байланысты бөлігі үшін:

$$\rho_\ell^m(\theta) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}} \rho_\ell^m(\cos \theta) \quad (10.54)$$

(10.18), (10.54) теңдеулердің негізінде (10.8)-ші $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ – шар функциясы енді мынадай түрде жазылады:

$$Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \rho_{\ell}^m(\theta) \Phi_m(\varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \rho_{\ell}^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (10.55)$$

Мұндай шар функцияларын ортонормалау шарты:

$$\int (Y_{\ell}^m)^* Y_{\ell'}^{m'} d\Omega = \delta_{\ell\ell'} \cdot \delta_{mm'} \quad (10.56)$$

m және ℓ параметрлерінің меншікті мәндері анықталғаннан кейін толқындық функцияның $R(r)$ радиалдық бөлігі үшін жазылған (10.7)-ші теңдеуді шешуге кірісуге болады. Бірақ бұл теңдеуді шешу үшін $U(r)$ – потенциалдық энергияның түрін білу қажет. Ал потенциалдың түрі дербес жағдайлар үшін ертүрлі болатындықтан, радиалдық бөлік тек жеке жағдайлар үшін ғана шешіледі.

§ 3. Импульс моменті операторының меншікті мәндері мен меншікті функциялары

Орталық симметриялы күш өрісіндегі бөлшек қозғалысын қарастыру нәтижесінде l кванттық санының $\nabla^2_{\theta, \varphi}$ – операторының меншікті мәнін сипаттайтындығын көрдік. Ал, $\nabla^2_{\theta, \varphi}$ – операторы Гамильтон операторының бөлігі болып табылады:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_r^2 - \frac{\hbar^2}{2m_0 r^2} \nabla^2_{\theta, \varphi} + U(r) \quad (10.57)$$

Осы операторды классикалық Гамильтон функциясымен:

$$H = \frac{P_r^2}{2m_0} + \frac{M^2}{2m_0 r^2} + U(r) \quad (10.58)$$

салыстырсақ $(-\hbar^2 \nabla_r^2)$ – операторына P_r^2 – радиалдық импульстің квадратының, $(-\hbar^2 \nabla_{\theta, \varphi}^2)$ – операторына M^2 – импульс моменті векторы квадратының сәйкес келетіндігін көреміз.

Осы сәйкестіктерді толығырақ зерттелік. Классикалық механикада импульс моментінің мынадай өрнекпен сипатталатындығы белгілі:

$$\vec{M} = [\vec{r} \vec{p}] \quad (10.59)$$

(10.59)-ші өрнекті кванттық жағдайға жалпылау үшін бұл теңдіктегі классикалық импульстің орнына оған сәйкес келетін операторды алуымыз қажет:

$$\hat{P} = -i\hbar \nabla \quad (10.60)$$

Сонда (10.59)-дың орнына мынадай қатынас аламыз:

$$\hat{M} = -i\hbar [\vec{r} \vec{\nabla}] \quad (10.61)$$

Бұдан сфералық және декарттық координаттар жүйесіндегі \hat{M} – операторының құраушыларының арасындағы байланыс:

$$\hat{M}_x = -\frac{\hbar}{i} \left\{ \sin\varphi \frac{d}{d\theta} + \cos\varphi \cdot \text{ctg}\theta \frac{d}{d\varphi} \right\} \quad (10.62)$$

$$\hat{M}_y = \frac{\hbar}{i} \left\{ \cos\varphi \frac{d}{d\theta} + \sin\varphi \cdot \text{ctg}\theta \frac{d}{d\varphi} \right\} \quad (10.63)$$

$$\hat{M}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} \quad (10.64)$$

Енді $\Psi(r, \theta, \varphi)$ – толқындық функцияға \hat{M}_y операторымен есер етелік, сонда:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{d\varphi} \Psi(r, \theta, \varphi) &= \frac{\hbar}{i} R(r) \rho(\theta) \frac{d}{d\varphi} \Phi(\varphi) = \\ &= \frac{\hbar}{i} i m R(r) \rho(\theta) \Phi(\varphi) = \hbar m \Psi(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (10.65)$$

Бұдан \hat{M}_y операторының меншікті мені

$$M_z = \hbar m \quad (10.66)$$

екендігін көреміз. Мұндағы

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (10.67)$$

(10.66) және (10.67)-шы қатынастар m – магниттік кванттық санының импульс моменті векторы операторының z осіне проекциясын, яғни кеңістіктік кванттауды сипаттайтындығын көреміз. Енді \hat{M}^2 операторымен толқындық функцияға есер етелік. Сонда

$$\hat{M}^2 \Psi(r, \theta, \varphi) = \hbar^2 A \Psi(r, \theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (10.68)$$

мұндағы

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (10.69)$$

(10.68) және (10.69)-ші теңдеулерден импульс моменті векторының квадратының дискретті мендерге ие болатындығын және l орбиталық кванттық санымен сипатталады деген тұжырымға келеміз.

§ 4. Кванттық және классикалық нәтижелерді салыстыру

Кванттық механикада алынған нәтижелерді талқылау үшін, бұл нәтижелердің классикалық баламасы табылады, немесе нәтижелер жартылай кванттық Бор теориясымен салыстырылады.

Орталық симметриялы күш өрісіндегі бөлшек қозғалысын Бор теориясы тұрғысынан қарастырғанда классикалық импульс моментінің сақталу заңын пайдаланамыз. Бұл заң бойынша қозғалыс бір жазықтықта болып, импульс моментінің векторы осы жазықтыққа перпендикуляр бағытталады:

$$M_B = P_\varphi = \frac{dL}{d\dot{\varphi}} = m_0 r^2 \dot{\varphi} = const \quad (10.70)$$

Бұл қатынасты Планк тұрақтысына кванттасақ, импульс моментінің дискретті мендерге ие болатындығын көреміз:

$$\oint P_\varphi d\varphi = n_\varphi \cdot \hbar \quad \text{бұдан} \quad P_\varphi = n_\varphi \hbar \quad (10.71)$$

Мұндағы

$$n_\varphi = 1, 2, 3, \dots \quad (10.72)$$

немесе

$$M_B^2 = P_\varphi^2 = n_\varphi^2 \cdot \hbar^2 \quad (10.73)$$

Егер z – осі орбита жазықтығына перпендикуляр болмаса, онда Бор теориясы бойынша импульс моменті векторының z – осіне проекциясы

$$(M_B)_z = n_\varphi \cdot \hbar^2 \quad (10.74)$$

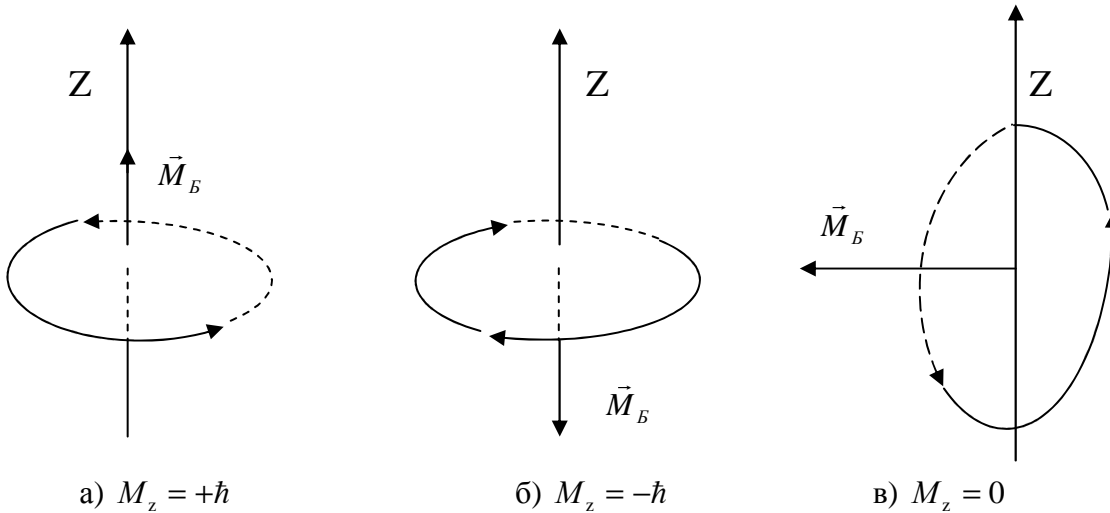
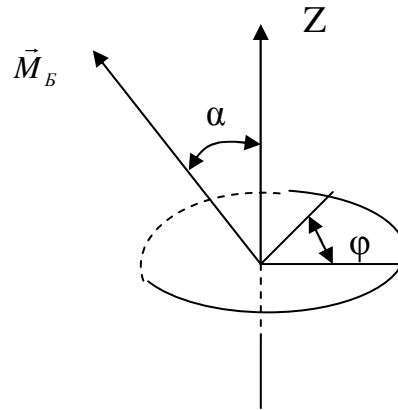
мұнда

$$n_\psi = n_\varphi, -n_\varphi + 1, \dots, 0, \dots, n_\varphi - 1, n_\varphi \quad (10.75)$$

Сондықтан толық импульс моменті \hat{M} мен z – осінің арасындағы бұрышы мынадай қатынаспен анықталады:

$$\cos \alpha = \frac{n_\psi}{n_\varphi} \quad (10.76)$$

яғни, α бұрышы дискретті мәндерге ие болады. Бор теориясы бойынша кеңістіктік квантталу 10.1-суретте көрсетілген.



10.1-сурет. Кеңістіктік квантталу

Бұл суреттен $n_\psi = -n_\varphi$ болғанда \vec{M} векторының z осіне параллель болатындығын көреміз (10.1 сурет, а), ал $n_\psi = n_\varphi$ жағдайына \vec{M} векторының z осіне қарсы бағытталуы сәйкес келеді. Ал, $n_\psi = 0$ вариантында осы екі вектор перпендикуляр болады. Енді осы Бор теориясының негізгі нәтижелерін кванттық теориямен салыстыралық:

Кванттық теория
 $M_{ке^2}^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$

Бор теориясы
 $M_B^2 = n_\varphi^2 \cdot \hbar^2$

$$\begin{array}{ll}
\ell = 0, 1, 2, \dots & n = 1, 2, 3, 4, \dots \\
(M_z)_{\kappa\sigma}^2 = m\hbar & (M_z)_{B^2} = n_{\Psi}\hbar \\
m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell & n_{\Psi} = -n_{\varphi} \dots 0 \dots n_{\varphi-1}, n_{\varphi}
\end{array}$$

Кванттық теория бойынша негізгі күйдегі ($\ell = 0$) атомның импульс моменті нольге тең, ал классикалық теория бойынша бұл шама нольге тең емес. Спектроскопиялық тежірибелік деректер кванттық механиканың нәтижесінің дұрыс екендігін көрсетеді.

Бор теориясы бойынша орбиталық моменттің бағытына z осін алуға болады. Сонда

$$n_{\Psi} = n_{\varphi} \quad \text{бұдан} \quad (M_z)_{B^2}^2 = n_{\varphi}^2 \cdot \hbar^2 = M_M^2 \quad (10.77)$$

ал кванттық теорияда

$$m = 1, \quad \text{болғанда} \quad (M_z)_{\kappa\sigma}^2 = \ell^2 \cdot \hbar^2$$

$$\text{Ал,} \quad (M_z)_{\kappa\sigma}^2 = \ell^2 \cdot \hbar^2 + \hbar^2 \cdot \ell = (M_z)_{\kappa\sigma}^2 + \hbar^2 \cdot \ell \quad (10.78)$$

(10.78)-ші қатынаста $\hbar^2 \cdot \ell$ -қосымша мүшенің пайда болуы $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$ операторларының өзара коммутативті емес екендігінің салдары. Сондықтан, $M_z = M_{z \max} = \hbar \cdot \ell$ болғанда \hat{M}_x және \hat{M}_y компоненттері нольге тең болмайды, керісінше, белгілі бір минимум менге ие болады:

$$M_{\kappa\sigma}^2 = M_{z \max}^2 + (\nabla M_x)_{\min}^2 + (\nabla M_y)_{\min}^2$$

$(\nabla M_x)_{\min}^2$ және $(\nabla M_y)_{\min}^2$ шамаларының минимум мәндері анықталмағандық қатынастан табылады:

$$\begin{aligned}
& (\nabla M_x)_{\min}^2 (\nabla M_y)_{\min}^2 \frac{1}{4} (\hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x) = \\
& = \frac{1}{4} \hbar^2 \hat{M}_{z \max}^2 = \frac{1}{4} \hbar^2 \cdot \hbar^2 \ell^2 = \frac{1}{4} \hbar^4 \ell^2
\end{aligned} \quad (10.79)$$

Бөлшек қозғалысының x және y осьтеріне симметриялығынан, $(\nabla M_x)_{\min}^2 = (\nabla M_y)_{\min}^2$ болады деп қарастыра аламыз. Сонда

$$(\nabla M_x)_{\min}^2 = (\nabla M_y)_{\min}^2 = \hbar^2 \cdot \frac{\ell}{2}$$

$(\nabla M_x)_{\min}^2$ және $(\nabla M_y)_{\min}^2$ мүшелерінің қосындысы (10.78)-ші теңдеудегі $\hbar^2 \cdot \ell$ қосымша мүшені береді.

Сонымен, бұл қосымша мүшенің табиғаты, гармоникалық осциллятордың кванттық теориясындағы нольдік энергия сияқты, анықталмағандық қатынасқа байланысты. ℓ орбиталық кванттық санның мені өте үлкен болғанда (10.78)-ші қатынаста $\hbar^2 \cdot \ell$ мүшесін $\hbar^2 \ell^2$ -ге қарағанда аз шама деп қарастырып, ескермеуге болады. Бұл жағдайда кванттық теорияның нәтижелері жартылай классикалық Бор теориясының нәтижелеріне шектік ауысады.

11 ТАРАУ. РОТАТОРДЫҢ КВАНТТЫҚ ТЕОРИЯСЫ

§ 1. Ротатордың меншікті функциялары

Бұрыштық моменттің квадратының меншікті функцияларын ротатордың, яғни материялық нүктенің сфера бойынша еркін қозғалысының кванттық теориясын құрастыруға қолданалық.

Ротатор теориясының негізгі нәтижелерін екі атомды молекулалардың спектрін зерттеуге пайдалануға болады.

Алдымен, жартылай кванттың Бор теориясындағы ротаторды қарастырайық. Координаттар жүйесінің басын материалдық нүкте қозғалатын радиусы $r = a = const$ сфераның ортасына орналастырайық. Бұл жағдайда потенциалдық энергия тұрақты болады:

$$U(r)U(a) = const \quad (11.1)$$

Потенциалдық энергияны кез келген менінен бастауға болатындықтан:

$$U(a) = 0 \quad (11.2)$$

деп қабылдай аламыз. Сонда ротатордың толық энергиясы оның кинетикалық энергиясына тең болады:

$$E = T = \frac{m_0 a^2 \dot{\varphi}^2}{2} \quad (11.3)$$

Бұдан бұрыштық моментке эквивалентті жалпылама импульс:

$$P_\varphi = \frac{dT}{d\dot{\varphi}} = m_0 a^2 \dot{\varphi} \quad (11.4)$$

Бор теориясы бойынша кванттасак:

$$P_\varphi = n_\varphi \hbar \quad (11.5)$$

Сонда, ротатордың толық энергиясы:

$$E = \frac{n_\varphi^2 \hbar}{2I} \quad (11.6)$$

мұнда $I = m_0 \cdot a^2$ – инерция моменті.

Ротатордың кванттық теориясын құрастыру барысында бұл есептің орталық симметриялы өрістегі бөлшек қозғалысының дербес жағдайы екендігін ескереміз. Сондықтан, $R(r)$ –радиал функцияны анықтау үшін мынадай теңдеуді пайдалана аламыз:

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[\frac{2m_0}{\hbar^2} E - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (11.7)$$

Ротатор үшін $r = a = const$ болғандықтан $\nabla_r^2 R(a) = 0$, демек (11.7) теңдеуден ротатордың энергиясы

$$E_\ell = \frac{\hbar^2 \cdot \ell(\ell+1)}{2m_0 a^2} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2I} \quad (11.8)$$

Бұл өрнекті Бор теориясындағы ротатордың энергиясы (11.6)-мен салыстырсақ, энергия $E_{Бор} \sim n_\varphi^2$, ал кванттық теорияда екендігін көреміз. Бұл айырмашылық \hat{M}_x, \hat{M}_y және \hat{M}_z бұрыштық момент операторларының өзара коммутативті емес екендігіне байланысты және ол кванттық теорияның негізгі ерекшеліктеріне жатады. Кванттық және Бор теорияларының арасындағы сәйкестілікті тек қана ℓ кванттық сандарының

үлкен мөндерінде $\ell^2 \gg 1$ ғана байқауға болады. (11.8)-ші өрнек бойынша ротатордың энергиясы тек ℓ орбиталық кванттық санға теуелді де, \bar{M} бұрыштық моменттің Z осіне проекциясын сипаттайтын m – магниттік кванттық сан бұл өрнекке кірмейді. Бірақ осы E_ℓ энергияның меншікті мөндеріне сәйкес келетін $Y(\theta, \varphi)$ меншікті функциялары m кванттың санына теуелді: m саны $-\ell$ ден $+\ell$ меніне дейін өзгертін болғандықтан, E_ℓ энергиясының ербір мөніне бірінен бірінің айырмашылығы \bar{M} бұрыштық моментінің Z осіне бағытталуына байланысты болатын $(2\ell+1)$ өзара ортогонал меншікті функциялар сәйкес келеді. Бұл жағдайда E_ℓ энергиялық деңгей $(2\ell+1)$ ретті "азған" делінеді.

Ротатордың энергиялық деңгейлерінің азғын болуы физикалық тұрғыдан ротатордың орталық симметриялы жүйе болуының, яғни, координаттар осінің басы арқылы өтетін барлық бағыттардың бірінен бірінің айырмашылығы жоқ болуының салдары. Осы тұрғыдан кез келген орталық – симметриялы жүйелердің барлығында да азған күйлер болуы қажет.

Ал егер де жүйеде белгілі бір бағыт анықталған болса, мысалы, сыртқы магнит өрісінің есері, онда орталық симметрия бұзылады, \bar{M} бұрыштық моменттің барлық моменттері өзара эквивалентті болмайды, яғни азғындық реті азаяды, не мүлдем жойылады.

Спектрлік терминологияда ертүрлі энергиялық деңгейлер – термдер деп аталады. Мысалы, $\ell=0$ меніне сәйкес келетін деңгей s – терм, $\ell=1$ болғанда деңгей p – терм деп аталады. Сол сияқты d – термде $\ell=2$, f – термде $\ell=3$ болады. Ал, біз қарастырып отырған жағдайларда ротатор егер $\ell=0$ болса, s – күйде $\ell=1$ болғанда p – күйде т.с.с. делінеді. Ротатордың s – және p – күйлерін толығырақ қарастыралық. s – күйде $\ell=m=0$ болғандықтан $E_0=0$ меніне сәйкес келетін меншікті функция:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (11.9)$$

бұдан осы күйдің ықтималдылық тығыздығы

$$|Y_0^0|^2 = \frac{1}{4\pi} \quad (11.10)$$

p – күйде $\ell=1$, ал m кванттың саны 0, 1, -1 мөндеріне ие болады.

Сонда энергияның меншікті мөніне: $E_1 = \frac{\hbar^2}{I}$ үш меншікті функция сәйкес келеді:

$$Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \cdot \sin \theta \quad (11.11)$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (11.12)$$

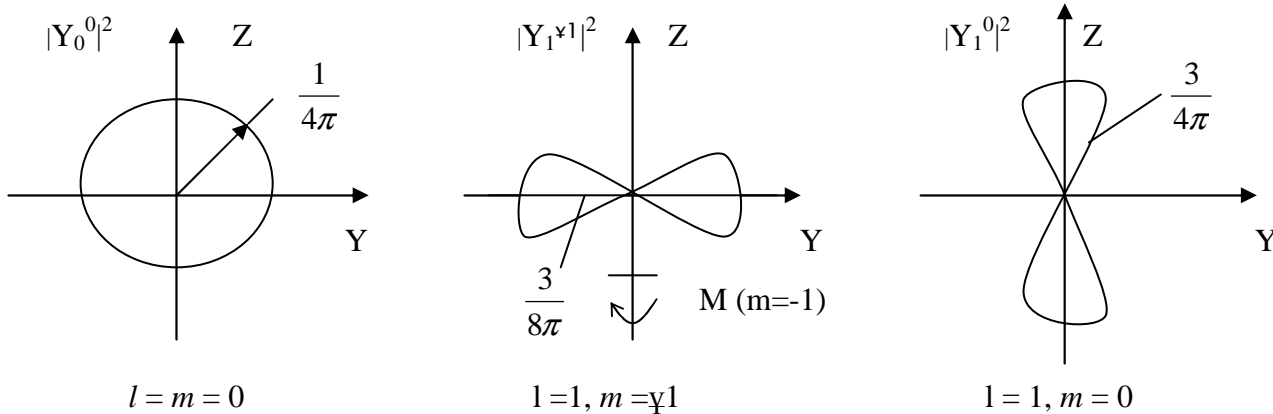
$$Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \cdot \sin \theta \quad (11.13)$$

Ал ықтималдылық тығыздықтары мынадай өрнектермен беріледі:

$$|Y_1^{-1}|^2 = |Y_1^1|^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \quad (11.14)$$

$$|Y_1^0|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta \quad (11.15)$$

Графиктік түрде (11.10, 11.14, 11.15)-ші ықтималдылық тығыздықтарының үлестірілуі 11.1-ші суретте берілген.



11.1 сурет. Ротатордың ықтималдылық тығыздықтарының үлестірілуі

(11.10)-шы өрнектен және 11.1-ші суреттің а) - бөлігінен s -күйдегі ротатордың M бұрыштық моментінің бағыты θ бұрышына тәуелді еместігін көреміз. Бұл түсінікті де, себебі бұл жағдайда момент $M^2 = \hbar^2 l(l+1)$ нольге тең болады. Тыныштық күйдегі материалдық нүкте радиусы a -ға тең сфералық беттің кез келген орнында бола алады. Ротатордың s -күйінің классикалық баламасы жоқ. (11.14)-ші өрнектен және б) суреттен $l=1, m=\pm 1$ тең болатын p -күйдегі ротатордың барлық траекторияларының ішіндегі ең ықтималдысы (xy) жазықтығына орналасады және $m=+1$ мен $m=-1$ мөндерінің арасындағы айырмашылық айналу бағыттарына байланысты болады. Оның ішінде $m=1$ болғанда ротатор оң бағытқа (M бұрыштық моментінің векторы z осіне параллель), ал $m=-1$ жағдайында сол бағытқа (M векторы z осіне антипараллель) айналады. $l=0$ және $m=0$ мөндеріне ротатордың ықтимал орбитасы z осінің бойында жатады. Бұл жағдайда момент z осіне перпендикуляр бағытталады.

§ 2. Сұрыптау ережелері

Кванттық сандардың қандай өзгерістерінде кванттық өтулердің мүмкін болатындығын анықтайтын сұрыптау ережелерін тағайындайтын матрицалық элементтер мынадай түрде жазылады:

$$(r)_{lm}^{l'm'} = \int (Y_l^{m'})^* \hat{r} Y_l^m d\Omega \quad (11.16)$$

Егер кванттық сандардың кейбір өзгерістерінде (11.16)-шы матрицалық элемент нольге тең болса, онда мұндай кванттық өтулер тиым салынған болады (сәуле шығару болмайды). Сұрыптау ережелері белгілі болса сәуле шығарудың жиілігі мен қарқындылығын оңай есептеп шығара аламыз.

x, y және z координаттарының орнына төмендегідей жаңа айнымалылар енгізейік:

$$Z = a \cos \theta \quad (11.17)$$

$$\xi = x + iy = a \sin \theta e^{i\varphi} \quad (11.18)$$

$$\eta = x - iy = a \sin \theta e^{-i\varphi} \quad (11.19)$$

Физикалық түрғыдан мұндай түрлендіру ротатордың қозғалысын үш бөлікке: z осінің бойымен тербелісіне және ξ, η айнымалыларымен сипатталатын, (xy) жазықтығында жататын, оң және теріс бағыттағы айналуларға жіктеуге сәйкес келеді.

Ал, жалпы осы үш айнымалы (z, ξ, η) бірігіп материялық нүктенің сфера бойымен толық қозғалысын сипаттайды.

Жаңа айнымалыларды пайдаланғанда сұрыптау ережелерін анықтау үшін мынадай матрицаларды есептеу қажет болады:

$$(Z)_{lm}^{l'm'} = \int (Y_{l'}^{m'})^* \cos \theta Y_l^m d\Omega \quad (11.20)$$

$$(\xi)_{lm}^{l'm'} = \int (Y_{l'}^{m'})^* \sin \theta e^{i\varphi} Y_l^m d\Omega \quad (11.21)$$

$$(\eta)_{lm}^{l'm'} = \int (Y_{l'}^{m'})^* \sin \theta e^{-i\varphi} Y_l^m d\Omega \quad (11.22)$$

Бұл қатынастарды біз $a = 1$ деп алдық.

$Y(\theta, \varphi)$ шарлық функциялардың арасындағы рекурренттік қатынасты пайдалансақ:

$$\cos \theta Y_l^m = A Y_{l+1}^m + B Y_{l-1}^m \quad (11.23)$$

$$\sin \theta e^{\pm i\varphi} Y_l^m = A_{\pm} Y_{l+1}^{m\pm 1} + B_{\pm} Y_{l-1}^{m\pm 1} \quad (11.24)$$

мұндағы A және B коэффициенттерін анықтау үшін Лежандр полиномын

$$P_l^m = \frac{(2l)!}{2^l \cdot l! (l-m)!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \left\{ x^{\ell-m} - \frac{(\ell-m)(\ell-m-1)}{2 \cdot \ell(2\ell-1)} x^{\ell-m-2} + \dots \right\}$$

(11.23)-ші қатынасқа қойып, теңдіктің екі жағында $e^{im\varphi} (1-x)^{\frac{m}{2}}$ ге қысқартсақ A және B үшін мынадай мәндер аламыз:

$$A(\ell, m) = \sqrt{\frac{(\ell+1-m)(\ell+1+m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}, \quad B(\ell, m) = \sqrt{\frac{(\ell+m)(\ell-m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}}, \quad (11.25)$$

Осы сияқты

$$A_{\pm}(\ell, m) = \pm \sqrt{\frac{(\ell+1 \pm m)(\ell+1 \pm m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}, \quad B_{\pm}(\ell, m) = \pm \sqrt{\frac{(\ell \pm m)(\ell-1 \pm m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}}, \quad (11.26)$$

Шар функцияларының ортонормалық шарты

$$(Z)_{lm}^{\ell m'} = \text{const} \cdot \delta_{m',m} \cdot \delta_{\ell',\ell \pm 1} \quad (11.27)$$

$$(\xi)_{lm}^{\ell m'} = \text{const} \cdot \delta_{m',m \pm 1} \cdot \delta_{\ell',\ell \pm 1} \quad (11.28)$$

$$(\eta)_{lm}^{\ell m'} = \text{const} \cdot \delta_{m',m-1} \cdot \delta_{\ell',\ell \pm 1} \quad (11.29)$$

Бұл өрнектерден ротатордың сұрыптау ережелерін аламыз:

а) z осінің бойымен тербелмелі қозғалыс үшін

$$\nabla m = m' - m = 0, \nabla \ell = 0$$

$$\nabla \ell = \ell' - \ell = \pm 1 \quad (11.30)$$

б) оң бағыттағы айналмалы қозғалыс үшін

$$\nabla m = -1, \nabla \ell = \pm 1 \quad (11.31)$$

в) сол бағыттағы айналмалы қозғалыс жағдайында

$$\nabla m = +1, \nabla \ell = \pm 1 \quad (11.32)$$

Сонымен рұқсат етілген кванттық өтулер үшін ℓ және m кванттық сандардың өзгерісі:

$$\nabla m = 0, \pm 1 \quad (11.33)$$

$$\nabla \ell = \pm 1 \quad (11.34)$$

болуы қажет.

Сұрыптау ережелері тағайындалғаннан кейін ротатордың сеуле шығару жиіліктерін де анықтау жеңілге түседі:

$$w_{\ell, \ell'} = 2\pi\nu_{\ell\ell'} = \frac{E_{\ell} - E_{\ell'}}{\hbar} \quad (11.35)$$

Мұндағы E_{ℓ} энергияның орнына (11.8)-ші менді ескеліп қойсақ (11.35)-ші өрнек мынадай түрге келеді:

$$w_{\ell, \ell'} = \frac{\hbar}{2I} [\ell(\ell+1) - \ell'(\ell'+1)] \quad (11.36)$$

Ал (11.32), (11.33)-ші сұрыптау ережелерінің негізінде

$$w_{\ell, \ell-1} = \frac{\hbar}{I} \ell \quad (11.37)$$

$$w_{\ell, \ell+1} = -\frac{\hbar}{I} (\ell+1) \quad (11.38)$$

және мұндағы $w_{\ell, \ell-1}$ жиілік жоғарғы энергиялық деңгейден төменгі деңгейге ауысуға, ал $w_{\ell, \ell+1}$ – керісінше, төмендеген жоғарғы деңгейге өтуге сәйкес келеді.

§ 3. Екі атомды молекулалар спектрлері

Спектрлердің үш түрі болатындығы белгілі: қызған денелер бөліп шығаратын үзіліссіз спектр (мысалы, спектрлік үлестірілуі Планк өрнегімен сипатталатын абсолют қара дененің сеуле шығару), атомдағы электродтардың бір энергиялық күйден басқа күйлерге ауысқанда бөліп шығаратын сызықтық спектрлер (мысалы сутегі атомындағы Бальмер сериясы) және молекулалардың жолақ спектрлері. Жолақ спектрлердің молекулалардың айналмалы қозғалысының нәтижесінде пайда болатындығын көрсетейік.

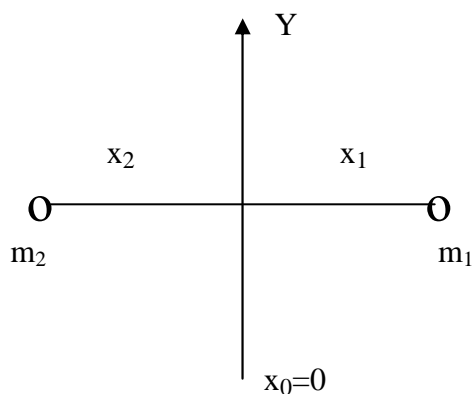
Бірінен бірі тұрақты r қашықтыққа орналасқан массалары m_1 және m_2 атомдардан тұратын молекуланы қарастырайық. Жуықтап алғанда мұндай молекуланың мысалы ретінде екі атомды HCl молекуласын қарастыруға болады.

Бөлшектердің саны екіден көп болған жағдайда олардың ауырлық орталығының массасы барлық бөлшектердің массаларының қосындысына:

$$m_{\text{сум}} = \sum m_i \quad (11.39)$$

тең бір бөлшек түрінде қозғалады. Ал атомдардың салыстырмалы қозғалысы келтірілген масса деп

$$\frac{1}{m_{\text{келг}}} \sum \frac{1}{m_i} \quad (11.40)$$



аталатын шамамен сипатталады.

11.2-сурет.

Екі атомды молекуланың схемасы

Егер молекуланың ауырлық орталығы тыныштық күйде болса, ($x_{a.k_1} = 0$) онда бірінші және екінші бөлшектердің координаталары x_1 мен x_2 салыстырмалы координата x – пен мынадай қатынастар арқылы байланыстырылады:

$$x_1 = \frac{m_2 x}{m_1 + m_2}, \quad x_2 = -\frac{m_1 x}{m_1 + m_2},$$

Бұдан екі атомды молекуланың инерция моменті

$$I = m_1 x_1^2 + m_2 x_2^2 = m_{\text{келг}} \cdot x^2 \quad (11.41)$$

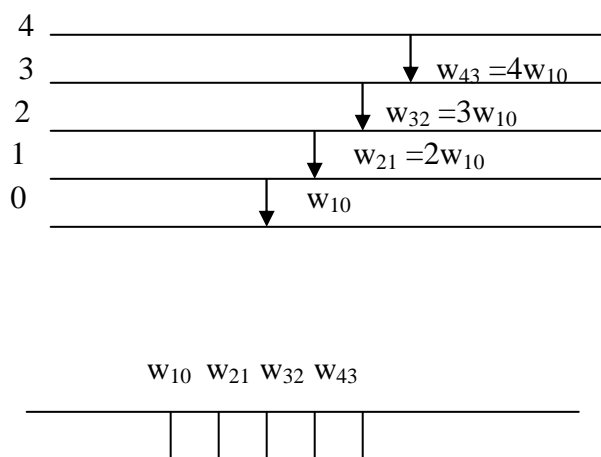
(11.41)-ші өрнек бір материялық нүктенің инерция моментімен сәйкес келеді. Мұнда бөлшектің массасының орнына келтірілген масса, ал координатының орнына салыстырмалы координата алынған. Сондықтан алға қарай ротатордың инерция моментінің орнына (11.41)-ші өрнекті $x = a$ тең деп алып, пайдалануға болады.

Егер сеуле шығару тек ротаторлық өтулерге байланысты болса, (11.37)-ші қатынас бойынша, жиілік

$$w_{\ell, \ell-1} = 2B\ell \quad (11.42)$$

мұнда

$$B = \frac{\hbar}{2I} = \frac{\hbar}{2m_{\text{келг}} \cdot a^2} \quad (11.43)$$



11.3 сурет. Ротатордың спектрі

Бұл өрнектерден екі атомды молекуланың ротаторлық спектрлері бірімен бірі бірдей қашықта орналасқан сызықтардың жиіні екендігін көреміз. Ротаторлық спектрлер қашық инфрақызыл облысқа орналасқандықтан (толқын ұзындықтары шамамен 100-300 мкм), оларды зерттеу біршама қиындыққа түседі.

Мысалы, HCl молекуласында мұндай сызықтар жұтылу спектрлері түрінде бақылған. Сызықтардың ара қашықтықтарын зерттеу арқылы молекуланың инерция моментінің шамасын бағалауға болады.

Ротаторлық спектрмен қатар молекуланың ішкі тербелістеріне байланысты туатын вибрациялы – ротаторлық спектрлерді де зерттеуге болады. Бұл спектрлер инфрақызыл облыстан жақындау орналасқан, сондықтан оларды зерттеу ротаторлық спектрлерге қарағанда жеңілірек.

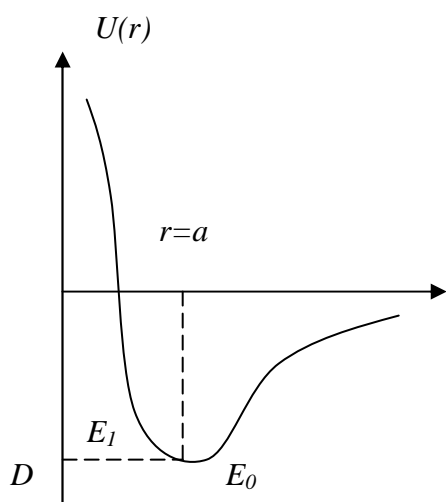
Атомдардың арақашықтығы тұрақты болмаған жағдайдағы екі атомды молекула теориясын жалпылама түрде қарастырайық. Бұл жағдайда молекуланы осцилятордағы ротатор ретінде қарастыруға болады.

Алдымен, $U(r)$ – потенциалық энергия қисығының графигінің қандай болатындығын тағайындайық. Біріншіден, атомдар біріне бірі шексіз жақын орналаса

алмайтындықтан, $U(r \rightarrow 0) \rightarrow \infty$ деп алайық. Екіншіден, $r \rightarrow \infty$ болғанда атомдардың еерлесуі шексіз аздығына байланысты, $U(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ деп қабылдаймыз. Сонымен қатар, молекула орнықты жүйе болғандықтан атомдардың арақашықты белгілі бір шамаға ($r = a$) тең болғанда потенциалдық энергия $U(r)$ теріс шамаға ие болады және өзінің ең аз менін алады. Молекуладағы атомдардың потенциалдық энергиясының атомдардың арақашықтығына теуелділігі 11.4-ші суретте келтірілген.

Егер молекуланың тепе-тендік қалыптан ауытқуы $x = (r - a)$ – көп үлкен болмаса, ($x \ll a$) $U(r)$ потенциалдық энергияны $x = a$ нүктесінің төңірегінде қатарға жіктеуге болады:

$$U(r) = U(a + x) = U(a) + xU'(a) + \frac{x^2}{2}U''(a) + \dots \quad (11.44)$$



11.4-ші сурет. Екі атомды Молекуланың потенциалдық энергиясының ара қашықтыққа теуелділігі.

Қатардың алғашқы үш мүшесімен шектеліп, $r = a$ нүктесінде $U(r)$ минимум менге тең болатындығын, яғни $U'(a) = 0$ екендігін және

$U''(a) > 0$ болатынын ескерсек, (11.44)-ші өрнек мынадай түрге келеді:

$$U(r) = -D + \frac{m_{\text{келг}} \cdot \omega^2 x^2}{2} \quad (11.45)$$

Мұндағы $U''(a) = m_{\text{келг}} \cdot \omega^2$ және $U(a) = -D$ – молекуланың серпімділік коэффициенті мен диссоция энергиясы.

Қарастырылып отырған жағдай үшін потенциалдық энергия сфералық симметриялы болғандықтан молекуланың энергиялық деңгейлерін анықтау үшін толқындық функцияның радиалдық бөлігі үшін жазылған Шредингер теңдеуін аламыз.

Біздер үшін атомдардың тек салыстырмалы қозғалысын қарастыру жеткілікті болғандықтан (11.7)-ші теңдеудегі масса m -нің орнына келтірілген масса $m_{\text{келг}}$ алсақ, бұл өрнек мынадай түрге келеді

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[\frac{2m_{\text{келг}}}{\hbar^2} (E - U(r)) - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (11.46)$$

Егер

$$\nabla_r^2 R(r) = \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} R(r) \quad (11.47)$$

екендігін ескеріп, жаңа функция

$$U(r) = r \cdot R(r) \quad (11.48)$$

енгізсек (11.46)-ның орнына мынадай жаңа теңдеу аламыз:

$$\frac{d^2U}{dr^2} + \frac{2m_{\text{келз}}}{\hbar^2} \left\{ E + D - m_{\text{келз}} \frac{w^2 x^2}{2} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_{\text{келз}} \cdot r^2} \right\} U(r) = 0 \quad (11.49)$$

$x \ll a$ болғандықтан бұл теңдеуде $\frac{1}{r^2} = \frac{1}{(a+x)^2} \cong \frac{1}{a^2}$ деп қабылдап төмендегідей белгілеулер енгізсек

$$E + D - B\hbar\ell(\ell+1) = E' \quad (11.50)$$

мұнда

$$B = \frac{\hbar}{2I}, \quad \text{ал} \quad I = m_{\text{келз}} \cdot a^2 \quad (11.51)$$

сонда (11.49)-ші теңдеу мынадай түрге келеді

$$U''(r) + \frac{2m_{\text{келз}}}{\hbar^2} \left(E' - m_{\text{келз}} \frac{w^2 x^2}{2} \right) U(r) = 0 \quad (11.52)$$

бұл теңдеу (7.12)-ші гармоникалық осциллятор теңдеуімен сәйкес келеді, сондықтан

$$E' = \hbar w \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.53)$$

мұндағы $n = 0, 1, 2, \dots$

Сонымен, молекуланың ротаторлық және тербелмелі қозғалыстарын ескерген жағдайдағы энергиясы

$$E = -D + B\hbar\ell(\ell+1) + \hbar w \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (11.54)$$

мұнда бірінші мүше диссоция энергиясы, ал екінші және үшінші мүшелер молекуланың тербелмелі қозғалысына байланысты энергиялар.

Молекулалар үшін дискретті энергиялық деңгейлердің саны шектелген болады. Себебі, мынадай шарт $B\hbar\ell(\ell+1) + \hbar w \left(n + \frac{1}{2} \right) \geq D$ орындалған жағдайда молекула жеке атомдарға ыдырауы қажет.

Кванттық сандардың үлкен мәндерінде молекулалардың ыдырауын былай түсіндіруге болады: $n \gg 1$ болғанда, тербеліс амплитудасының үлкен болатыны соншалық, мұндай қашықтықта атомдар өзара есерлеспейді, сондықтан молекуланы атомдардың байланысқан күйі ретінде қарастыру мүмкін болмайды.

Ал, молекуланың айналмалы энергиясын сипаттайтын ℓ орбиталық сандардың үлкен мәндерінде орталықтан тепкіш күштер молекуладан атомдарды жұлып жібере алады.

Енді вибрациялы – ротаторлық спектрлерді қарастырайық. Вибрациялық энергияның мөлшері ротациялық энергиядан артық болғандықтан, ($\lambda_{\text{вибр}} \sim 10$ мкм, ал $\lambda_{\text{рот}} \sim 100$ мкм) спектрдің шкаладағы орны вибрациялық энергияға байланысты болады. Ерікті (спонтады) өтулер тек жоғарыдан төмен болғандықтан, сәуле шығару жиілігі үшін сұрыптау ережелерінен жиілік:

$$w' = \frac{E(n, \ell) - E(n-1, \ell \pm 1)}{\hbar}$$

(11.54)-ші бойынша:

$$w' = w + w_{\ell\ell'} \quad (11.55)$$

Мұнда (11.37) және (11.38)-ші формулалар бойынша $w_{\ell\ell'} = 2B\ell$, $w_{\ell\ell+1} = -2B(\ell+1)$ ал $w = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar}$. Сонымен жиіліктің екі түрлі мәндерін ("бұтақтарын") алдық

$$w^+ = w_{\text{вир}} + 2B\ell \quad \text{және} \quad w^- = w_{\text{вир}} + 2B(\ell + 1) \quad (11.56)$$

Мұндай вибрациялы-ротаторлық спектрлерді, мысалы, HCl молекуласында бақылауға болады.

Вибрациялы-ротаторлық спектрлерді пайдаланып, молекулалардың құрылымын зерттеуге болады.

Мұндай спектрлер молекулалардың инерция моментін, изотоптық құрылысын анықтауға мүмкіндік береді.

12 ТАРАУ. СУТЕГІ ТӘРІЗДЕС АТОМ ТЕОРИЯСЫ (КЕПЛЕР МӘСЕЛЕСІ)

§ 1. Толқындық функцияның радиалдық бөлігінің шешуі

Сутегі теріздес атом деп – сыртқы электрон қабықшасында бір электроны бар атомдарды айтамыз. Оған периодтық таблицаның бірінші группасындағы элементтер жатады: H, Li, Na, т.б. Бор тағайындаған сутегі теріздес атомның теориясы-жартылай классикалық теория болып табылады да, атомның көптеген қасиеттерін түсіндіре алмайды. Мысалы, Бор теориясын пайдаланып атомдардың сеуле шағылу спектрлерінің қарқындылығын есептеу немесе көп электронды атомдар теориясын құру мүмкін емес.

Ал, кванттық механикада бұл сияқты мәселелерді шешу онша қиынға түспейді. Бір электронның атомдағы қозғалысы математикалық тұрғыдан планеталардың Күнді айнала қозғалысына (Кеплер мәселесі) ұқсас және гармоникалық осциллятор мен ротатор есептері сияқты дел шешілетін болғандықтан, тесілдік тұрғыдан да пайдасы зор. Электронның ядромен есерлесу энергиясы ядромен электронның арақашықтығына ғана байланысты функция:

$$U(r) = -\frac{Z\ell_0^2}{r} \quad (12.1)$$

Сондықтан, сутегі теріздес атом теориясын орталық симметриялы күш өрісіндегі бөлшек қозғалысы теориясының дербес жағдайы деп қарастыруға болады.

Санақ жүйесінің басын ядроға орналастырып, толқындық функцияның $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ бұрыштық бөлігінің $Y(\theta, \varphi)$ шешуі белгілі деп есептесек, радиалдық бөлігі үшін Шредингер теңдеуі былай жазылады:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left\{ E + \frac{Z\ell_0^2}{r} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_0 r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (12.2)$$

Тиімді потенциалдық энергия ұғымын енгізейік:

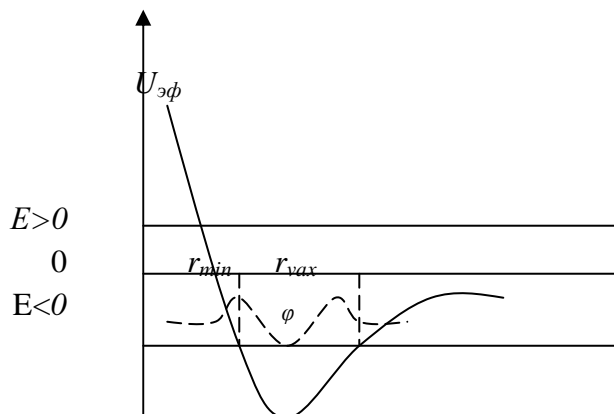
$$U_{\text{эф}} = -\frac{Z\ell_0^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_0 r^2} \quad (12.3)$$

мұндағы бірінші мүше кулондық есерлесуге, ал екінші мүше – орталықтан тепкіш күштерге байланысты шамалар. Осы потенциалдық энергияның қашықтыққа тәуелділік графигін тұрғызайық.

Графиктен егер электронның толық энергиясы $E < 0$ болса, онда оның қозғалысы кеңістіктің екі жағынан да потенциалдық тосқауылмен шектелген, яғни,

электронның энергиясы дискретті мәндерге ие болады (эллиптикалық орбиталар), керісінше егер $E > 0$ болса, онда 12.1-ші суреттегі графиктің оң жағынан тосқауыл болмайды (гиперболалық орбиталар), ал электронның энергиясы үзіліссіз мәндерге ие болады.

Электронның атомдағы орны r_{\max} менімен шектелген болғандықтан, сутегі теріз дес атом теориясын құрғанда ондағы электронның энергиясының мәндерін 0-ден кіші деп қарастырамыз. (12.2)-ші теңдеуді мынадай түрде түрлендіріп жазалық:



12.1 сурет. Тіміді потенциялық энергияның қашықтыққа тәуелділігінің графикі. Үзік сызықпен толқындық функцияның өзгерісі берілген.

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left\{ -A + \frac{2B}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} R = 0 \quad (12.4)$$

мұнда

$$\frac{m_0 Z \ell_0^2}{\hbar^2} = B > 0, \quad -\frac{2m_0}{\hbar^2} E = A > 0 \quad (12.5)$$

Мынадай жаңа айнымалы енгізсек:

$$\rho(r) = 2 \cdot \sqrt{A} \cdot r \quad (12.6)$$

(12.4)-ші өрнектің орнына мынадай теңдеу аламыз:

$$R''(\rho) + \frac{2}{\rho} R'(\rho) + \left\{ \frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{A}} \rho - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right\} R(\rho) = 0 \quad (12.7)$$

мұндағы

$$R'(\rho) + \frac{dR(\rho)}{d\rho}$$

$r \rightarrow 0$ және $r \rightarrow \infty$ болғанда (12.7) теңдеуде шексіз артатын және шексіз кемитін мүшелер кездеседі. Біздің мақсатымыз (12.7) теңдеуден мұндай жинақсыздықты жою, ол үшін:

1) $r \rightarrow 0$ болғанда, (12.7) теңдеудің орнына

$$R''_{\infty} - \frac{1}{4} R_{\infty} = 0 \quad (12.8)$$

теңдеуін аламыз. (12.8) теңдеудің шешуін мынадай түрде ізделік:

$$R_{\infty} = C_1 e^{\frac{1}{2}\rho} + C_2 e^{-\frac{1}{2}\rho} \quad (12.9)$$

Бұл теңдеудегі шексіз артатын екінші мүшеден құтылу үшін $C_2 = 0$, $C_1 = 1$ деп алалық. Сонда

$$R_{\infty} = e^{\frac{1}{2}\rho} \quad (12.10)$$

2) $r \rightarrow 0$ болғанда

$$R'' + \frac{2}{\rho} R' - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} R_0 = 0 \quad (12.11)$$

(12.11)-ші теңдеудің шешуін

$$R_0 = \rho^q \quad (12.12)$$

деп қарастырамыз. Енді

$$q(q+1) - \ell(\ell+1) = 0 \quad \text{бұдан} \quad q^2 + q - \ell(\ell+1) = 0$$

$$q_{1,2} = -\frac{1}{2} \pm \left(\ell + \frac{1}{2} \right); \quad q_1 = \ell, \quad q_2 = -(\ell+1) \quad (12.13)$$

Сонда:

$$R_0 = C_1 \rho^{\ell} + C_2 \rho^{-(\ell+1)} \quad (12.14)$$

$$C_1 = 1, \quad C_2 = 0 \quad \text{болғандықтан} \quad R_0 = \rho^{\ell} \quad (12.15)$$

(12.7)-ші теңдеуді былай түрлендіріп жазайық:

$$\frac{d^2(R \cdot \rho)}{d\rho^2} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right\} (\rho R) = 0 \quad (12.16)$$

(12.16) теңдеудің жалпы шешуін мынадай түрде қарастырамыз:

$$R = R_0 \cdot R_{\infty} \cdot U(\rho) \quad (12.17)$$

$$\text{Ал, } (\rho R) = \rho^{\ell+1} e^{\frac{1}{2}\rho} U(\rho) \quad (12.18)$$

Сонда (12.17)-ші негізгі теңдеуіміз мынадай түрге келеді:

$$\rho U'' + [2(\ell+1) - \rho] U' + \left[\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1 \right] U(\rho) = 0 \quad (12.19)$$

(12.19)-шы теңдеудің шешуін дәрежелі қатар түрінде іздейміз

$$U(\rho) = \sum_{v=0}^{\infty} a_v \rho^v \quad (12.20)$$

Бұл шешуді (12.19)-ші теңдеуге қойып, индекстерін бір менге келтірсек мынадай өрнек аламыз:

$$\sum_{v=0}^{\infty} \rho^v \left\{ a_v \left(\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1 \right) + a_{v+1} [v(v+1) + 2(v+1)(\ell+1)] \right\} = 0 \quad (12.21)$$

$$a_{v+1} = - \frac{\frac{B}{\sqrt{A}} - \ell - 1 - v}{[v(v+1) + 2(v+1)(\ell+1)]} a_v \quad (12.22)$$

(12.20)-шы қатарды максимум k менімен шектеп, $a_k \neq 0, a_{k+2} = 0$ деп алсақ, (12.22)-ші қатынастан

$$\frac{B}{\sqrt{A}} \ell + 1 + v = n \quad (12.23)$$

Мұнда $n=1,2,3,\dots$ бас кванттық сан, $\ell=0,1,2,\dots; k=0,1,2,\dots$ Осы өрнектерді ескергенде (12.20)-шы қатар мынадай түрде жазылады:

$$U = (-1)^\kappa \left\{ \rho^\kappa - \frac{\kappa(\kappa+s)}{1!} \rho^{\kappa-1} + \frac{\kappa+j(\kappa-1)(\kappa+s)\kappa(\kappa+s-1)}{2!} \rho^{\kappa-2} \dots \right\} =$$

$$= \sum_{j=0}^{\kappa} (-1)^{\kappa+j} \rho^{\kappa-j} \frac{\kappa!(\kappa+s)!}{j!(\kappa-j)!(\kappa+s-j)!}$$
(12.24)

(12.24)-ші қатар κ -ретті жалпыланған Ляггер полиномы деп аталады. Мұндағы $s = 2\ell + 1$. Ляггер полиномын тұйықталған түрде де жазуға болады:

$$U = Q_\kappa^s(\rho) = e^\rho \rho^{-s} \frac{d^\kappa}{d\rho^\kappa} (e^{-\rho} \cdot \rho^{\kappa+s})$$
(12.25)

Сонда толқындық функцияның радиалдық теңдеуінің шешуі

$$R_{nl}(\rho) = C_{nl} e^{\frac{1}{2}\rho} \rho^\ell Q_{n-1}^{2\ell+1}(\rho)$$

мұндағы $\rho = 2\sqrt{Ar}$, $\frac{B}{\sqrt{A}} = n$, сонда $\rho = \frac{2Z}{na_0} r$

(12.26)

$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}$ – бірінші Бор орбитасының радиусы. C_{nl} – коэффициенті радиалдық функцияның нормалау шартымен анықталады:

$$C_{nl} = \left(\frac{Z}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)(n+\ell)!}}$$
(12.27)

Енді

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{Z}{na_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)(n+\ell)!}} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^\ell \times$$

$$\times e^{\frac{Zr}{na_0}} Q_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)$$
(12.28)

Толық толқындық функция

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$
(12.29)

Энергияның меншікті мәндері:

$$E_n = -\frac{Z^2 e_0^4}{2a_0 n^2} = -R \frac{\hbar Z^2}{n^2}$$
(12.3)

$-R = \frac{e_0^4 m_0}{2\hbar^3}$ – Ридберг тұрақтысы.

Сутегі теріздес атомның негізгі күйлерін қарастырайық: $n = 1, m = 0$. Бұл жағдайда толқындық функция:

$$\Psi_{1,0,0} = R_{1,00}(r) Y_0^0(\theta, \varphi)$$
(12.31)

мұнда

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \rho_0^0(\theta) \Phi_0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$
(12.32)

сонда $\Psi_{1,0,0} = C e^{\frac{Zr}{a_0}}$

(12.33)

(12.33)-ші толқындық функцияның нормалау шарты мынадай түрде жазылады:

$$\int \Psi_{1,0,0}^* \Psi_{1,0,0} d^3x = \int \Psi_{1,0,0}^* \Psi_{1,0,0} r^2 dr d\Omega$$

Бұл қатынасқа $\Psi_{1,0,0}$ – функциясының мәндерін қойып және бұл функцияның θ, φ – бұрыштарына теуелсіздіктерін ескерсек:

$$C^2 \cdot 4\pi \int_0^{\infty} e^{-\frac{2Z}{a_0} r} r^2 dr = 1$$

бұдан $C = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2}$

Сонда ең төменгі кванттық күйдің толқындық функциясы:

$$\Psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \quad (12.34)$$

Ал сутегі теріздес атомның энергиясының меншікті мәндері

$$E_1 = -R\hbar Z^2 \quad (12.35)$$

Энергиялық деңгейлер қосымша деңгейлерге негізгі күйде бөліктенбейді. Себебі азғын күйлердің саны: $S = n^2$ қатынасымен анықталынады: $n = 1, S = 1$, ал екінші $n = 2$ деңгей төрт деңгейшелерге бөліктенеді:

$$n = 2 \quad \Psi_{2,1,0}; \Psi_{2,1,-1}; \Psi_{2,1,1}; \Psi_{2,0,0}; E_2 = -\frac{1}{4} R\hbar Z^2$$

$$n = 3 \quad \Psi_{3,2,0}; \Psi_{3,2,1}; \Psi_{3,2,-1}; \Psi_{3,2,2};$$

$$S = 9 \quad \Psi_{3,2,-2}; \Psi_{3,1,0}; \Psi_{3,1,1}; \Psi_{3,1,-1}; \Psi_{3,0,0} \quad E_3 = -\frac{1}{9} R\hbar Z^2$$

§ 2. Сутегі тәріздес атомның кванттық теориясының нәтижелерін классикалық тұрғыдан сипаттау

Классикалық теорияда

$$\frac{1}{2m_0} P_r^2 = E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{P_\varphi^2}{2m_0 r^2} \quad (12.36)$$

шамасының нольден үлкен болатындығы белгілі. Эллиптикалық орбиталар үшін ($E = -|E| < 0$) бұл шарт орындалады, егер радиус r мынадай аралықта жатса: $r_{\min} \ll r \leq r_{\max}$. Ал радиустың бұл мәндері (12.36)-шы қатынасты нольге теңестіру арқылы табылады. Энергияның (12.30)-шы кванттық мәнін пайдалансақ:

$$r_{\min}^{\max} = \frac{n^2 a_0}{Z} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{P_\varphi^2}{n^2 \hbar^2}} \right) \quad (12.37)$$

Егер полярлық координаттарда жазылған эллипс теңдеуін пайдалансақ:

$$r = \frac{P}{1 + \varepsilon \cos \varphi} \quad (12.38)$$

мұндағы параметр $p = \frac{b^2}{a}$, яғни кіші жартылай осьтің $-b$ квадратының a – үлкен

жартылай оське қатынасына тең, ал эллипстің эксцентриситеті $\varepsilon = \frac{\sqrt{a^2 - b^2}}{a}$, (12.38)-ші

қатынастан r_{\max} және r_{\min} шамалары үшін төмендегідей өрнектер аламыз:

$$r_{\max} = a(1 + \varepsilon) \quad (12.39)$$

$$r_{\min} = a(1 - \varepsilon) \quad (12.40)$$

Бұл алынған мәндерді (12.37)-ші нәтижемен салыстырсақ

$$\frac{n^2 a_0}{z} = a \quad (12.41)$$

$$\sqrt{1 - \frac{P_\varphi^2}{n^2 \hbar^2}} = \varepsilon \quad (12.42)$$

Бұдан кванттық $\frac{n^2 a_0}{z} = a$ шамасының классикалық баламасы эллипстің үлкен жартылай осіне, ал эксцентриситеттің (12.42)-ші өрнекке, Бор теориясындағы $P_\varphi^2 = n^2 \cdot \hbar^2 = \hbar^2 \cdot (\ell + 1)^2$ және кванттық теориядағы $P_\varphi^2 = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$ мәндерін қойсақ:

$$E_{\text{Бор}} = \sqrt{1 - \frac{(\ell + 1)^2}{n^2}} \quad (12.43)$$

$$E_{\text{кв}} = \sqrt{1 - \frac{\ell(\ell + 1)^2}{n^2}} \quad (12.44)$$

бұл қатынастардан Бор теориясы бойынша эксцентриситет нольге $\ell = (n - 1)$ мәнінде тең болатындығын көреміз. Ал кванттық теорияда $\ell = n - 1$ болғанда эксцентриситет өзінің минимум мәніне тең болады:

$$E_{\text{кв}}^{\min} = \sqrt{\frac{1}{n}} \quad (12.45)$$

Сондықтан, кванттық механикада кванттық күйлерді $\ell = (n - 1)$ болғанда классикалық дөңгелек орбиталардың баламасы ретінде ғана қарастыруға болады.

§ 3. Сұрыптау ережелері. Сутегі тәріздес атомның сәуле шығару спектрлері

Сутегі тәріздес атомның қандай жағдайда сәуле шығаратындығын анықтау, яғни сұрыптау ережелерін тағайындау үшін мынадай матрицалық элементтерді есептеу қажет:

$$(r)_{n\ell m}^{n'\ell' m'} = \int \Psi_{n'\ell' m'}^* \hat{r} \Psi_{n\ell m} d^3 x \quad (12.46)$$

мұнда

$$\Psi_{n,\ell,m} = Y_\ell^m(\theta, \varphi) R_{n\ell}(r) \quad (12.47)$$

Егер толқындық функцияны (12.46)-шы матрицалық элементтерге қойсақ

$$(r)_{n\ell m}^{n'\ell' m'} = \int d\Omega (Y_{\ell'}^{m'})^* \frac{\hat{r}}{r} Y_\ell^m \int_0^\infty R_{n'\ell'}^* \hat{r} R_{n\ell} r^2 dr \quad (12.48)$$

θ және φ бұрыштары бойынша интегралдау орбиталық кванттық сан ℓ мен магниттік кванттық сан m бойынша сұрыптау ережелерін береді:

$$\nabla \ell = \ell' - \ell = \pm 1$$

$$\nabla m = m' - m = 0, \pm 1$$

Сонда (12.46)-шы теңдеудің орнына мынадай матрицалық элемент аламыз:

$$(r)_{n\ell m}^{n'\ell' m'} = \text{const} \begin{Bmatrix} \delta_{m'm} \\ \delta_{m', m \pm 1} \end{Bmatrix} \delta_{\ell', \ell \pm 1} \int_0^\infty R_{n'\ell'}^* r^3 R_{n\ell} dr \quad (12.49)$$

Егер (12.39)-шы қатынастағы интегралды есептейтін болсақ, онда бұл интегралдың кванттық сан n' -тың қандай мәнінде де 0-ге тең болмайтынын көреміз, сондықтан сутегі тәріздес атомның сұрыптау ережелерін мынадай түрде жазуға болады:

$$\nabla \ell = \pm 1, \nabla m = 0, \pm 1 \quad (12.50)$$

n – кез келген мәнге ие бола алады.

Сәуле шығару жиілігі

$$w_{m' m} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = (n' \ell') - (n \ell) \quad (12.51)$$

мұндағы $\left(\frac{E_n}{\hbar}\right) = (n \ell)$ спектрлік терм деп аталады

$$E_n = -\frac{Z^2 \ell_0^2}{2a_0 n^2} = -R \hbar Z^2$$

$$(n \ell) = \frac{m_0 \ell_0^4}{2 \hbar^3} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = \frac{R Z^2}{n^2}, \quad \text{ал} \quad R = \frac{m_0 \ell_0^4}{2 \hbar^3} \quad (12.52)$$

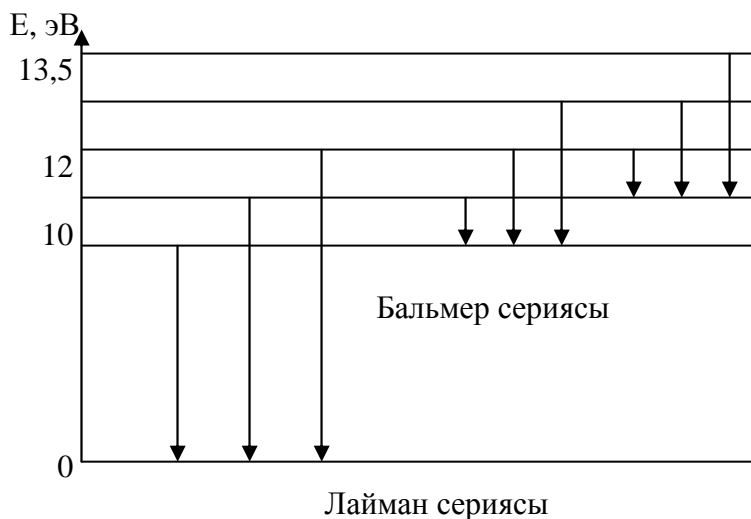
$$w_{m' m} = R Z^2 \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (12.53)$$

- Бальмер формуласы. Сутегі атомы үшін ($z = 1, n = 1$) – төменгі энергиялық күйге өтуге сәйкес келетін Лайман сериясы

$$w_{\text{лайм}} = (1s) - (np) = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

мұнда $n = 2, 3, 4, \dots$

Бальмер сериясы үшін ($n = 2$)



$$W'_B = (2s) - (np)$$

$$W''_B = (2p) - (ns)$$

$$W'''_B = (2p) - (nd)$$

$$W_B = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$n = 3, 4, 5, \dots$$

12.2 сурет.
Сутегі атомының спектрлік сызықтары

§4. Ядро қозғалысын ескеру

Сутегі тәріздес атом теориясын жасаған кезде атомның ортасындағы ядроның қозғалысын ескеріп, есептеулерге пайдаланған дұрыс. Ол үшін негізгі өрнекке кіретін m_0 – электрон массасының орнына электрон мен ядроның келтірілген массасын алу қажет:

$$m_{\text{келг}} = \frac{m_0 M_{\text{яд}}}{m_0 + M_{\text{яд}}} = \frac{m_0}{m_0} \approx m_0 \left(1 - \frac{m_0}{M_{\text{яд}}}\right) \quad (12.54)$$

Сонда Ридберг тұрақтысы мынадай түрде жазылады:

$$R = \frac{m_{\text{келг}} e_0^4}{2\hbar^3} = R_{\infty} \left(1 - \frac{m_0}{M_{\text{яд}}}\right) \quad (12.55)$$

Спектрлік термдердің (12.42)-ші өрнекпен берілетін мәндері де бұл жағдайда өзгешерек болады:

$$(n\ell) = \frac{z^2 R_{\infty}}{n^2} \left(1 - \frac{m_0}{M_{\text{яд}}}\right) \quad (12.56)$$

Ал сәуле шығару жиілігі мынадай өрнекпен анықталады:

$$w_{m'm'} = Z^2 R_{\infty} \left(1 - \frac{m_0}{M_{\text{яд}}}\right) \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \quad (12.57)$$

Бұл өрнектің бұрышы сәуле шығару жиілігінен айырмашылығы $\left(1 - \frac{m_0}{M_{\text{яд}}}\right)$ көбейткішінде ғана. Сәуле шығару жиілігі тек атом ядросының массасына тәуелді болғандықтан, атомдардың массаларын спектроскопиялық әдіспен де анықтауға болады.

Осы әдіспен табиғатта ауыр сутегінің, иондалған гелий атомының бар екендігі дәлелденді. Күннің спектрін зерттеу нәтижесінде жиіліктері

$$w_{2n_1} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_1^2}\right) \quad (12.58)$$

зандылығымен орналасқан қосымша спектрлік сызықтары бар екендігі тағайындалды. Мұндағы n_1 мынадай мәндерге ие болады:

$$n_1 = \frac{5}{2}, 3, \frac{7}{2}, 4, \frac{9}{2}, 5, \dots \quad (12.59)$$

Бұл серия сутегі атомының Бальмер сериясы ($n = 3, 4, 5, \dots$) мен Пикеринг сериясы деп аталатын, жартылай бүтін кванттық сандарға $n_1 = \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \dots$ ие болатын спектрлік сызықтардың қосындысына тең. Пикеринг сериясының сутегі атомдарының сәуле шығаруына байланысты ма, жоқ иондалған гелий атомының спектрлік сызықтары ма деген сұраққа жауап беру үшін тәжірибеден Ридберг тұрақтысының мәнін анықтау қажет болды. Сутегі болған жағдайда Ридберг тұрақтысы

$$R_H = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{1840}\right) \quad (12.60)$$

мәніне, ал, гелий атомы үшін

$$R_{He} = R_{\infty} \left(1 - \frac{1}{7360}\right) \quad (12.61)$$

болуы қажет.

Ұқыпты жүргізілген спектроскопиялық тәжірибелер Ридберг тұрақтысының (12.61)-ші өрнекпен сәйкес келетіндігін көрсетті. Яғни, Пикеринг сериясы иондалған гелий атомының спектрі болып табылады.

13 ТАРАУ. СӘУЛЕ ШЫҒАРУДЫҢ КАРАПАЙЫМ КВАНТТЫҚ ТЕОРИЯСЫ

§ 1. Ерікті және еріксіз кванттық өтулер. Эйнштейн коэффициенттері

Классикалық электродинамика бойынша үдемелі қозғалыстағы зарядталған бөлшек жарық сәулесін шығару көзі болып табылады және уақыт бірлігі ішінде бөлініп шығатын сәуле энергиясы төмендегідей қатынастан анықталады:

$$W_{kl} = \frac{2e_0^2}{3c^3} \ddot{r}^2 \quad (13.1)$$

мұнда $\ddot{r} = \ddot{a}$ – бөлшектің үдеуі.

Егер сәуле шығару көзі ретінде бір өлшемді гармоникалық осциллятор алынса,

$$x = a \cdot \cos \omega t \quad (13.2)$$

онда сәуле шығару жиілігі осциллятордың механикалық тербеліс жиілігіне тең, ал сәуле шығару энергиясы амплитуданың квадратына a^2 , пропорционал болады:

$$W_{kl} = \frac{e_0^2 a^2 \omega^4}{3c^3} \quad (13.3)$$

Егер зарядтың қозғалыс периоды $T = \frac{2\pi}{\omega}$, $x = f(t)$ – күрделі заңдылыққа бағынса, онда $f(t)$ функциясын Фурье қатарына жіктеуге болады:

$$x = \sum_{\kappa} a_{\kappa} \cos \omega_{\kappa} t \quad (13.4)$$

яғни сәулені жиілігі $\omega_{\kappa} = \kappa \omega$ ($\kappa = 1, 2, 3$) осцилляторлар жүйесі бөліп шығарады деп қарастыра аламыз. Бұл жағдайда сәулені тек негізгі тон ($\kappa = 1$) ғана емес, қалған $\kappa \omega$ гармоникаларды бөліп шығарады, ал сәуле шығару қарқындалығы сәйкес гармониканың амплитудасының квадратына a_{κ}^2 пропорционал болады.

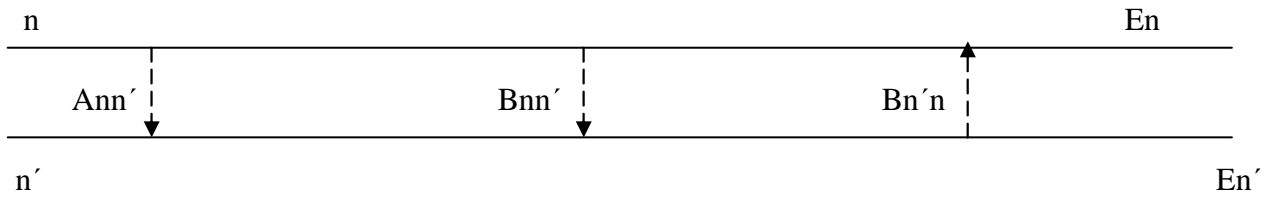
Сонымен, классикалық теория бойынша жүйенің сәуле шығаруы осы жүйенің механикалық қасиеттерімен толық сипатталады. Атап айтқанда, сәуле шығару жиілігі жүйенің механикалық тербеліс жиілігіне не тең, не еселі, ал сәуле шығару интенсивтілігіне сәйкес гармониканың амплитудасының квадратына пропорционал болады.

Ал, кванттық механикада сәуле шығару мәселесін классикалық физикаға қарағанда мүлде өзгеше қарастырған жөн.

Себебі, кванттық механика бойынша бөлшек (бөлшектер жүйесі) электромагниттік сәулелерді жоғарғы энергиялық деңгейден төменгі энергиялық деңгейге ауысқанда ғана бөліп шығарады.

Сәуле шығару мәселесін кванттық механика тұрғысынан алғаш қарастырған Эйнштейн (1917 ж.) болды. Ол кванттық жүйенің ерікті және еріксіз түрдегі сәуле

шығаруларын A , B коэффициенттерімен сипаттауды ұсынды және осы коэффициенттердің арасындағы байланысты тағайындады (13.1 сурет).



13.1 сурет. Ерікті және еріксіз өтулер

Сәуле шығарудың кванттық теориясының негізгі идеялары мынадай: атомның не атомдар жүйесінің бір электронының энергиясы E_n , n – кванттық күйде болсын. Сонда бұл электронның уақыт бірлігі ішінде еркін түрде энергиясы $E_{n'}$, n' – күйге ауысуының ықтималдығы $A_{nn'}$ болсын. Бұл жағдайда электрон энергиясы

$$\hbar\omega = E_n - E_{n'} \quad (13.5)$$

фотон бөліп шығарады. Егер осы деңгейдегі қозған атомдардың саны N_n болса, уақыт бірлігі ішінде жүйенің ерікті сәуле шығару қарқындылығы:

$$W_{ерікті}^{с.ш.} = N_n \cdot \hbar\omega \cdot A_{nn'} \quad (13.6)$$

Егер n – күйдегі атомдарды сыртқы электромагниттік сәулелердің әсері арқылы қозған күйге келтірсе, онда атомдар жоғарыдан-төмен еріксіз түрде сәуле шығарып ауыса бастайды. Екінші жағынан, сыртқы сәуленің әсерінен атомдар энергия жұтып, төменнен жоғары деңгейге де ауысулары мүмкін. Эйнштейн бөлшектердің еріксіз түрде, жоғарыдан төмен орын ауыстыру ықтималдылығын $B_{nn'}$, еріксіз түрде энергиясы төмен деңгейден жоғары деңгейге өтуін $B_{n'n}$ коэффициенттері арқылы сипаттауды ұсынды. Еріксіз өтулердің саны спектрлік тығыздық ρ_w –ға пропорционал деп есептесек, сәуле жұтып алу не бөліп шығару энергиясының мәндерін былай жазуға болады:

$$W_{еріксіз}^{с.ш.} = N_n \cdot B_{nn'} \cdot \hbar\omega \rho_w \quad (13.7)$$

$$W_{еріксіз}^{жұты} = N_{n'} \cdot B_{n'n} \cdot \hbar\omega \rho_w \quad (13.8)$$

мұнда $N_{n'}$ – n' деңгейдегі атомдардың саны. Атомдардың жоғарыдан төмен және төменнен жоғары ауысуларының саны тең жағдайда қарастырайық:

$$N_n A_{nn'} + N_n \rho_w B_{nn'} = N_{n'} \rho_w B_{n'n} \quad (13.9)$$

Яғни, қызған атомдар мен олар бөліп шығаратын және өздеріне кері әсер ететін сәулелер термодинамикалық тепе-теңдік күйде болсын. Бұл жағдайда атомдар мен бөлініп шығатын сәулелер тұйықталған жүйе құрайды. Электрондардың энергия бойынша үлестірілуі Максвеллдің үлестірілу заңдылығымен сипатталатындығын ескерсек

$$N_n = C \cdot e^{-\frac{E_n}{kT}}, \quad N_{n'} = C \cdot e^{-\frac{E_{n'}}{kT}}$$

(13.9)-ші теңдеу былай жазылады:

$$A_{nn'} e^{-\frac{E_n}{kT}} + \rho_w B_{nn'} e^{-\frac{E_n}{kT}} = \rho_w B_{n'n} e^{-\frac{E_{n'}}{kT}} \quad (13.10)$$

Бұл теңдеудің екі жағында $e^{E_n/kT}$ –ға көбейтіп, $\hbar\omega = E_n - E_{n'}$ екендігін пайдалансақ, спектрлік тығыздық үшін төмендегідей өрнек аламыз:

$$\rho_w = \frac{\frac{A_{m'n'}}{B_{m'n'}}}{\frac{B_{m'n'}}{B_{n'n'}} e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (13.11)$$

Абсолют қара дененің сәуле шығаруының спектрлік тығыздығы атомдар мен молекулалардың нақтылы құрылысына тәуелсіз болғандықтан (13.11)-ші формуланы Планк формуласымен:

$$\rho_w = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (13.12)$$

салыстыруға болады. Сонда:

$$B_{m'n'} = B_{n'n} = \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} A_{m'n'} \quad (13.13)$$

Бұл қатынастардан еріксіз түрде жоғарыдан-төмен және төменнен-жоғары өтулердің ықтималдылығы $A_{m'n'}$ коэффициентіне пропорционал екендігін көреміз. Сондықтан, атомдар мен молекулалардың сәуле шығаруын сипаттау үшін осы коэффициенттердің бірінің мәнін білсек жеткілікті.

2. Ерікті және еріксіз сәуле шығарулардың ықтималдылығын анықтау

Кванттық механика бойынша атомдағы электрондардың еріксіз түрде бір күйден екінші күйге орын ауыстыруы олардың сыртқы электромагниттік сәулемен әсерлесуінің салдары деп түсіндіріледі. Ал электрондардың ерікті, спонтанды түрде қозған күйден төменгі деңгейге ауысуын Шредингер теориясы тұрғысынан түсіндіру мүмкін болмады. Бұл мәселе кванттық электромагниттік өріс теориясына негізделген сәуле шығару теориясы жасалғаннан кейін ғана түсіндірілді. Бұл теория бойынша электрондар тек нақты фотондармен ғана емес, виртуал – пайда болуы мүмкін, фотондармен де, яғни электромагниттік вакууммен де әсерлесе алады. Осындай әсерлесу нәтижесінде ғана жүйе спонтанды түрде сәуле шығарады. Электрондардың виртуал фотондардың өрісімен әсерлесуінің классикалық аналогы ретінде үдемелі қозғалыстағы зарядталған бөлшекке осы зарядтың өзі тудырған элек-тромагниттік өрістің кері әсер етуін сипаттайтын Планктың сәуле үйкеліс күшін қарастыруға болады:

$$\vec{F}_{c.u} = \frac{2e_0^2}{3c^3} \ddot{\vec{r}}$$

Кейбір қосымша шарттар орындалғанда бұл электромагниттік өріс жарық сәулелері түрінде электроннан бөлінуі мүмкін, кванттық электродинамикада бұл құбылыс фотондардың виртуал күйден нақты фотондарға ауысуына сәйкес келеді.

Кванттық электродинамикаға сүйене отырып A және B коэффициенттерінің мәндерін дәл анықтауға, яғни кванттық сәуле шығару мәселесін толық шешуге болады. Классикалық сәуле шығару теориясын кванттық жағдайға жалпылап, A коэффициентінің мәнін анықталық. Бұл жалпылаудың нәтижесінде екінші ретті кванттауға негізделген кванттық теориямен сәйкес келетінін ескертеміз.

Классикалық физикада сәуле шығару энергиясын сипаттайтын (13.1)-ші өрнекті кванттық жағдайға аударайық. Ол үшін классикалық \vec{r} шамасының орнына оның кванттық баламасын аламыз:

$$\vec{r} = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{r} \Psi(\vec{r}, t) d^3x \quad (13.14)$$

Екінші жағынан, кванттық теория бойынша уақыт бірлігі ішінде бөлініп шығатын сәуленің энергиясы

$$W_{ks} = g_n g_{n'} A_{nn'} \cdot \hbar \omega \quad (13.15)$$

мұндағы $g_n g_{n'}$ – n және n' деңгейлерінде электронның бар-жоқтығын сипаттайтын коэффициенттер. Бұл коэффициенттердің ену себебі Паули қағидасы бойынша бір энергиялық деңгейде төрт кванттық сандары бірдей екі электронның болуы мүмкін еместігін ескеру қажеттілігінде. (13.1)-ші және (13.15)-ші өрнектерді салыстырып, (13.14)-ші формуланы ескерсек:

$$g_n g_{n'} \hbar \omega A_{nn'} = \frac{2e_0^2}{3c^3} \overline{\langle \ddot{\vec{r}} \rangle} \quad (13.16)$$

Соңғы теңдікте екі рет орта шама алынған, алғашқысы $\overline{\langle \ddot{\vec{r}} \rangle}$ – кванттық орта шама, кейін сызықшамен белгіленген уақыт бойынша орташалау.

Атомдағы электрон энергиялы E_n және $E_{n'}$ болатын тек екі күйде ғана бола алсын. Сонда кванттық суперпозиция принципі бойынша толқындық функция:

$$\Psi(\vec{r}, t) = C_n e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} + C_{n'} e^{\frac{i}{\hbar} E_{n'} t} \quad (13.17)$$

Бұл қатынасты ескергенде \vec{r} – радиус вектордың кванттық механикалық орта мәні:

$$\langle \vec{r} \rangle = |C_n|^2 \vec{r}_{nn} + |C_{n'}|^2 \vec{r}_{n'n'} + C_n^* C_{n'} e^{i\omega t} \vec{r}_{nn'} + C_n^* C_{n'} e^{-i\omega t} \vec{r}_{n'n} \quad (13.18)$$

мұнда

$$\omega = \omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad (13.19)$$

ал матрицалық элементтер:

$$\vec{r}_{n'n} = \int \Psi_{n'}^*(\vec{r}) \hat{r} \Psi_n(\vec{r}) d^3x \quad (13.20)$$

төмендегідей шексіз матрица құрайды:

$$(r) = \begin{pmatrix} r_{00} & r_{01} & r_{02} & \dots \\ r_{10} & r_{11} & r_{12} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{n0} & r_{n1} & r_{n2} & \dots \end{pmatrix} \quad (13.21)$$

Бұл матрицаның жолдарын бағанаға, бағаналарын жолдарға ауыстырсақ, (13.20)-шы формуланың негізінде комплекс-түйіндес

$$r_{nn'}^* = r_{n'n} \quad (13.22)$$

матрица аламыз.

(13.22)-шы қатынасты қанағаттандыратын матрицалар эрмиттік немесе өзара түйіндес матрицалар деп аталады.

Кванттық механикада тек эрмиттік матрицалар ғана пайдаланылады. (13.20)-шы матрицалық элементтер уақытқа тәуелсіз болғандықтан (13.18)-ді (13.16)-шы теңдікке қойғаннан кейін мынадай қатынасқа келеміз:

$$g_n \cdot g_{n'} \hbar \omega A_{mn'} = \frac{4e_0^2}{3c^3} \omega^4 |C_n|^2 |C_{n'}|^2 |r_{n'n}|^2 \quad (13.23)$$

Бұл қатынасты аларда периодтық функциялардың уақыт бойынша орта мәні нольге тең екендігі пайдаланылған, себебі:

$$\frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} e^{\pm 2i\omega t} dt = 0$$

(13.23)-ші теңдікті әрі қарай талдау жасау үшін, дәл қорытылуы тек кванттық электродинамикада келтірілетін қосымша материалдарды пайдаланамыз. Кванттық механикада тек стационар процестер ғана қарастырылатындықтан, электронның n -деңгейдеболуының ықтималдылығы $|C_n|^2 = const$ болуының ешқандай қайшылығы жоқ. Ал, сәуле шығару процесінде C_n коэффициенті секірмелі өзгертін жағдайда не істеу керек? Бұл сұраққа кванттық механика нақты жауап бере алмайды. Сондықтан, физикалық тұрғыдан қайшылығы жоқ, қорытылуы тек кванттық электродинамикада ғана алынатын қосымша деректерді пайдаланамыз.

Паули қағидасы бойынша электрон n деңгейде болып, n' деңгей бос болғанда ғана кванттық өту мүмкін болатындықтан, (13.23)-ші теңдікке C_n коэффициенттерінің орнына олардың бастапқы мәнін $-C_n^0$ қоямыз. Және

$$g_n \cdot g_{n'} = |C_n|^2 |C_{n'}|^2 = |C_n^0|^2 (1 - |C_{n'}^0|^2)$$

деп алсақ $C_n^0 = 1, C_{n'}^0 = 0$ болғанда $g_n \cdot g_{n'} = 1$ болатындығын көреміз. Сонда

$$A_{mn'} = \frac{4e_0^2 \omega^3}{3\hbar c^3} |r_{n'n}|^2 \quad (13.24)$$

$$B_{m'} = B_{n'n} = \frac{4\pi^2 e_0^2}{3\hbar^2} |r_{n'n}|^2 \quad (13.25)$$

ал сәуле шығару қарқындылығы:

$$W_{m'} = \hbar \omega A_{mn'} = \frac{4e_0^2 \omega^4}{3c^3} |r_{n'n}|^2 \quad (13.26)$$

бұл формулаларда

$$|r_{n'n}|^2 = |X_{n'n}|^2 + |Y_{n'n}|^2 + |Z_{n'n}|^2 \quad (13.27)$$

мұнда

$$X_{n'n} = \int \Psi_{n'}^* \hat{X} \Psi_n dx \quad (13.28)$$

Сонымен, Шредингер теориясы сәуле шығару процесін сипаттайтын негізгі классикалық физикалық шамаларды кванттық жағдайға ауыстыруға толық мүмкіндік береді.

(13.26)-ші және (13.27)-ші формулалардан сәуле шығару қарқындылығы нольден өзгеше болуы үшін $X_{n'n}, Y_{n'n}$ және $Z_{n'n}$ матрицалық элементтерінің ең болмаса бірінің

нольге тең болмауы керек екендігін көреміз. Мұндай өтулер кванттық механикада рұқсат етілген өтулер деп аталады. Кванттық механиканың көптеген мәселелерінде тек матрицалық элементтерді ғана есептеп, олардың көмегімен кванттық сандар қалай өзгергенде кванттық өтулердің болатындығын тағайындайтын сұрыптау ережелерін анықтауға болады.

Егер сұрыптау ережелері белгілі болса, сәуле шығару жиілігінің қандай мәндерге ие болатындығын білуге болады. Классикалық электродинамикада бірі сұрыптау ережелері берілген жүйе бөліп шығаратын әртүрлі гармоникаларды анықтаумен эквивалентті. Егер берілген кванттық сандардың өзгерісінде матрицалық элементтер нольге тең болса, онда сәуле шығару болмайды, ал мұндай өтулер рұқсат етілмеген өтулер деп аталады.

14 ТАРАУ. ШРЕДИНГЕР ТЕНДЕУІН ЖУЫҚТАП ШЕШУ ӘДІСТЕРІ

§ 1. Ұйытқу теориясының негіздері тендеулері

Кванттық механиканың есептерінің барлығын бірдей нольге тең дәлдікпен шешу мүмкін емес. Ал көптеген жағдайларда энергия мен толқындық функцияның мәндерін тек жуықтап қана анықтауға болады. Сондықтанда кванттық механикада Шредингер тендеуін жуықтап есептеу тәсілдері кеңінен пайдаланылады. Мұндай мүмкіндіктердің кең тараған түрінің бірі – ұйытқу теориясы.

Кванттық механикада атомдағы электрондардың қозғалысын қарастыру үшін негізгі әсер етуші күш ретінде ядро мен электронның арасындағы әсерлесу күштері алынады. Ал ұйытқу ретінде электрондардың арасындағы өзара кулондық тебіліс күштері қарастырылады. Егер атомды сыртқы электр немесе магнит өрісіне орналастырса, онда бұл өріс шамасы жағынан ядроның электр өрісінен көп кем болады да, ұйытқу ретінде электрондардың сыртқы электр немесе магнит өрісіндегі қозғалысын қарастыра аламыз.

Жүйенің гамильтонианы уақытқа байланысты болмайтын стационар құбылыстар үшін ұйытқу теориясын қарастырайық. Бұл жағдайда жүйенің гамильтонианы

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \hat{T} + \hat{V}_0 + \hat{V}' = \hat{H}^0 + \hat{V}' \quad (14.1)$$

мұндағы ұйытқу операторы $V' \ll V$, ал потенциалдық энергияның негізгі бөлігі V^0 – дәл шешілетін

$$\hat{H}^0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 \quad (14.2)$$

Шредингер тендеуін қанағаттандырады. Егер $V' = 0$ болса, бұл тендеудің E_n^0 және Ψ_n^0 мәндерімен сипатталатын дәл шешулері болады. Бірақ V' нольге тең болмағандықтан біз мынадай тендеуді шешуіміз қажет:

$$(\hat{H}^0 + \hat{V}')\Psi = E\Psi \quad (14.3)$$

Біздің міндетіміз – осы тендеуден V' ұйытқу энергиясын ескерген жағдайда жуықтап болса да E_n – энергиясының меншікті мәндері мен оларға сәйкес келетін Ψ_n – меншікті функцияларды анықтау.

Ұйытқу теориясы бойынша E мен Ψ – дің мәндері қатар түрінде ізделеді:

$$\Psi = \Psi^0 + \Psi' + \Psi'' + \dots \quad (14.4)$$

$$E = E^0 + E' + E'' + \dots \quad (14.5)$$

мұндағы E', Ψ' және $E'', \Psi'' - \Psi^0, E^0$ шамаларына қарағанда бірінші және екінші реті аз шамалар, ал, ұйытқу энергиясын V^0 – потенциалының энергиямен шамасы аз λ – параметрінің ($\lambda \ll 1$) көбейтіндісі

$$V' = V^0 \cdot \lambda$$

ретінде өрнектеуге болады.

(14.4) және (14.5)-ші өрнектерде бірінші ретті аз шамалармен шектеліп, оларды (14.3)-ші теңдеуге қойсақ Ψ' және E' мәндерін анықтау үшін мынадай қатынас аламыз:

$$(E^0 + E' - \hat{H}^0 - \hat{V}')(\Psi^0 + \Psi') = 0 \quad (14.6)$$

мәндерінің шамаларына қарай жинақтасақ:

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi^0 + [(E' - \hat{V}')\Psi^0 + (E^0 - \hat{H}^0)\Psi'] + (E' - \hat{V}')\Psi' = 0 \quad (14.7)$$

ұйытқу теориясының бірінші ретті жуықталған шешулерін табу үшін $(E' - \hat{V}')\Psi'$ – екінші ретті шаманы нольге тең деп алып, дәл шешу $(E^0 - \hat{H}^0)\Psi^0$ – екендігін ескереміз, сонда бұл (14.7)-ші теңдеуден нольдік жуықтауда

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi_n^0 = 0 \quad (14.8)$$

қатынасын қанағаттандыратын энергияның меншікті мәндері

$$E_1^0, E_2^0, E_3^0, \dots, E_n^0, \dots$$

мен меншікті функцияларын

$$\Psi_1^0, \Psi_2^0, \Psi_3^0, \dots, \Psi_n^0, \dots$$

анықтауға болады. Сонда (14.7)-ші теңдеудің орнына төмендегідей теңдеу аламыз:

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi' = -(E' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (14.9)$$

Енді алғашқы уақыт моментінде жүйе $n' = n$ кванттық күйде болсын. Сонда дәл шешуде $E^0 = E_n^0, \Psi^0 = \Psi_n^0$ болғандықтан бірінші ретті жуықтау үшін $E' = E_n', \Psi' = \Psi_n'$ деп алсақ; (14.9)-шы теңдеуді былай жазуға болады:

$$(E_n^0 - \hat{H}^0)\Psi_n' = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (14.10)$$

Кез келген функцияны ортонормаланған функциялардың толық жүйесі бойынша қатарға жіктеуге болатындықтан, Ψ_n^0 функциясын мынадай қатар түрінде іздестіреміз:

$$\Psi_n' = \sum_n C_n' \Psi_n^0 \quad (14.11)$$

Ендігі біздің міндетіміз – осы Фурье қатарындағы белгісіз C_n' , коэффициенттерін анықтау болып табылады. (14.11)-ші өрнекті (14.10)-шы теңдеуге қойсақ:

$$\sum_n C_n' (E_n^0 - \hat{H}^0)\Psi_n^0 = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (14.12)$$

ал (14.8)-ші теңдікті ескерсек (14.12) теңдеу мынадай түрде жазылады:

$$\sum_n C_n' (E_n^0 - E_n^0)\Psi_n^0 = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0 \quad (14.13)$$

§ 2. Энергиялық деңгейлердің азғындалмайтын жағдайы

Егер берілген жүйе азбаған болса, яғни энергияның әрбір E_n^0 меншікті мәніне Ψ_n^0 меншікті функциялардың бір мәні сәйкес келсе, (14.13) теңдеуді сол жағынан Ψ_n^{0*} – ге көбейтіп, бүкіл кеңістік бойынша интегралдасақ, мынадай қатынасқа келеміз:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \delta_{nn'} = -E' + \int \Psi_n^{0*} \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x \quad (14.14)$$

мұнда Ψ_n^0 – меншікті функциялардың ортонормалық шарты

$$\int \Psi_n^{0*} \Psi_{n'}^0 d^3x = \delta_{nn'} \quad (14.15)$$

пайдаланылған.

(14.14)-ші өрнектің сол жағы нольге тең болғандықтан $n' = n$ болғанда $(E_n^0 - E_{n'}^0) = 0$, ал $n' \neq n$ жағдайында $\delta_{nn'} = 0$, ізделіп отырған қосымша энергия үшін:

$$E_n' = \overline{V_{nn}'} \quad (14.16)$$

мұндағы

$$\overline{V'} = \int \Psi_n^0 \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x \quad (14.17)$$

Сонымен, жүйенің ұйытқу нәтижесінде алатын қосымша энергиясы ұйытқу энергиясының орта мәніне тең болады.

Енді ұйытқу теориясының бірінші ретті жуықтауын сипаттайтын (14.13)-ші Шредингер теңдеуін түрлендіріп жазайық:

$$\sum_{n'} C_{n'} (E_n^0 - E_{n'}^0) \Psi_{n'}^0 = -(E_n' - V') \Psi_n^0 \quad (14.18)$$

Бұл теңдеудің сол жағынан Ψ_n^{0*} (мұнда $n' \neq n$) функциясына көбейтіп, ортонормалық шартты ескеріп, бүкіл кеңістік бойынша интегралдасак, $C_{n'}$ коэффициенті үшін мынадай қатынас аламыз:

$$C_{n'} = \frac{\overline{V_{n'n}'}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \quad (14.19)$$

мұндағы

$$\overline{V'} = \int \Psi_n^{0*} \hat{V}' \Psi_n^0 d^3x \quad (14.20)$$

Сонда Ψ_n' функциясы үшін

$$\Psi_n' = C_n \Psi_n^0 + \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0 \quad (14.21)$$

Қосындыдағы штрих қосу $n' = n$ мәнінен басқаларының бәрі бойынша жүргізілетіндігін көрсетеді. (14.21)-ші өрнектегі белгісіз коэффициент $C_{n'}$ нольдік жуықтаудағы толық толқындық функцияларды

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \Psi_n' = C_n^0 \Psi_n^0 + \sum_{n'} C_{n'} \Psi_{n'}^0 \quad (14.22)$$

нормалау шартынан анықталады:

$$\int \Psi_n^* \Psi_n d^3x = 1 \quad (14.23)$$

мұнда

$$C_n^0 = 1 + C_n \quad (14.24)$$

(14.22)-ші толқындық функцияны (14.23)-ке қойып, тек бірінші ретті аз шамалармен шектелсек, мынадай өрнекке келеміз:

$$|C_n^0|^2 \int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x + \sum_{n'} \{ C_n^{0*} C_{n'} \int \Psi_n^{0*} \Psi_{n'}^0 d^3x + C_{n'}^* C_n^0 \int \Psi_{n'}^{0*} \Psi_n^0 d^3x \} = 1 \quad (14.25)$$

Сонда толқындық функцияның ортонормалық шартынан

$$C_n^0 = 1 \quad (14.26)$$

ал (14.24)-ші теңдіктен $C_n = 0$. Сонда ұйытқу теориясының бірінші ретті жуықтауы бойынша толқындық функция

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \sum_{n'} \frac{\overline{V'_{nn'}}}{E_n^0 - E_{n'}^0} \Psi_{n'}^0 \quad (14.27)$$

Сонымен, толқындық функция $\Psi_{n'}$ энергияның меншікті мәні $E_{n'}$ сияқты ұйытқу энергиясының бірінші дәрежесіне пропорционал болады.

§ 3. Энергиялық деңгейлердің азғын жағдайы үшін ұйытқу теориясы

Енді E_n^0 энергияның меншікті бір мәніне j меншікті функциялар $\Psi_{n_1}^0, \Psi_{n_2}^0, \dots, \Psi_{n_j}^0$ сәйкес келген жағдайдағы ұйытқу теориясын қарастырайық.

Бұл функциялардың кез келген сызықтық түрленуі де

$$\Psi_n^0 = \sum_{i=1}^j C_i^0 \Psi_{n_i}^0$$

энергиясының меншікті мәндері E_n^0 болатын нольдік жуықтаудағы Шредингер теңдеуінің шешуі болып табылады:

$$(E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_n^0 = 0$$

Егер жүйеге энергиясы V' ұйытқу қосылса C_i^0 коэффициенттерінің арасында байланыс пайда болатындығын көрсетелік. Ол үшін (14.10)-ші теңдеуді сол жағынан $\Psi_{n_i}^{0*}$ функциясына көбейтіп, бүкіл кеңістік бойынша интегралдайық, сонда

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_n^0 d^3x = - \int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \Psi_n^0 d^3x \quad (14.28)$$

Туындыларды ауыстыру теориясын пайдалансақ (14.28)-ші теңдіктің орнына мынадай теңдік аламыз:

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n_i}^{0*} d^3x = - \int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - \hat{V}') \Psi_{n_i}^0 d^3x \quad (14.29)$$

Мұндағы $\Psi_{n_i}^{0*}$ функцияның $(E_n^0 - \hat{H}^0) \Psi_{n_i}^{0*} = 0$ Шредингер теңдеуінің шешуі екендігін ескерсек мынадай теңдікке келеміз:

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} (E_n' - V') \sum_{i'=1}^j C_{i'}^0 \Psi_{n_i}^0 d^3x = 0 \quad (14.30)$$

$\Psi_{n_i}^0$ меншікті функциялары ортонормаланған деп алсақ

$$\int \Psi_{n_i}^{0*} \Psi_{n_i}^0 d^3x = \delta_{n_i n_i}$$

онда (14.30)-шы теңдіктің орнына төмендегідей теңдеу жазамыз:

$$C_i^0 (E_n' - \overline{V'_{ii}}) = \sum_{i'=1}^j C_{i'}^0 \overline{V'_{ii'}} \quad (14.31)$$

мұндағы

$$\overline{V'_{ii}} = \int \Psi_{n_i}^{0*} \hat{V}' \Psi_{n_i}^0 d^3x \quad (14.32)$$

$$\overline{V'_{ii'}} = \int \Psi_{n_i}^{0*} \hat{V}' \Psi_{n_{i'}}^0 d^3x \quad (14.33)$$

(14.31)-ші теңдеудегі қосындының жоғарғы жағындағы штрих қосудың $i = j$ мәнінен басқа мәндерді түгел қамтитындығын көрсетеді. (14.31)-дегі индекс i – дің бірден j – ге

дейінгі аралықтағы кез келген мәнге ие болатындығынан, энергияның E'_n және C_i^0 коэффициенттердің белгісіз мәндері үшін j -біртекті тендеулер жүйесін аламыз

$$\begin{aligned} C_i^0(E'_n - V'_{11}) - C_2^0 V'_{12} - \dots - C_j^0 V'_{1j} &= 0 \\ -C_1^0 V'_{21} + C_2^0(E'_n - V'_{22}) - \dots - C_j^0 V'_{2j} & \\ \dots & \\ \dots & \\ -C_1^0 V'_{j1} - C_2^0 V'_{j2} - \dots + C_{jj}^0(E'_n - V'_{jj}) &= 0 \end{aligned} \quad (14.34)$$

Егер Ψ_n^0 толқындық функцияның нормалау шартын

$$\int \Psi_n^{0*} \Psi_n^0 d^3x = 1 \quad (14.35)$$

қанағаттандыратындығын ескерсек, ұйытқу энергиясы E'_n пен C_i^0 -белгісіз коэффициенттерді анықтау қиынға түспейді.

(14.34)-ші жүйенің нольден өзгеше шешулері болу үшін оның анықтаушы нольге тең болуы қажет, сонда E'_n -тың мәндерін табу үшін мынадай тендеу аламыз:

$$\begin{vmatrix} (E'_n - V'_{11}), V'_{12}, \dots, -V'_{1j} \\ -V'_{21}, (E'_n - V'_{22}), \dots, -V'_{2j} \\ \dots \\ -V'_{j1}, -V'_{j2}, \dots, (E'_n - V'_{jj}) \end{vmatrix} = 0 \quad (14.36)$$

Бұл тендеу ғасырлық тендеу деп аталады. Термин аспан механикасынан алынған.

Егер ғасырлық тендеудің бірнеше түбірі болса (j -ге тең болуы міндетті емес), онда әрбір түбірге (14.34)-ші теңдікті пайдаланып анықталған C_i^0 -коэффициенттер сәйкес келеді. Яғни, E'_n қосымша энергияның мәндеріне сәйкес келетін меншікті функциялар да әртүрлі болады. Сонымен, энергиясы V' болатын ұйытқу қосылғанға дейін жүйенің күйі j -ретті азғын болса, ұйытқудың әсерінен азғындық реті азаяды, ал кей жағдайда мүлдем жойылуы да мүмкін.

§ 4. Штарк эффектісі

Егер атомды сыртқы электр өрісіне орналастырса, онда атомның энергиялық деңгейлері қосымша деңгейшелерге азғындалады. Бұл құбылыс 1913 жылы тағайындалған және ол Штарк эффектісі деп аталады. Тәжірибелерде электр өрісінің сутегіге және басқа да атомдарға әртүрлі әсер ететіндігі байқалған. Атап айтқанда, өріс кернеулігінің аз мәндерінде сутегі атомдарының энергиялық деңгейлерінің азуы өрістің кернеулігінің бірінші дәрежесіне (сызықтық Штарк эффектісі), ал басқа атомдар үшін бөліктену өрістің екінші дәрежесіне пропорционал (квадраттық Штарк эффектісі) болатындығын көруге болады.

Классикалық теория тұрғысынан Штарк эффектісін түсіндіру мүмкін болмады, тек кванттық механика ғана бұл құбылыстың теориясын құра алды.

Сутегі атомы үшін сызықтық Штарк эффектiсiн қарастырайық. Мысал үшін екiншi кванттық деңгеймен ($n = 2$) шектелейiк. Сыртқы өрiс кернеулiгi ($\varepsilon \sim 10^4 - 10^5$ В/см) атомның iшкi, ядро құрайтын өрiсiнен ($\varepsilon_{яд} \sim 5 \cdot 10^9$ В/см) көп кем болғандықтан, Штарк эффектiсiн түсiндiру үшiн энергиялық деңгейлердiң азғындық жағдайы үшiн жасалған ұйытқу теориясын пайдалануға болады. Ұйытқу энергиясы ретiнде электронның сыртқы электр өрiсiндегi потенциалық энергиясын аламыз:

$$V' = e_0 \varepsilon z$$

Ұйытқу болмаған жағдайда электронның энергиясы

$$E_2^0 = -\frac{R\hbar}{4}$$

және осы мәнге сәйкес келетiн меншiктi функциялар

$$\Psi_1^0 = \Psi_{2,0,0} = R_{20}(r)Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r) \quad (14.38)$$

$$\Psi_2^0 = \Psi_{2,1,0} = R_{21}(r)Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21} \cos \theta \quad (14.39)$$

$$\Psi_3^0 = \Psi_{2,1,1} = R_{21}(r)Y_1^1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \quad (14.40)$$

$$\Psi_4^0 = \Psi_{2,1,-1} = R_{21}(r)Y_1^{-1} = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \quad (14.41)$$

θ және φ бұрыштарын декарттық координаттарға ауыстырсақ бұл функциялар мынадай түрге келедi:

$$\Psi_1^0 = f_1(r) \quad (14.42)$$

$$\Psi_2^0 = f_2(r)z \quad (14.43)$$

$$\Psi_3^0 = f_2(r) \frac{x+iy}{\sqrt{2}} \quad (14.44)$$

$$\Psi_4^0 = -f_2(r) \frac{x-iy}{\sqrt{2}} \quad (14.45)$$

мұндағы

$$f_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{20}(r) \quad (14.46)$$

$$f_2(r) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{R_{21}(r)}{r} \quad (14.47)$$

Ал, электронның жалпы толқындық функциясы

$$\Psi^0 = \sum_{i=1}^4 C_i^0 \Psi_i^0 \quad (14.48)$$

Бiздiң жағдайымызда жүйенiң азғындық ретi төртке тең ($j = 4$) болғандықтан белгiсiз коэффициенттер C_i^0 мен жүйенiң ұйытқылмаған күйiн сипаттайтын E_2^0 энергияға қосымша E' мәнiн табу үшiн (14.34)-шi қатынастан мынадай теңдеулер жүйесiн аламыз:

$$\begin{aligned}
C_1^0(E_2' - \bar{V}_{11}') - C_2^0 \bar{V}_{12}' - C_3^0 \bar{V}_{13}' - C_4^0 \bar{V}_{14}' &= 0 \\
-C_1^0 \bar{V}_{21}' + C_2^0(E_2' - \bar{V}_{22}') - C_3^0 \bar{V}_{23}' - C_4^0 \bar{V}_{24}' &= 0 \\
-C_1^0 \bar{V}_{31}' - C_2^0 \bar{V}_{22}' + C_3^0(E_3' - \bar{V}_{33}') - C_4^0 \bar{V}_{34}' &= 0 \\
-C_1^0 \bar{V}_{41}' - C_2^0 \bar{V}_{42}' - C_3^0 \bar{V}_{43}' + C_4^0(E_4' - \bar{V}_{44}') &= 0
\end{aligned} \tag{14.49}$$

мұндағы

$$\bar{V}_{i'i} = \int \Psi_i^{0*} \hat{V}' \Psi_i^0 d^3x = e_0 \varepsilon \int \Psi_i^{0*} \hat{Z}' \Psi_i^0 d^3x \tag{14.50}$$

Көлем бойынша интегралдау нәтижесінде

$$\bar{V}_{11}', \bar{V}_{22}', \bar{V}_{33}', \bar{V}_{13}', \bar{V}_{23}', \bar{V}_{14}', \bar{V}_{24}', \bar{V}_{34}'$$

матрицалық элементтер нольге тең болады, себебі әрбір көрсетілген матрицалық элементтің интегралына z, x және y координаттарымен салыстырғанда тақ функциялар кіреді. Тек үш координаттың жұп функциясы болып табылатын \bar{V}_{12}' және $\bar{V}_{21}' = \bar{V}_{12}'$ матрицалық элементтері ғана нольден өзгеше болады:

$$\bar{V}_{12}' = \bar{V}_{21}' = e_0 \varepsilon \int f_1(r) f_2(r) z^2 d_3x \tag{14.51}$$

Бұл теңдеуге (14.46) және (14.47)-ші қатынастардан $f(r), f(r)$ функцияларының мәндерін әкеліп қойып, және

$$R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}a_0^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{\frac{r}{2a_0}}$$

ал

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{5/2}} r e^{\frac{r}{2a_0}}$$

екендігін ескеріп, θ және φ бұрыштары бойынша интегралдағаннан кейін мынадай теңдеуге келеміз:

$$V_{21}' = V_{12}' = \frac{e_0 \varepsilon}{24a_0^4} \int_0^\infty r^4 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{\frac{r}{a_0}} dr \tag{14.52}$$

Егер

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^s d\rho = \Gamma(s+1)$$

болатындығын ескерсек:

$$V_{12}' = V_{21}' = -3e_0 \varepsilon a_0 \tag{14.53}$$

$V_{i'i}'$ – матрицалық элементтердің осы келтірілген мәндерін ескерген жағдайда энергиялық E_2' мәндері үшін мынадай ғасырлық теңдеу аламыз:

$$\begin{vmatrix}
E_2' & 3a_0 & 0 & 0 \\
3a_0 e_0 \varepsilon & E_2' & 0 & 0 \\
0 & 0 & E_2' & 0 \\
0 & 0 & 0 & E_2'
\end{vmatrix} = 0 \tag{14.54}$$

(14.54)-ші теңдеуді мынадай түрде жазуға болады:

$$E_2'^2 (E_2'^2 - 9a_0^2 e_0^2 \varepsilon^2) = 0$$

Бұл теңдеудің төрт түбірі бар:

$$\begin{aligned}
E_2^{(1)} &= -3a_0 e_0 \varepsilon \\
E_2^{(2)} &= -3a_0 e_0 \varepsilon \\
E_2^{(3)} &= E_2^{(4)} = 0
\end{aligned}
\tag{14.55}$$

Ал, бұл энергияның әрбір мәніне (14.49)-шы тендеу бойынша әртүрлі C_i коэффициенттері сәйкес келеді:

$$\begin{aligned}
C_1^{(1)} &= C_2^{(1)}; C_3^{(1)} = C_4^{(1)} = 0 \\
C_1^{(2)} &= -C_2^{(2)}; C_3^{(2)} = C_4^{(2)} = 0 \\
C_1^{(3)} &= -C_2^{(3)}; C_3^{(3)}, C_4^{(3)} \neq 0 \\
C_1^{(4)} &= C_2^{(4)}; C_3^{(4)}, C_4^{(4)} \neq 0
\end{aligned}
\tag{14.56}$$

Сонымен энергиясы:

$$E_2^{(1)} = E_2^0 + E_2^{(1)} = -\frac{R\hbar}{4} - 3e_0 a_0 \varepsilon \tag{14.57}$$

деңгейге, нольдік жуықтауда

$$\Psi^{0(1)} = C_1^{(1)} (\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}) \tag{14.58}$$

меншікті функция сәйкес келеді.

Егер толқындық функцияның нормалау шартын

$$\int \Psi^{0(1)*} \Psi^{0(1)} d^3 x = 1$$

ескерсек (14.58)-ші функция:

$$\Psi^{0(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{2,0,0} + \Psi_{2,1,0}) \tag{14.59}$$

Ал, келесі кванттық күй үшін

$$E_2^{(2)} = E_2^0 + E_2^{(2)} = -\frac{R\hbar}{4} + 3e_0 a_0 \varepsilon \tag{14.60}$$

Нольдік жуықтаудағы толқындық функция

$$\Psi^{0(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{2,0,0} - \Psi_{2,1,0}) \tag{14.61}$$

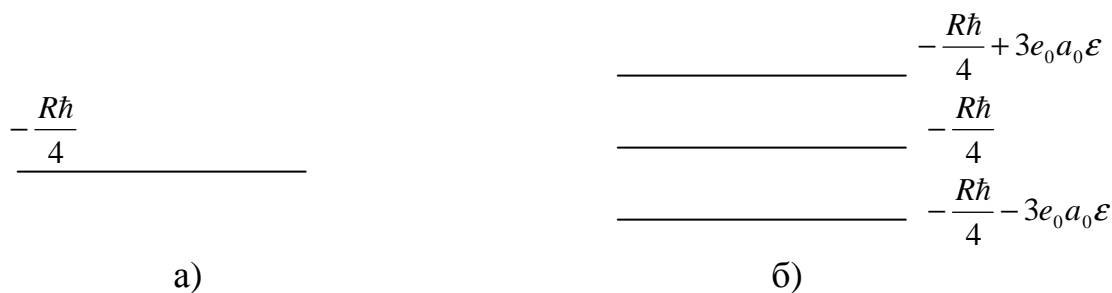
(14.55)-ші қатынастардан, $E_2^{(3)} = E_2^{(4)} + E_2^0$ күйлер электр өрісінде ұйытқуға ұшырамайтындықтан, бұл күйлер үшін мынадай толқындық функцияларды

$$\Psi^{0(3)} = \Psi_{2,1,1} \quad (m = +1)$$

$$\Psi^{0(4)} = \Psi_{2,1,-1} \quad (m = -1)$$

немесе олардың сызықтық түрленулерін пайдалануға болады, яғни $m = \pm 1$ болғанда электр өрісіндегі жүйенің энергиялық деңгейлері азғын болады.

Сонымен, егер импульс моментінің z -осіне проекциясы нольге тең болмаса ($m = \pm 1$), электронның қозғалысы негізінен (xy) жазықтығында болады, сыртқы электр өрісінде энергиялық деңгейлер бөліктенбейді. Ал, егерде моменттің z осіне проекциясы нольге тең болса ($m = 0$), электрон z осі арқылы өтетін жазықтықта қозғалады, сыртқы электр өрісінде энергиялық деңгейлер қосымша деңгейшелерге бөліктенеді



14.1 сурет. Сутегі атомының екінші энергиялық деңгейінің электр өрісінде бөлектенуі (сызықтық Штарк эффектісі)

а) өрісі жоқ болғанда ($\epsilon = 0$)

б) электр өрісіндегі ($\epsilon \neq 0$) энергиялық деңгейлер

Сызықтық Штарк эффектісін былай түсіндіруге болады: $n = 2$ кванттық күйде атомдағы электронның қозғалысын сипаттайтын толқындық функция орталық симметриялы болмайды, атомда p' электр моменті пайда болады, сондықтан электр өрісіне ($E_x = E_y = 0, E_z = \epsilon$) орналастырылған атом

$$V' = -(\vec{p}\vec{E}) = -p\epsilon \cos \gamma \quad (14.62)$$

қосымша энергияға ие болады. Мұндағы γ – атомның электрлік дипольдік моменті мен z – осінің арасындағы бұрыш. (14.62)-ші теңдікті (14.55)-ші қатынастармен салыстырсақ, атомның электрлік моментінің $p = 3e_0a_0$ тең болатындығын және $\Psi^{(1)}$ шешуінің бұрыш $\gamma = 0$, $\Psi^{(2)}$ бұрыш $\gamma = \pi$ мәндеріне сәйкес келетіндігін көреміз.

Ал, энергияның $E_2^{(3)}, E_2^{(4)}$ мәндері үшін $\gamma = \pm \frac{\pi}{2}$ болады деп қабылдасақ, электрлік момент өріс кернеулігіне перпендикуляр бағытталады да, атом қосымша энергияға ие болмайды.

Сонымен, сутегі атомының $n = 2$ деңгейі үшін сызықтық Штарк эффектісінің болу себебі \vec{p} электр моментіне байланысты. Кванттық механика теориясы тұрғысынан жасалған есептеулер әлсіз электр өрісі ($\epsilon \sim 10^4$ В/см) үшін тәжірибелік деректермен өте жақсы сәйкес келеді.

15 ТАРАУ. ЭЛЕКТРОННЫҢ СПИНИ. СЫРТҚЫ МАГНИТ ӨРІСІНДЕГІ АТОМ

§ 1. Электронның спиндік қасиетінің бар екендігінің тәжірибеде дәлелденуі

Шредингер теориясы атомдағы электронның орбиталық қозғалысына байланысты орбиталық және магниттік механикалық моменттерінің бар екендігін көрсетті. Бірақ көптеген тәжірибелік деректер Шредингер теориясының электронның кейбір қасиеттерін түсіндіре алмайтындығын байқатты. Осы тәжірибелерді

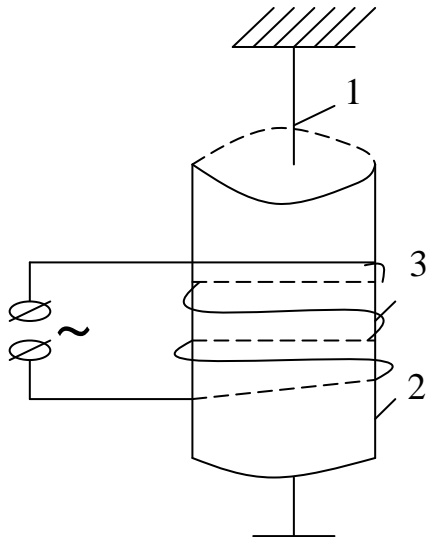
қарастырайық:

1. Эйнштейн – Де Гааз тәжірибесі.

Бұл тәжірибеде мынадай теориялық қатынас зерттелген:

$$\frac{\mu_z}{M_z} = -g \frac{e_0}{2m_0c} \quad (15.1)$$

Мұндағы μ_z – орбиталық магниттік моменті; M_z – механикалық моменттің z осіне проекциясы; g – Ланде көбейткіші. Шредингер теориясы бойынша Ланде көбейткіші



$g = 1$ тең болуы керек. Тәжірибеде ферромагнит стержень кварц жіпке ілінген. Катушка арқылы электр тогы жүргенде стержень магниттеліп, онда механикалық және магниттік моменттер пайда болады.

15.1 сурет. 1- кварц жіп; 2 -ферромагнит стержень; 3-тогы бар катушка.

Механикалық моменттің мөлшері кварц жіптің иірілуін бақылау арқылы тағайындалады. Егер тогы бар катушка арқылы айнымалы электр тогын жіберсек, стерженьде айнымалы механикалық момент пайда болып, ферромагнит стержень тербелмелі қозғалысқа ұшырайды. Оның шамасын кварц жіптің ширатылуын пайдаланып есептеп шығарады. Тәжірибелік бақылауды жеңілдету үшін резонанс құбылысын да пайдалануға болады. ксперименттің нәтижесінде гидромагниттік қатынастың $\left(\frac{\mu_z}{M_z}\right)$ теріс мәнге ие болатындығы тағайындалды. Бұл дерек

ферромагниттік стерженнің магниттелуі электрондардың қозғалысына байланысты екендігін тағайындады. Бірақ тәжірибе Ланде көбейткішінің мәнінің бірге емес, екіге тең болатындығын ($g = 2$) көрсетті. Бұл нәтиже Шредингер теориясына қайшы келеді. Көбейткіштің бұл мәні электронның спиндік қасиеті тағайындалғаннан кейін ғана түсіндірілді.

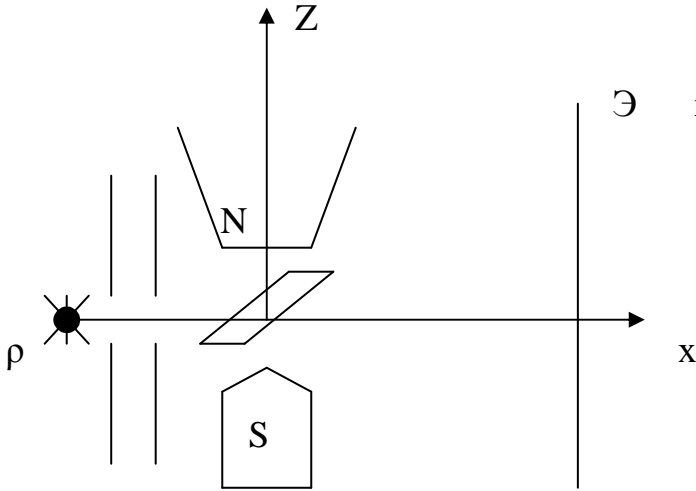
2. Штерн-Герлах тәжірибесі.

Бұл тәжірибеде бір валентті атомдар шоғының біртекті емес магнит өрісінде қозғалысын бақылау нәтижесінде кеңістік кванттау құбылысы қарастырылады. Тәжірибеде мынадай теориялық қатынас тексерілген:

$$M_z = -m\mu_0 \quad (15.2)$$

Мұндағы $\mu_0 = \frac{e_0\hbar}{2m_0c}$ электронның Бор магнетоны, m – магниттік кванттық сан. Бұл тәжірибеде x осінің бойымен таралатын бір валентті атомдар (сутегі, литий, күміс т.б.)

ағыны кернеулік векторы x осіне перпендикуляр z осінің бойымен бағытталған, біртекті емес магнит.



15.2 сурет. Бір валентті атомдардың магниттік моментін тағайындайтын Штерн-Герлах тәжірибесі.

өрісі арқылы өтеді ($H = H_z, H_x = 0, H_y = 0$). Сонда магниттік заряды бар, ұзындығы ℓ магниттік дипольге

$$\vec{\mu} = e_{\text{маг}} \cdot \vec{\ell} \quad (15.3)$$

z осінің бойымен бағытталған мынадай күш әсер етеді:

$$F_z = e_{\text{маг}} \{H(z) - H(z - \ell \cos \alpha)\} = e_{\text{маг}} \cdot \ell \cdot \cos \alpha \frac{dH}{dZ} = +\mu_z \frac{dH}{dZ} = -\mu_0 \frac{dH}{dZ} \cdot m \quad (15.4)$$

F_z күштің әсерінен бөлшектің t уақыт аралығында ығысу шамасын анықтайық. Егер бөлшек v жылдамдықпен магнит өрісіне перпендикуляр қозғалып $L = v \cdot t$ жол жүрсе, онда оның z осі бойынша ығысуы

$$\delta_z = \frac{1}{2} \omega t^2 = \frac{1}{2} \frac{L^2}{v^2} \frac{F_z}{M} \frac{dH}{dZ} \quad (15.5)$$

бұл теңдеуде үдеу $w = \frac{F_z}{M}$, F_z – күші (15.4)-қатынасынан алынған, ал M – атомның массасы.

(15.5)-ші теңдеуден магниттік момент $\vec{\mu}$ бөлшектер шоғы біртекті емес магнит өрісі арқылы өткенде бөліктенуі қажет және шоқтың бөліну саны $-\vec{\mu}$ магниттік моменттің магнит өрісінің бағытына проекциясының санымен анықталынады.

Штерн-Герлах тәжірибесінде атомдар шоғы негізгі күйде ($\ell = m = 0$) алынған. Бұл s – күйде атомның механикалық және магниттік моменттері нольге тең, сондықтан атомдар шоғы бөліктенбей, экранның бір нүктесіне түсуі тиіс.

Ал, егер атомдар p – күйде болса, яғни $\ell = 1, m = 0, \pm 1$, онда атомдар шоғы үшке бөліктенуі керек:

$$\delta_z = 0, \text{ егер } m = 0.$$

$$\text{ал } \delta_z = \pm \frac{1}{2} \frac{L^2}{v^2} \frac{F_z}{M} \frac{dH}{dZ}, \text{ егер } m = \pm 1.$$

Ал, Штерн-Герлах тәжірибелерінде негізгі күйдегі атомдардың екі шоққа бөлінетіндігі байқалған. Бұл s – күйдегі атомдардың магниттік моментке ие болатындығын және бұл магниттік моментті z осіне проекциясы екі мәнге ие

болатындығын көрсетеді. Тәжірибелер осы магниттік моменттің мәнінің Бор магнетонына

$$\mu_0 = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} \quad (15.6)$$

тең болатындығын көрсетеді.

Осы екі тәжірибенің нәтижелерін теорияға сәйкестендіру үшін Уленбек және Гаудсмит атомдағы электронның орбиталық моментімен қатар меншікті механикалық және магниттік моменттері болуы қажет деген жаңа болжам ұсынды. Бұл механикалық момент спин деп аталады. Уленбек және Гаудсмит болжамы бойынша электронның меншікті механикалық моменті $1/2$ -ге, ал оның z осіндегі проекциясы

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad (15.7)$$

тең болуы қажет, яғни меншікті механикалық моменттің z -осіне проекциясын сипаттайтын кванттық сан бүтін емес, жартылай бүтін санға ие болуы керек $\left(m_s = \pm \frac{1}{2}\right)$.

Бүтін сандарға қарағанда, жартылай бүтін сандардың негізгі ерекшелігі, олар әруақытта да жұп санды күйлер береді. Мысалы $S = 1/2$ болғанда кванттық күйлер саны екеу: $m_s = +\frac{1}{2}$ және $m_s = -\frac{1}{2}$ ал, $S = 3/2$ болса күйлердің саны төртке тең болады.

Электронның спиндік қасиеті тағайындалғаннан кейін атомдардың спектрлік сызықтарының мультипольдік бөліктенуі, магниттік моменті сияқты құбылыстарды дұрыс түсіндіру мүмкін болды.

§ 2. Спиндік операторлар. Олардың меншікті функциялары

Кванттық механикада физикалық шамаларға операторлар сәйкестендірілетіндігі белгілі. Мысалы, механикалық моменттің операторлары: $\hat{M}_x, \hat{M}_y, \hat{M}_z$, толық момент операторы $\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2$ және осы операторлардың арасындағы коммутативті қатынастар

$$\hat{M}_x \hat{M}_y - \hat{M}_y \hat{M}_x = i\hbar \hat{M}_z, \dots$$

Осы сияқты электронның механикалық моменттеріне операторлар $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ сәйкестендірілік, ал коммутативтік қатынасты мынадай түрде жазамыз:

$$\hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x = i\hbar \hat{S}_z \quad (15.8)$$

Электронның меншікті механикалық моменті кванттық механикада спиндік момент деп, ал осы моментті сипаттайтын кванттық сан – спиндік кванттық сан деп аталады. Паули спиндік момент операторларын екі қатарлы матрицалар түрінде жазуды ұсынды:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_x), \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_y), \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_z) \quad (15.9)$$

Мұнда $(\hat{\sigma}_x), (\hat{\sigma}_y), (\hat{\sigma}_z)$ – Паули операторлары:

$$\begin{aligned}
 (\hat{\sigma}_x) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, (\hat{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\
 (\hat{\sigma}_x)^2 &= (\hat{\sigma}_y)^2 = (\hat{\sigma}_z)^2 = I
 \end{aligned}
 \tag{15.10}$$

мұнда $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ – бірлік матрица

$$\tag{15.11}$$

Егер (15.10)-ші матрицаларды (15.8)-ші қатынасқа қойсақ:

$$(\hat{\sigma}_x)(\hat{\sigma}_y) - (\hat{\sigma}_y)(\hat{\sigma}_x) = 2i(\hat{\sigma}_z) \tag{15.12}$$

бұдан

$$(\hat{\sigma}_x)(\hat{\sigma}_y) = -(\hat{\sigma}_y)(\hat{\sigma}_x) \tag{15.13}$$

және осы қатынасты (15.12)-ге қойсақ

$$(\hat{\sigma}_y)(\hat{\sigma}_x) = -i(\hat{\sigma}_z) \tag{15.14}$$

екендігін тағайындауға болады.

Спиндік момент операторларының квадраты

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 I$$

бұдан, осы оператордың меншікті мәні:

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 = \ell_s (\ell_s + 1) \hbar^2 \tag{15.16}$$

мұнда $\ell_s = 1/2$ – спиндік кванттық сан $\tag{15.17}$

спиндік моменттің z осіне проекциясының операторы $\hat{S}_z = \pm \hbar/2(\hat{\sigma}_z)$, оның меншікті мәні $m_s = \pm 1/2$ $\tag{15.18}$

мұнда m_s – магниттік спиндік кванттық сан деп аталады.

Электронның спиндік қасиеті тағайындалғанға дейін оның күйі $\Psi(x, y, z, t)$ – толқындық функциямен сипатталатын еді, енді осы функцияға электронның спиндік қасиетін енгізу қажет: $\Psi(x, y, z, t, S_z)$, мұндағы $s_z = \pm 1/2\hbar$. Сондықтан $\Psi(x, y, z, t, S_z)$ функциясының орнына екі функция жазу қажет болады:

$$\Psi_1\left(x, y, z, t, +\frac{1}{2}\hbar\right)$$

және

$$\Psi_1\left(x, y, z, t, -\frac{1}{2}\hbar\right)$$

Паули электронның спиндік қасиетін ескергеннен кейінгі толық толқындық функцияны екі қатарлы матрица түрінде жазуды ұсынды:

$$\Psi_{\Psi_1, \Psi_2} = \begin{pmatrix} \Psi_1\left(x, y, z, t, +\frac{1}{2}\hbar\right) 0 \\ \Psi_2\left(x, y, z, t, -\frac{1}{2}\hbar\right) 0 \end{pmatrix}
 \tag{15.19}$$

мұндағы Ψ_1 және Ψ_2 функцияларының айырмашылығы тек спиннің бағытына байланысты. Бұл функцияға комплекс түйіндес функция

$$\Psi_{\Psi_1, \Psi_2}^* = \begin{pmatrix} \Psi_1^* \left(x, y, z, t, +\frac{1}{2}\hbar \right) \Psi_2^* \left(x, y, z, t, -\frac{1}{2}\hbar \right) \\ 0 \qquad \qquad \qquad 0 \end{pmatrix}$$

Егер электронның спиндік моменті мен оның ауырлық орталығы арасындағы байланысты ескерсек, онда электронның күйін сипаттайтын толық толқындық функцияны төмендегідей түрде жазуға болады:

$$\Psi_1(x, y, z, t, s_z) = \Psi_1(x, y, z, t) \varphi(s_z) \quad (15.20)$$

Енді толық толқындық функцияға екі қатарлы матрица түрінде берілген

$$(\hat{L}) = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \quad (15.21)$$

физикалық шаманың операторымен әсер етелік. Сонда

$$(\hat{L})\Psi_{\Psi_1, \Psi_2} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11}\Psi_1 + L_{12}\Psi_2 & 0 \\ L_{21}\Psi_1 + L_{22}\Psi_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (15.22)$$

§ 3. Электронның спинді ескергендегі толқындық функциясы. Паули теңдеуі

Енді электронның спиндік қасиетін ескергендегі қозғалыс теңдеуін, яғни Паули теңдеуін қарастырайық. Ол үшін Шредингер теңдеуіндегі гамильтонианды электронның $\vec{\mu}$ магниттік моменті мен сыртқы магнит өрісі \vec{H} арасындағы әсерлесуді ескеретін қосымша мүшемен

$$\nabla U = -(\vec{\mu}\vec{H}) = \frac{e\hbar}{2m_0c} [(\hat{\sigma})H] \quad (15.23)$$

толықтырайық. Мұндағы $(\hat{\sigma})$ –Паулидің спиндік матрицалары. Сонда Шредингер теңдеуі мынадай түрде жазылады:

$$\left\{ i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H}^0 + \nabla U \right\} \Psi = 0 \quad (15.24)$$

мұнда Шредингер теңдеуінің гамильтонианы:

$$\hat{H}^0 = \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p} + \frac{e_0}{c} \hat{A} \right)^2 - e_0\varphi + U \quad (15.25)$$

φ және \vec{A} электромагниттік өрістің скалярлық және векторлық потенциалдары. Енді гамильтонианға (15.23)-ші қосымша энергияны қосып жазсақ:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p} + \frac{e_0}{c} \hat{A} \right)^2 - e_0\varphi + U + \nabla U \quad (15.26)$$

Енді Шредингер теңдеуінің мынадай түрде жазылған түрін алайық

$$i\hbar \frac{d\Psi_{\Psi_1, \Psi_2}}{dt} = \hat{H}\Psi_{\Psi_1, \Psi_2} \quad (15.27)$$

мұнда $\Psi_{\Psi_1\Psi_2}$ – спиндік ескергендегі толық толқындық функция. \hat{H} – тың орнына (15.26)-ны қойсақ:

$$i\hbar \frac{d\Psi_{\Psi_1\Psi_2}}{dt} = \left\{ \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p} + \frac{e_0}{c} \hat{A} \right)^2 - e_0\phi + U + \nabla U \right\} \Psi_{\Psi_1\Psi_2} \quad (15.28)$$

Гамильтонианды мынадай түрде жазайық:

$$(\hat{H}) = \hat{H}^0 I + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} [(\hat{\sigma})H] = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \quad (15.29)$$

(15.29)-ды (15.27)-ші теңдеуге қойсақ:

$$i\hbar \frac{d\Psi_{\Psi_1\Psi_2}}{dt} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_{11} \Psi_1 + H_{12} \Psi_2 & 0 \\ H_{21} \Psi_1 + H_{22} \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (15.30)$$

Бұдан электронның спинінің бағытталуына байланысты мынадай екі теңдеу аламыз:

$$i\hbar \frac{d\Psi_1}{dt} = H_{11} \Psi_1 + H_{12} \Psi_2 \quad (15.31)$$

және

$$i\hbar \frac{d\Psi_2}{dt} = H_{21} \Psi_1 + H_{22} \Psi_2 \quad (15.32)$$

Енді (15-29) Гамильтон операторын ашып жазалық:

$$(\hat{H}) = \hat{H}^0 I + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} [(\hat{\sigma})H] = \hat{H}^0 I + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} \{ (\hat{\sigma}_x)H_x + (\hat{\sigma}_y)H_y + (\hat{\sigma}_z)H_z \}$$

мұнда Паулидің спиндік матрицаларының мәндерін қойсақ:

$$(\hat{H}) = \hat{H}^0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} H_x + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} H_y + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H_z \right\} \quad (15.33)$$

Бұдан (15.29)-шы теңдеудегі матрицалық мүшелердің мәндері

$$\begin{aligned} H_{11} &= \hat{H}^0 + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} H_z \\ H_{12} &= \frac{e_0\hbar}{2m_0c} (H_x - iH_y) \\ H_{21} &= \frac{e_0\hbar}{2m_0c} (H_x + iH_y) \\ H_{22} &= \hat{H}^0 - \frac{e_0\hbar}{2m_0c} H_z \end{aligned} \quad (15.34)$$

Енді осы алынған нәтижелерді (15.31) және (15.32)-ші теңдеулерге қойсақ, электронның спиндік қасиетін ескергендегі күйін сипаттайтын Паули теңдеулерін аламыз:

$$i\hbar \frac{d\Psi_1}{dt} = \hat{H}^0 \Psi_1 + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} \{ H_z \Psi_1 + (H_x - iH_y) \Psi_2 \} \quad (15.35)$$

$$i\hbar \frac{d\Psi_2}{dt} = \hat{H}^0 \Psi_2 + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} \{ (H_x + iH_y) \Psi_1 - H_z \Psi_2 \} \quad (15.36)$$

Бұл уақытқа тәуелді толық теңдеулер. Сонымен қатар, уақытқа байланыссыз Паулидің стационар теңдеулерін де алуға болады. Ол үшін (15.35), (15.36)-шы теңдеулердегі

$\left(i\hbar \frac{d}{dt} \right)$ – ның орнына энергия операторы \hat{E} аламыз, сонда

$$E\Psi_1 = \hat{H}^0\Psi_1 + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} \{H_z\Psi_1 + (H_x - iH_y)\Psi_2\} \quad (15.37)$$

$$E\Psi_2 = \hat{H}^0\Psi_2 + \frac{e_0\hbar}{2m_0c} \{(H_x + iH_y)\Psi_1 - H_z\Psi_2\} \quad (15.38)$$

(15.35)-(15.38) теңдеулер электронның спиндік қасиетін ескергендегі алғашқы қозғалыс теңдеулері немесе Паули теңдеулері деп аталады. Бұл теңдеулерге электронның меншікті магниттік моментінің абсолют мәнінің эмпирикалық түрде енгізілгенін ескерген жөн. Сондықтан, Паули теңдеулері электронның күйін толық ескеретін Дирак теориясының алғашқы сатысы ғана болды.

§ 4. Сыртқы магнит өрісіндегі атом. Қарапайым Зееман эффектiсiнiң теориясы

Кернеулігі \vec{H}, z осімен бағытталған сыртқы магнит өрісіндегі электронның қозғалысын қарастырайық:

$$H_x = H_y = 0, \quad H_z = H \quad (15.39)$$

Сонда гамильтониан:

$$(\hat{H}) = \frac{1}{2m_0} \left(\hat{p} + \frac{e}{c} \hat{A} \right)^2 + U(z) \quad (15.40)$$

Магнит өрісiнiң кернеулігі мен векторлық потенциалдың арасындағы байланыс

$$\vec{H} = \text{rot}\vec{A} \quad (15.41)$$

(15.39)-шы қатынастарды қанағаттандыру үшін векторлық потенциалдың құраушылары мынадай мәндерге ие болуы керек:

$$\begin{aligned} A_x &= -\frac{H}{2}y \\ A_y &= \frac{H}{2}x \\ A_z &= 0 \end{aligned} \quad (15.42)$$

Сонда гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m_0} \left\{ \left(\hat{P}_x \frac{e_0H}{2c} y \right)^2 + \left(\hat{P}_y \frac{e_0H}{2c} x \right)^2 + \hat{P}_z^2 \right\} + U(z) = \\ &= \frac{1}{2m_0} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2) + \frac{e_0H}{2m_0c} (\hat{x}\hat{P}_y^2 + \hat{y}\hat{P}_x^2) + \frac{e_0^2H^2}{8m_0c^2} (\hat{x} + \hat{y}) + U(z) \end{aligned} \quad (15.43)$$

Сыртқы магнит өрісiнiң кернеулігі өте әлсiз болсын. Онда (15.43)-шi теңдеудегi екiншi мүшемен салыстырғанда үшiншi мүшенi екiншi реттi аз шама деп қабылдап, ескермеуге болады ($H \gg H^2$). Сонда $(\hat{x}\hat{P}_y^2 + \hat{y}\hat{P}_x^2) = \hat{M}_z$ екен- дiгiн ескерсек, гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(z) = \frac{e_0H}{2m_0c} \hat{M}_z = \hat{H}^0 + \frac{e_0H}{2m_0c} \hat{M}_z \quad (15.44)$$

Ендi гамильтонианның осы мәнін Паули теңдеуiне

$$\left\{ \hat{H} + \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} [(\hat{\sigma})H] \right\} \Psi_{\Psi_1, \Psi_2} = i\hbar \frac{d\Psi_{\Psi_1, \Psi_2}}{dt} \quad (15.45)$$

қоямыз. Бұдан (15.44)-ті ескерсек

$$\left\{ \hat{H}^0 + \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} [\hat{M}_z + \hbar(\hat{\sigma})] \right\} \Psi_{\Psi_1, \Psi_2} = i\hbar \frac{d\Psi_{\Psi_1, \Psi_2}}{dt} \quad (15.46)$$

Мұндағы Паули матрицаларының меншікті мәндері бірге тең. (15.46)-шы теңдеудің орнына спиндердің бағытына байланысты екі теңдеу жазуға болады:

$$\left\{ \hat{H}^0 + \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} (m+1) \right\} \Psi_1 = i\hbar \frac{d\Psi_1}{dt} \quad \text{егер} \quad S_z = +\frac{1}{2} \hbar \quad (15.47)$$

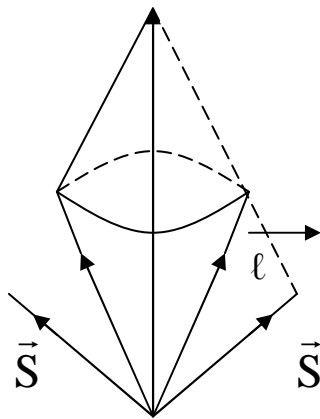
$$\left\{ \hat{H}^0 + \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} (m-1) \right\} \Psi_1 = i\hbar \frac{d\Psi_1}{dt} \quad \text{егер} \quad S_z = -\frac{1}{2} \hbar \quad (15.48)$$

(15.47) және (15.48)-ші теңдеулердің меншікті функциялары: $\Psi_1^{n, \ell, m} = R(r)Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ энергияның меншікті мәндері

$$E_1 = E_0 + \frac{e_0 \hbar H}{2m_0 c} (m+1) \quad \text{егер} \quad S_z = +\frac{1}{2} \hbar \quad (15.49)$$

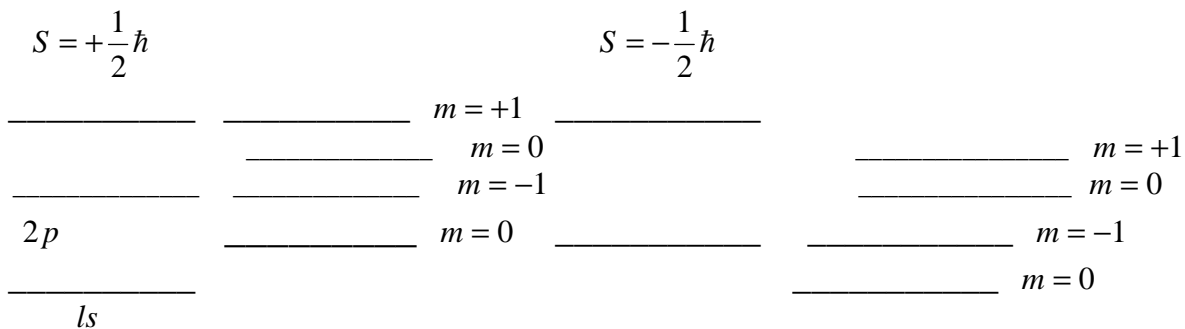
$$\Psi_2^{n, \ell, m} = R(r)Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

$$E_2 = E_0 + \frac{e_0 \hbar H}{2m_0 c} (m-1) \quad \text{егер} \quad S_z = -\frac{1}{2} \hbar \quad (15.50)$$



Мұндағы $\frac{e_0 H}{2m_0 c} \omega_0$ – Лормор прецессиясының жиілігі деп аталады. Сонымен, сыртқы магнит өрісі электронға қосымша айналу моментін береді (15.3 сурет) және осы момент салдарынан энергетикалық деңгейлер қосымша деңгейшелерге бөлінеді (15.3 сурет).

15.3 сурет. Сыртқы магнит өрісіндегі атомның прецессиясы



15.4 сурет. Сыртқы магнит өрісіндегі атомның энергиялық деңгейлері

Әлсіз сыртқы магнит өрісіндегі атомның энергиялық деңгейлерінің қосымша деңгейшелерге ыдырау құбылысы Зеeman эффектісі деп аталады. Бұл құбылыстың болуы электронның спиндік қасиеттерінің бар екендігінің салдары.

1896 жылы Зеeman сыртқы магнит өрісінің атомның спектрлік сызықтарына әсерін бақылады. Сол мезгілден бастап атом құрылысын, әсіресе атомның магниттік қасиеттерін, зерттегенде Зеeman эффектісінің атқаратын ролі өте зор екендігі байқалды. Бұл эффектіні зерттеу нәтижесінде атомдағы электронның көптеген қасиеттері, алдымен оның спиндік және магниттік моменттері бар екендігі тағайындалғандықтан, Зеeman эффектісін классикалық және кванттық теориялар тұрғысынан қарастырайық. Г.А. Лоренц дамытқан классикалық теория бойынша энергия бөліп немесе жұтып алатын атом орналасқан сыртқы магнит өрісінің кернеулігіне перпендикуляр бағытта бақылағанда спектрлік сызықтар үш құраушыға

$$w_0 + \frac{e_0}{2m_0c}H, \quad w_0, \quad w_0 - \frac{e_0}{2m_0c}H$$

бөліктенуі қажет.

Зеeman тәжірибесінде натрий жалынды шам электромагниттің полюстерінің арасында орналасқан. Тәжірибеде сыртқы өріс күшейгенде, В – спектрлік сызықтың ұлғаятындығы байқалды. Яғни, Зеeman спектрлік сызықтардың бөліктенуін көрген жоқ. Егер де Зеeman тәжірибесінде өрісті одан әрі күшейтіп, айыру мүмкіндігі жоғары спектрлік аспап пайдаланса, ол натрий спектрінің үш сызықшаға бөліктенгенін бақылаған болар еді. Көптеген тәжірибелер спектрлердің бөліктенуінің Лоренц болжағаннан гөрі күрделірек болатындығын көрсетті. Тек кейбір атомдарда ғана магнит өрісінде Лоренц триплеті бақыланады. Бұл тәжірибелер қарапайым Зеeman эффектісі деп, спектрлік сызықтардың бөліктенуінің өзгеше болатын басқа тәжірибелер күрделі Зеeman эффектісі деп аталады.

Қарапайым Зеeman эффектісін Шредингер теориясы тұрғысынан қарастырайық. Магнит өрісі уақыт бойынша өзгермейді деп алайық. Сонда Шредингер теңдеуін магнит өрісінің әсерін ескеретін қосымша мүшелермен толықтыру қажет болады. Магнит өрісінде зарядталған бөлшекке әсер ететін күштердің бөлшектің траекториясын ғана өзгертіп, ешқандай жұмыс жасамайтындығы белгілі. Сондықтан тұрақты магнит өрісінде энергия сақталады. Магнит өрісінің әсерін ескеру үшін гамильтонианға мынадай өзгерту енгізсе жеткілікті:

$$\vec{P} \rightarrow \vec{P} - \frac{e_0}{c} \vec{A}$$

мұнда бөлшектің импульсі, А – магнит өрісінің векторлық потенциалы. Сонымен, қарастырып отырған жағдай үшін классикалық Гамильтон функцияның түрі мынадай болады

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(\vec{P} - \frac{e_0}{c} \vec{A} \right)^2 + U(x, y, z) \quad (15.51)$$

Енді осы гамильтонианның орнына кванттық Гамильтон операторын алу қажет. Ол үшін (15.51)-ші теңдеудегі физикалық шамалардың орнына оларға сәйкес операторларды алу қажет:

$$\vec{P} - \frac{e_0}{c} \vec{A} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e_0}{c} \hat{A}$$

немесе құраушылары бойынша

$$\begin{aligned} P_x - \frac{e_0}{c} \bar{A}_x &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{e_0}{c} A_x \\ P_y - \frac{e_0}{c} \bar{A}_y &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dy} - \frac{e_0}{c} A_y \\ P_z - \frac{e_0}{c} \bar{A}_z &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dz} - \frac{e_0}{c} A_z \end{aligned}$$

Сонда (15.51)-ші теңдеудің орнына мынадай кванттық гамильтониан аламыз:

$$H = \frac{1}{2m_0} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{e_0}{c} A_x \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dy} - \frac{e_0}{c} A_y \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dz} - \frac{e_0}{c} A_z \right)^2 \right] + U(x, y, z) \quad (15.52)$$

Осы оператормен $\Psi(x, y, z)$ толқындық функцияға әсер етіп, жақшаларды ашып, операторлардың арасындағы коммутативтік қатынастарды ескерсек:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \Psi + U - \frac{1}{2m_0} \frac{\hbar e_0}{i c} \left(\frac{dA_x}{dx} + \frac{dA_y}{dy} + \frac{dA_z}{dz} \right) \Psi - \\ &- \frac{1}{2m_0} \cdot 2 \cdot \frac{\hbar e_0}{i c} \left(A_x \frac{d}{dx} + A_y \frac{d}{dy} + A_z \frac{d}{dz} \right) \Psi + \frac{e_0^2}{2m_0 c} (\hat{A}_x^2 + \hat{A}_y^2 + \hat{A}_z^2) \Psi = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi + \frac{ie_0 \hbar}{m_0 c} \bar{A} \text{grad} \Psi + U \Psi + \frac{ie_0 \hbar}{m_0 c} (\text{div} \bar{A}) A + \frac{e_0^2}{2m_0 c} \bar{A}^2 \Psi \end{aligned} \quad (15.53)$$

Магнит өрісінің бөлшекке әсері электр өрісіне қарағанда көп кем болғандықтан әлсіз магнит өрісі үшін $\frac{e_0^2}{2m_0 c} \bar{A}^2$ мүшесін ескермеуге болады. Екінші жағынан, векторлық потенциалға ешқандай шарт қойылмағандықтан, оны $\text{div} \bar{A} = 0$ болатындай қылып алуға болады. Сонда магнит өрісінде қозғалатын микробөлшек үшін гамильтониан мынадай түрге келеді:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + \frac{ie_0^2 \hbar}{m_0 c} \bar{A} \text{grad} + U(\vec{r}) \quad (15.54)$$

Енді бұл жағдай үшін Шредингер теңдеуі:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2e_0}{im_0 c} (\bar{A} \text{grad} \Psi) + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 \quad (15.55)$$

Сыртқы магнит өрісі жоқ болған жағдайдағы Шредингер теңдеуі мен (15.55)-ші теңдеудің айырмашылығы мынадай

$$\frac{2e_0}{im_0 c} (\bar{A} \text{grad} \Psi)$$

қосымша мүшеде.

(15.55)-ші Шредингер теңдеуін пайдаланып Зеeman эффектiсiнiң теориясын құрайық. Нақты сутегi немесе сутегi тәрiздес атом алып, оны кернеулiгi \vec{H}, z осiмен бағытталған сыртқы магнит өрiсiне орналастырайық.

$$(H_x = H_y = 0, H_z = H)$$

Бұл жағдайда $\vec{H} = \text{rot}\vec{A}$, бұдан $A_x = -\frac{1}{2}H_y, A_y = -\frac{1}{2}H_x, A_z = 0$ болуы керек екендігін кереміз.

Себебі

$$H_x = \text{rot}_x A = \frac{dA_z}{dy} - \frac{dA_y}{dz} = 0$$

$$H_y = \text{rot}_y A = \frac{dA_x}{dz} - \frac{dA_z}{dx} = 0$$

$$H_z = \text{rot}_z A = \frac{dA_y}{dx} - \frac{dA_x}{dy} = H$$

шарты орындалуы қажет. Бұл қатынастарды ескергенде (15.55)-ші Шредингер теңдеуіндегі қосымша мүше мынадай түрге келеді:

$$\vec{A} \text{grad} \Psi = A_x \frac{d\Psi}{dx} + A_y \frac{d\Psi}{dy} = A_z \frac{d\Psi}{dz} = \frac{1}{2} H \left(x \frac{d\Psi}{dy} - y \frac{d\Psi}{dx} \right) = \frac{1}{2} H \frac{d\Psi}{d\varphi} \quad (15.56)$$

Мұнда Декарт жүйесімен сфералық координаттар жүйесінің арасындағы (5 тарау) қатынастар ескерілген.

Енді (15.55)-ші Шредингер теңдеуі мынадай түрде жазылады:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{ie_0}{\hbar c} H \frac{d\Psi}{d\varphi} + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 \quad (15.57)$$

Қарастырып отырған жағдайымыз орталық симметриялы күш өрісіндегі зарядталған бөлшектің қозғалысына сәйкес келетіндіктен, соңғы теңдеудің шешуін үш функцияның көбейтіндісі ретінде іздестіреміз:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\rho(\theta)\Phi(\varphi)$$

бұдан

$$\frac{d\Psi}{d\varphi} = im\Psi$$

ал

$$-\frac{ie_0}{\hbar c} H \frac{d\Psi}{d\varphi} = m \frac{e_0 H}{\hbar c} \Psi$$

бұл өрнекті ескергенде Шредингер теңдеуі:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(E + m \frac{e_0 H \hbar}{2m_0 c} - U \right) \Psi = 0 \quad (15.58)$$

Мынадай белгілеу енгізіп

$$E + m \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c} H = E' \quad (15.59)$$

(15.58)-ші теңдеуді көшіріп жазсақ

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E' - U) \Psi = 0 \quad (15.60)$$

энергияның меншікті мәндері E_n мен магнит өрісі болған жағдайдағы энергияның меншікті мәндері E'_n арасындағы айырмашылық $-m \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c}$ шамасында.

Бірақ кванттық сан m орбиталық кванттық сан ℓ – ге байланысты $(2\ell + 1)$ мәнге ие болатындықтан, сыртқы магнит өрісіне орналасқан атомның энергиялық деңгейлері $(2\ell + 1)$ деңгейшелерге бөліктенеді. Ал меншікті функциялар өріс жоқ болғандағы

меншікті функциялармен бірдей болады, өзгермейді. Бұл сыртқы магниттік өрістің m кванттық санға байланысты энергиялық деңгейлердің азғындығын жоятындығын көрсетеді. Спектрлік сызықшалардың арақашықтығы магнит өрісінің кернеулігіне пропорционал $-\frac{e_0\hbar}{2m_0c}$ және n, ℓ кванттық сандарына тәуелді болмайды. Спектрлік сызықшалардың жиілігі

$$w = \frac{E_k - E_i}{\hbar} = \frac{E'_k - E'_i}{\hbar} - \nabla m \frac{e_0}{2m_0c} H = w_0 - \nabla m \frac{e_0}{2m_0c} H \quad (15.61)$$

мұнда w_0 – магнит өрісі жоқ болғандағы спектрлердің жиілігі. Магниттік сан үшін сұрыптау ережелері бойынша $m = 0, \pm 1$, яғни сыртқы магнит өрісінің әсері нәтижесінде жиілігі w спектрлік сызық үш сызықшаға бөліктенуі қажет. Бұл сызықшалардың жиіліктері

$$w_0 - \frac{e_0}{2m_0c} H, \quad w_0, \quad w_0 + \frac{e_0}{2m_0c} H$$

Ал, бұл нәтиже классикалық Больцман теориясы болжаған қарапайым триплеттерге сәйкес келеді.

Сонымен, кванттық Шредингер теориясы магнит өрісіндегі атом үшін классикалық Больцман теориясына жаңа деректер қоспайды. Жалпы, Лоренцтің қарапайым триплет сызықтары кейбір жеке жағдайларда, яғни өрістің кернеулігі үлкен болғанда байқалады, ал әлсіз өрістерде тек қана синглеттік спектрлік сызықтар ғана бақыланады. Мысалы, әлсіз магнит өрісіндегі сутегі атомының спектрлік сызықтарының саны Лоренц теориясына (демек Шредингер теориясына да) қайшы келеді. Бұл сәйкес келмеушіліктің негізгі себебі Шредингер теориясында электронның спиндік қасиеті ескерілмейді.

16 ТАРАУ. БІРДЕЙ БӨЛШЕКТЕР ЖҮЙЕСІ

§ 1. Бірдей бөлшектердің ажыратылмау қағидасы

Бірдей бөлшектер деп калыпты жағдайда массалары, зарядтары, спиндері және т.б. характеристикалары бірдей бөлшектерді айтады.

Классикалық механикада бірдей бөлшектерді олардың физикалық қасиеттеріне қарап ажыратуға болады. Мысалы, белгілі бір уақыт моментінде бірдей бөлшектер жүйесі берілген болса, онда бөлшектерді нөмірлеп алып, кейін оларды қозғалыс процесінде траекторияларына қарай айыруға болады, яғни кез келген уақыт моментінде кез келген бөлшекті айырып ала аламыз. Енді кванттық механикада бірдей бөлшектерді бірінен-бірін ажыратуға бола ма, жоқ па, соны қарастырайық. Ол үшін N бірдей бөлшектер жүйесін алып, κ, j –ші бөлшектердің координаталарын q_κ, q_j арқылы белгілейік. Бөлшектердің массасы m , сыртқы өріс энергиясы $U(q_\kappa, t)$, κ және j бөлшектердің өзара әсерлесу энергиясы $W(q_\kappa, q_j)$, болсын. Мұнда q_κ деп бөлшектің ауырлық орталығының орнын көрсететін үш кеңістіктік координата (x, y, z) мен

спиндік координатаны S_z айтамыз. Сонда мұндай бөлшектер жүйесінің гамильтонианы:

$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \sum_{k=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_k^2 + U(q_k, t) \right) + \sum_{i \neq j=1}^N W(q_k, q_j) \quad (16.1)$$

Мұнда бөлшектердің бірдейлігі бөлшектердің массалары m , сыртқы өрістегі энергиясы U және есерлесу энергиясы W бірдей болып алынуы арқылы ескерілген. Гамильтонианның бұл қасиеті кез келген сыртқы өрісте де сақталады, яғни барлық бөлшектерге сыртқы өріс бірдей есер етеді. Егер осы бөлшектер жүйесінің j, k -шы бөлшектерінің орындарын ауыстырсақ, гамильтониан өзгермейді. Себебі, мұндай орын ауыстыру (16.1)-ші теңдеудегі қосындыларға кіретін қосылғыштардың орындарын ауыстырумен бірдей. Жүйені құрайтын кез келген (j, k) жұп бөлшектер үшін гамильтонианның бұл қасиетін мынадай түрде жаза аламыз:

$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) \quad (16.2)$$

Егер жүйеде ең болмаса бір бөлшек өзгеше болса, онда осы бөлшектің орнын басқа бөлшекпен ауыстырғанда (16.2)-ші қатынас орындалмайды. Сондықтан (16.2)-ші өрнек бірдей бөлшектер жиынының гамильтонианының ең жалпы қасиетін сипаттайды.

Бірдей бөлшектер жүйесінің гамильтонианы кез келген жұп бөлшектердің орындарын ауыстыруға инвариантты.

Бөлшектердің орындарын ауыстыру жағдайы алға қарайда жиі кездесетіндіктен арнайы бөлшектердің орнын ауыстыру операторын \hat{P}_{kj} енгізейік. \hat{P}_{kj} – операторы k – шы және j – шы бөлшектердің орын ауыстырылуы қажет екендігін көрсететін белгі. Мысалы, бізге $f(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots)$ функциясы берілген болса, онда \hat{P}_{kj} операторының есері нәтижесінде жаңа f' функциясын аламыз:

$$\hat{P}_{kj} f(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots) = f'(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots) \quad (16.3)$$

\hat{P}_{kj} операторы сызықтық операторларға жатады.

Енді осы \hat{P}_{kj} операторын пайдаланып (16.2)-ні теңдікті төмендегіше жазамыз:

$$\hat{P}_{kj} \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) \hat{P}_{kj} \quad (16.4)$$

(16.4)-ші өрнек орын ауыстыру операторы \hat{P}_{kj} бірдей бөлшектер жүйесінің гамильтонианымен коммутативті екендігін көрсетеді. Гамильтонианның осы қасиетін пайдаланып, бірдей бөлшектер жиынының күйін сипаттайтын толқындық функцияларды қарастырайық. Бірдей бөлшектерден тұратын жүйенің толқындық функциясын $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ арқылы белгілейік. Бұл функция Шредингер теңдеуін қанағаттандыруы керек:

$$i\hbar \frac{d\Psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)}{dt} = \hat{H}\Psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) \quad (16.5)$$

Осы теңдеудегі k, j -шы бөлшектердің орнын ауыстыралық. Ол үшін (16.5)-ші теңдеуге орын ауыстыру операторымен \hat{P}_{kj} әсер етеміз:

$$\hat{P}_{kj} (\hat{H}\Psi) = i\hbar \frac{d(\hat{P}_{kj} \Psi)}{dt} \quad (16.6)$$

\hat{P}_{kj}, \hat{H} операторларының коммутативтілігі қасиетін пайдалансақ, (16.6) теңдеуді мынадай түрде жазуға болады:

$$\hat{H}(\hat{P}_{kj} \Psi) = i\hbar \frac{d(\hat{P}_{kj} \Psi)}{dt} \quad (16.7)$$

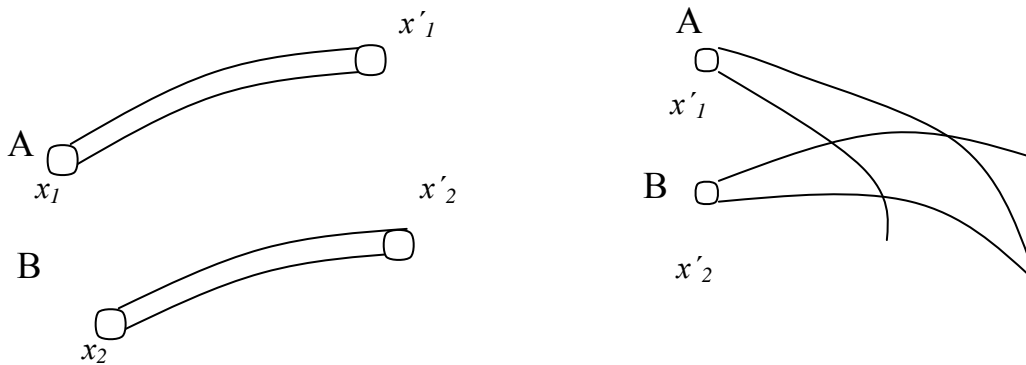
(16.7) және (16.5) теңдеулерді салыстыралық.

Сонда, егер $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ функциясы Шредингер теңдеуінің шешуі болып табылса, онда

$$\hat{P}_{kj} \Psi = \Psi'(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) \quad (16.8)$$

функциясы да Шредингер теңдеуінің шешуі болып табылатынын көреміз. Орын ауыстыруды ері жалғастыра отырып, бірінен бірінің айырмашылығы бөлшектердің кеңістікте үлестірілуіне байланысты болатын Ψ'', Ψ''', \dots т.б. толқындық функцияларды алуға болады.

Яғни, Ψ' функциясы да Ψ функциясы сияқты жүйенің мүмкін күйлерінің бірі болып табылады. Оның Ψ функциясынан айырмашылығы k -шы бөлшек бұрын j -шы бөлшек болған күйге ауысқан және керісінше бөлшек j -шы бөлшек k -шы күйге орналасқан. Осы толқындық функциялар бірдей ме, жоқ, бірінен бірі өзгеше ме соны қарастырайық. Алдымен 16.1 суретті талқылайық.



а) классикалық теория бойынша б) кванттық механика бойынша

16.1 сурет.

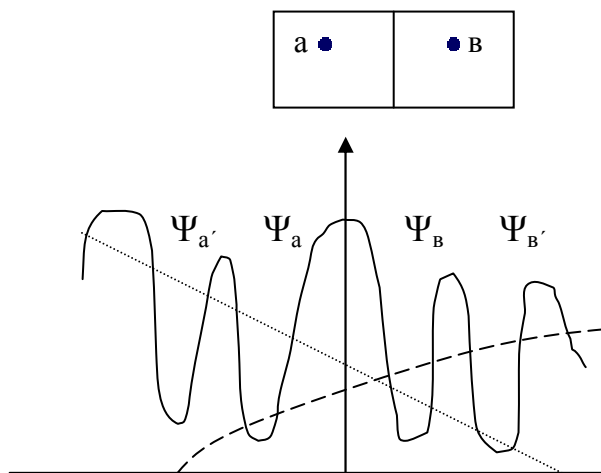
Бірінші бөлшек A -күйде, ал екінші бөлшек B -күйде деп қарастырғанда біз кейбір қиындықтарға тап боламыз. Себебі атомдық тұрғыдан қарастырғанда бірдей бөлшектерді бірінен бірін олардың күйлеріне, мысалы олардың кеңістіктегі орындарына, энергиялары мен импульстерінің мөлшеріне қарап ажырата аламыз. Классикалық механикада бөлшектердің траекториясын бақылауға болатындықтан, олардың $t=0$ уақыт моментіндегі орнына байланысты, кейінгі уақыт моменттерінде бірінші немесе екінші бөлшектердің кеңістіктегі орындарын көрсете аламыз. Бірақ кванттық механикада бірдей бөлшектерді бұлай ажырату мүмкін емес. Бөлшектердің орнын $t=0$ уақыт моментінде белгілеп алғанмен де, әртүрлі бөлшектерді сипаттайтын толқындық пакеттер сейіліп, бірімен бірі тез беттеседі де, $t>0$ уақыт моменттерінде бірдей бөлшектерді ажырату мүмкін болмайды. Осы айтылғандарды 16.1 суретпен көрсетуге болады.

16.1 а) суретте $t=0$ моментте бөлшектердің орны x_1 және x_2 көрсетілген. Бөлшектердің қозғалысы, классикалық механика бойынша, траекториямен сипатталған.

16.2 б) суретте $t=0$ уақыт моментінде x_1 және x_2 нүктелердің төңірегіндегі толқындық пакеттер алынған және олардың қозғалысы көрсетілген.

Суретте штрихталған облыс $|\Psi|^2$ менінің үлкен шамаларына сәйкес келеді. Бос, штрихталмаған облыстарда $|\Psi|^2$ -тың мені аз. Толқындық пакеттер беттескен облыстарда бөлшектерді ажырату мүмкін емес.

Тағы бір мысал қарастырайық. Бөлшек кедергімен бөлінген жәшікте болсын (16.2 сурет). Кедергіні потенциалық тосқауыл ретінде қарастыруға болады.



16.2 сурет

Егер бөлшектің энергиясы потенциалық тосқауылдың биіктігінен кіші болса, классикалық механика бойынша жәшіктің ортасындағы кедергіден өтіп, келесі облысқа шығуы мүмкін емес. Сондықтан бөлшектердің кедергінің оң не сол жағында екендігін оңай білеміз.

Ал, кванттық механикада бөлшектің потенциалық тосқауылдан өту ықтималдығы нольден өзгеше болады. Егер бастапқы уақыт моментінде бөлшектердің толқындық функцияларын Ψ_a және Ψ_b деп белгілесек, белгілі бір уақыт өткеннен кейін толқындық функциялар Ψ_a' және Ψ_b' болып, a бөлшегі жәшіктің оң бөлігіне өтіп, ал b бөлшегі кедергінің сол жағында болуы мүмкін (үзік сызықтар), уақыт $t \rightarrow \infty$ ұмтылғанда Ψ_a' және Ψ_b' толқындық функциялары бірдей болып, жәшіктің екі бөлігіндегі максимумдар симметриялы болады. a – бөлшектің жәшіктің бір бөлігінде болуының ықтималдылығы b – бөлшегінің ықтималдылығымен бірдей болады да, алғашқы уақыт моментіндегі бөлшектердің кеңістікте орналасуының симметриялы еместігінен ешқандай белгі қалмайды.

Сонымен, кванттық механикада бірдей бөлшектерді олардың күйлеріне қарап ажырату мүмкін еместігін көреміз. Бұл табиғатта бірдей бөлшектерді бірінен бірін ажырату мәселесінің болмауы керек екендігін, яғни бірдей бөлшектердің жиынының жалпы күйі туралы ғана айтылып, жеке бөлшектердің күйі жайында мәселе қозғап қажеті жоқтығын дәлелдейді. Бұл айтылғандар кванттық механикада бірдей бөлшектердің ажыратылмау қағидасы түрінде тұжырымдалады. Бірдей бөлшектер жиынында бірдей бөлшектердің орындарын ауыстырғанда өзгермейтін күйлер ғана орын алады.

§ 2. Симметриялы және антисимметриялы күйлер

N бірдей бөлшектер жүйесін сипаттайтын толқындық функция $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t)$ болсын. Егер осы жүйенің кез келген k және j – ші бөлшектерінің орындарын ауыстырсақ жүйенің мүмкін күйлерінің бірі

$\Psi'(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots)$ толқындық функциясын аламыз. Бірдей бөлшектердің ажыратылмау қағидасы бойынша бұл жаңа күйді жүйенің бұрынғы күйлерінен айыру мүмкін емес, яғни Ψ және Ψ' функциялары жүйенің бір күйін сипаттайды.

Бір физикалық күйді сипаттайтын әр түрлі толқындық функциялардың бірімен бірі өзгешелігі ажыратылмау қағидасы бойынша тұрақты шамаға тең болуы керек:

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \lambda \Psi(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) \hat{P}_{kj} \quad (16.9)$$

мұнда λ – тұрақты көбейткіш. Бұл теңдікті орын ауыстыру операторын пайдаланып былай жазуға болады:

$$\hat{P}_{kj} \Psi(q_1, q_2, \dots, q_k, \dots, q_j, \dots, q_N, t) = \lambda \Psi(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N, t) \hat{P}_{kj} \quad (16.10)$$

(16.10)-шы өрнектен λ – параметрінің \hat{P}_{kj} операторының меншікті мені екендігін көреміз. Демек, (16.10)-шы теңдеу \hat{P}_{kj} – орын ауыстыру операторының меншікті мендері мен меншікті функцияларын анықтауға мүмкіндік беретін теңдеу. λ – ның менін анықтау үшін (16.10) теңдеуіне \hat{P}_{kj} – операторымен тағы да есер етеміз:

$$\hat{P}_{kj} (\hat{P}_{kj} \cdot \Psi) = \lambda (\hat{P}_{kj} \cdot \Psi) = \lambda^2 \Psi \quad (16.11)$$

бұдан \hat{P}_{kj} – операторының меншікті мендері:

$$\lambda = \pm 1 \quad (16.12)$$

Сонымен, \hat{P}_{kj} – операторының меншікті функциясы болып k және j – ші бөлшектердің орындарын ауыстырғанда таңбасы өзгермейтін, не өзгертін кез келген екі толқындық функциялар болып табылады. Егер бөлшектердің орындарын ауыстырғанда толқындық функцияның таңбасы өзгермесе, онда толқындық функция симметриялы деп аталады.

$$\hat{P}_{kj} \Psi_S = +\Psi_S \quad (16.13)$$

Егер, керісінше, \hat{P}_{kj} орын ауыстыру операторының әсері нәтижесінде толқындық функциясы таңбасын қарама қарсыға өзгертсе, толқындық функция антисимметриялы деп аталады:

$$\hat{P}_{kj} \Psi_S = -\Psi_S \quad (16.14)$$

Симметриялы және антисимметриялы күйлердің біріне бірінің ауыспайтындығын делелдейік. Ол үшін Шредингер теңдеуін

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi \quad (16.15)$$

алып, оны былай түрлендіріп жазайық:

$$d_t \Psi \frac{1}{i\hbar} = \hat{H}\Psi dt \quad (16.16)$$

мұнда $d_t \Psi$ толқындық функцияның d_t уақыт аралығындағы өсімшесі, $t=0$ уақыт моментінде Ψ – координаталардың симметриялы толқындық функциясы болсын. Гамильтон операторы \hat{H} симметриялы оператор болғандықтан, $\hat{H}\Psi$ – функциясы да координаталардың симметриялы функциясы болады, яғни өсімше $d_t \Psi$ бөлшек координаталарының симметриялы функциясы. Орын ауыстыру операторын пайдаланып бұл аталғандарды былай жаза аламыз:

$$\hat{P}_{kj} (\hat{H}\Psi_S) = \hat{H} (\hat{P}_{kj} \Psi_S) = \hat{H}\Psi_S \quad (16.17)$$

Бұдан (16.16)-шы теңдеудің негізінде, барлық k, j жұп бөлшектер үшін

$$\hat{P}_{kj} (d_t \Psi_S) = d_t \Psi_S \quad (16.18)$$

Сонымен, біздің дәлелдеуіміз бойынша функция Ψ кез келген уақыт моментінде ($t=0$) симметриялы болса, онда Ψ функциясының симметриялылығы кейінгі және болашақ уақыт моменттерінде де сақталады. Тап осындай түрде антисимметриялы Ψ_a толқындық функциясының таңбасының да сақталатындығын дәлелдеуге болады. Бұл жағдайда

$$\hat{P}_{kj} \Psi_a = -\Psi_a \quad (16.19)$$

одан

$$\hat{P}_{kj} (d_t \Psi_a) = -d_t \Psi_a \quad (16.20)$$

сонда (16.16)-шы теңдеудің негізінде:

$$\hat{P}_{kj} (d_t \Psi_a) = -d_t \Psi_a \quad (16.21)$$

яғни антисимметриялық функцияның өсімшесі де антисимметриялы болады. Сондықтан жүйе антисимметриялы толқындық функциямен сипатталса, онда бұл жүйенің толқындық Ψ_a функциясы ер уақытта да антисимметриялы болады.

Бұл дәлелдеулер кванттық күйлердің екі класқа бөлінуінің (симметриялы және антисимметриялы) абсолютті болатындығын көрсетеді: егер жүйе белгілі бір уақыт моментінде кез келген күйде байқалған болса, онда бұл күй сақталады, басқа күйге ауыспайды.

§ 3. Бозе және Ферми бөлшектері. Паули қағидасы

Тәжірибелер мен бақылаулар табиғатта симметриялы толқындық функциямен де және антисимметриялы толқындық функциямен де сипатталатын бөлшектер болатындығын көрсетеді. Егер бөлшектер симметриялы толқындық функциямен сипатталса, олардың спиндері нольден басталатын бүтін сандарға пропорционал:

$$S_z = m_s \hbar, \quad m_s = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Мұндай бөлшектер Бозе бөлшектері (бозондар) деп аталады. Олардың жиыны Бозе-Эйнштейн статистикасына бағынады. Керісінше, берілген бөлшектердің күйі антисимметриялы толқындық функциямен сипатталса, олардың спиндері жартылай бүтін сандарға пропорционал болады:

$$m_s = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{5}{2}, \dots$$

Мұндай бөлшектер Ферми бөлшектері (фермиондар) деп аталады. Олардың жиыны Ферми-Дирак статистикасына бағынады. Табиғатта кездесетін қарапайым бөлшектердің спиндері 0, 1/2 және 1-ге тең. Бұның ішінде: электронның, протонның, нейтронның, μ -мезонның және олардың антибөлшектерінің спиндері $\pm 1/2$ -ге тең. Сондықтан бұл бөлшектер фермиондарға жатады. κ -, π мезондарының спиндері 0-ге тең. Олар бозондар болып табылады. Спині 1-ге тең бөлшек – фотон. Табиғатта кездесетін қарапайым бөлшектер не фермиондарға, не бозондарға жатады.

Егер жүйе фермиондардан тұратын болса, онда Шредингер теңдеуінің шешуі антисимметриялы толқындық функциялар болады. Ал бозондар жүйесі – симметриялы функциялармен сипатталады. Екі бөлшектен тұратын жүйені қарастырайық. Осы жүйені сипаттайтын $\Psi(1,2)$ -толқындық функция Шредингер теңдеуінің шешуі болсын.

Онда бірдей бөлшектердің ажыратылмау қағидасынан $\Psi(2,1)$ – функциясы да (16.5)-ші теңдеудің шешуі болады. Осы екі шешуден антисимметриялы және симметриялы функциялар алу үшін мынадай комбинациялар

$$\begin{aligned}\Psi_a &= A[\Psi(q_1, q_2) - \Psi(q_2, q_1)] \\ \Psi_s &= B[\Psi(q_1, q_2) + \Psi(q_2, q_1)]\end{aligned}$$

құрастыру қажет.

Мұндай толқындық функцияларды антисимметриялау және симметриялау қағидасын N бірдей бөлшектер жүйесіне да жалпылауға болады. Мұндай жүйеде орын ауыстырулардың мүмкін саны $N!$ Әрбір келесі функция алғашқы $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N)$ функциядан кез келген екі жұп бөлшектердің орындарын тізбектен ауыстыру арқылы алынады. ν тізбектен екі бөлшектің (k, j) орындарын ауыстырғанда пайда болатын толқындық функцияны $\hat{P}_\nu \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N)$ деп белгілейік. Сонда тұрақты санға дейінгі делдікпен алынған симметриялы және антисимметриялы функциялар:

$$\Psi_s = A \sum_\nu \hat{P}_\nu \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t) \quad (16.22)$$

$$\Psi_a = B \sum_\nu (-1)^\nu \hat{P}_\nu \Psi(q_1, q_2, \dots, q_N, t) \quad (16.23)$$

Кванттық механика көп бөлшектердің қозғалысын көптеген жағдайда дел есептеп шыға алмайды. Көбінесе, бұл жағдайда ұйытқулар теориясын пайдаланады. Мұнда нольдік жуықтауда бөлшектер есерлеспейді деп қабылданады да, ал олардың өзара есерлесуі теорияның жоғарғы ретті жуықтауларында ескеріледі. Нольдік жуықтаудағы жүйенің гамильтон функциясының операторы жеке бөлшектердің гамильтониандарының қосындысына тең болады:

$$\hat{H}^0 = \sum_{\ell=0}^N \hat{H}(\ell)$$

Бұл жағдайда \hat{H} операторының меншікті функциялары жеке бөлшектердің операторларының меншікті функцияларының көбейтіндісі немесе сызықтық комбинацияларының көбейтіндісі түрінде беріледі.

$\Psi_{n_\ell}(\ell)$ функциясы мынадай теңдеуді қанағаттандырсын

$$[\hat{H}(\ell) - \varepsilon_{n_\ell}] \Psi_{n_\ell}(\ell) = 0$$

мұнда $n_\ell - \ell$ – ші бөлшектің кванттық күйін сипаттайтын кванттық сандардың жиыны.

Сонда, $E = \sum_\ell \varepsilon_{n_\ell}$ меншікті мәндерін қанағаттандыратын \hat{H} – операторының меншікті функциялары

$$\Psi_{n_1}(q_1) \Psi_{n_2}(q_2), \dots, \Psi_{n_N}(q_N)$$

Функцияларының сызықш комбинациясы болады.

Паули фермиондардың мынадай қасиетін байқаған: бір кванттық деңгейде $(n, \ell, m, m_s)_s - 4$ кванттық сандары бірдей 2 фермион бола алмайды. Бұл Паули қағидасы деп аталады.

§ 4. Элементтердің периодтық таблицасы

Химиялық элементтердің Д.И. Менделеев тағайындаған периодтық заңдылығы табиғаттағы маңызды заңдылықтарға жатады. Табиғаттағы элементтердің орналасу қағидасын түсіну үшін ербір элемент оның алдындағы элементтердің ядросына бір

протон, қажетті нейтрон және электрондық қабықшаға бір электрон қосу арқылы алынады деп қарастырайық.

Нейтронды периодтық таблицаның нолінші элементі ретінде қарастыруға болады, оның заряды нольге тең, массасы протон массасына жуық. Сутегі бірінші элемент. Оның ядросы бір протоннан, электрондық қабықшада бір электрон орналасқан. Қалыпты жағдайда бұл элементтің негізгі күйі $n=1, m=0, \ell=0, m_s = \pm 1/2$ кванттық сандармен сипатталады. Осы $n=1$ күйіне тағы бір электрон орналасуына болады. Бұл электронның спині Паули қағидасы бойынша алғашқы электронның спиніне қарсы бағытталуы керек.

Сонымен, ядроға тағы бір протон, екі нейтрон қосылып, бірінші электрондық қабықшаға тағы бір электрон қоссақ, периодтық жүйенің екінші элементін – гелийді аламыз. Гелийдің екі электроны $n=1, m=0, \ell=0, m_s = \pm 1/2$ күйлерін толық камтиды. Сондықтан бірінші қабықша толықтырылған болып есептеледі және ол K – электрондық қабықша деп аталады.

Үшінші элементті алу үшін келесі үшінші электрон екінші электрондық қабықшаға орналасуы керек. Ядросында үш протон, төрт нейтрон, электрондық қабықшада үш электрон бар химиялық элемент литий (Li) деп аталады. Литийден бастап, екінші электрондық қабықша – L – қабықша толтырыла бастайды және бұл екінші периодтың бірінші элементі болып табылады. L электрондық қабықшаға $2n^2 = 2 \cdot 2^2 = 8$ электрон орныға алады.

Мұның ішінде s – күйде , p – күйде 6 электрон орналасады. Протондар мен нейтрондардың санын бірге арттыра отырып $Be \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow N \rightarrow O \rightarrow F \rightarrow H \rightarrow Ne$ – ге жеткенде L қабықшадағы электронның саны 8-ге толады.

Na элементінен үшінші период басталады. Бұл үшінші – M қабықшада небары 18 электрон орналаса алады.

17 ТАРАУ. ГЕЛИЙ АТОМЫНЫҢ ҚАРАПАЙЫМ ТЕОРИЯСЫ

§ 1. Моменттерді қосу және Рессел-Саундерс байланысы

Гелий атомы периодтық таблицаның екінші элементі. Оның электрон қабықшасында екі электрон бар, ядросы екі протоннан және екі нейтроннан тұрады.

Көп электронды атомдарды қарастырудың негізгі ерекшеліктерінің бірі-бұған кіретін электрондардың орбиталық және спиндік моменттерінің қалай қосылатындығында.

Гелий атомында ербір электронның орбиталық моменті

$$L_1^2 = \hbar^2 \ell_1 (\ell_1 + 1), L_2^2 = \hbar^2 \ell_2 (\ell_2 + 1) \quad (17.1)$$

және спиндік моменті:

$$S_1^2 = \hbar^2 s_1 (s_1 + 1), S_2^2 = \hbar^2 s_2 (s_2 + 1) \quad (17.2)$$

Атомның толық моментін анықтаудың екі мүмкіншілігі бар. Алғашқысы, алдымен электрондардың орбиталық және спиндік моменттерін жеке-жеке анықтап, толық момент осы жекеленген орбиталық және спиндік моменттердің векторлық қосындысына тең болады:

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

ТОЛЫҚ МОМЕНТ:

$$\vec{j} = \vec{L} + \vec{S} \quad (17.3)$$

(17.3) бойынша моменттерді қосу – $\vec{L}\vec{S}$ байланысы немесе Рессел-Саундерс байланысы деп аталады. Бұл байланыс негізінен жеңіл атомдарда кездеседі.

Толық моментті анықтаудың екінші мүмкіндігі – алдымен әрбір электронның толық моменті анықталады да, атомның моменті осы екі электронның толық моменттерінің векторлық қосындысына тең болады:

$$\vec{j}_1 = \vec{L}_1 + \vec{S}_1, \quad \vec{j}_2 = \vec{L}_2 + \vec{S}_2$$

$$\vec{j} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2 \quad (17.4)$$

Мұндай байланыс ($\vec{j} \vec{j}$) байланысы деп аталады. Мұндай байланыста сақталу заңдары тек толық момент үшін орындалады, яғни күшті спин – орбиталық байланыс жағдайында ғана кездеседі. Негізінен бұл байланыс ауыр атомдарда орындалады.

Спиндік және орбиталық моменттерінің арасындағы байланысы Рессел-Саундерс байланысына жататын екі электроннан тұратын гелий атомының толқындық функциясын қарастырайық.

Электрондар Паули қағидасына бағынатындықтан толық толқындық функция төрт кванттық санды орын ауыстыруға антисимметриялы болуы қажет:

$$\Psi^a = C(\vec{S}_1, \vec{S}_2) \Psi_{n_1 n_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -C(\vec{S}_2, \vec{S}_1) \Psi_{n_2 n_1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -C(\vec{S}_2, \vec{S}_1) \Psi_{n_1 n_2}(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

Рессел-Саундерс байланысында электронның орбиталық және спиндік моменттерінің арасындағы байланыс елсіз болғандықтан, толық толқындық функция спиндік және координаттық бөліктердің қибыртіндісі түрінде жазылады. Сонда Шредингер теңдеуінің мынадай екі түрлі шешуі болады:

$$\Psi^a = C^c(\vec{S}_1, \vec{S}_2) \cdot \Psi^a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (17.5)$$

және

$$\Psi^{a'} = C^a(\vec{S}_1, \vec{S}_2) \cdot \Psi^c(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (17.6)$$

Толқындық функцияның координатқа байланысты бөлігін қарастыралық, $n_1 \neq n_2$ болса:

$$\Psi_{n_1 n_2}^a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u + v) \quad (17.7)$$

$$\Psi_{n_1 n_2}^c(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(u - v) \quad (17.8)$$

мұнда:

$$u = \Psi_{n_1}(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_2) \quad (17.9)$$

$$v = \Psi_{n_1}(\vec{r}_2) \Psi_{n_2}(\vec{r}_1) \quad (17.10)$$

(17.5) және (17.6) толқындық функциялардың спиндік бөліктерін қарастырайық. Әрбір электронның спиндік функциясын спиндік оператордың z осіне проекциясының меншікті функциялары түрінде қабылдайық:

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_z) \quad (17.11)$$

Ал, спиндік оператордың квадраты:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} [(\hat{\sigma}_x)^2 + (\hat{\sigma}_y)^2 + (\hat{\sigma}_z)^2] \quad (17.12)$$

мұндағы (σ) – Паули матрицалары

$$(\hat{\sigma}_x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, (\hat{\sigma}_y) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, (\hat{\sigma}_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Сонда бір электронның спиндік функциясы $C = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$ мынадай екі теңдікті қанағаттандыруы қажет:

$$\hat{S}_z C = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \hbar \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (17.13)$$

$$\hat{S}^2 C = \frac{\hbar^2}{4} [(\hat{\sigma}_x)^2 + (\hat{\sigma}_y)^2 + (\hat{\sigma}_z)^2] \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \hbar^2 \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (17.14)$$

$(\hat{\sigma}_x)^2 = (\hat{\sigma}_y)^2 = (\hat{\sigma}_z)^2 = I$ – бірлік матрица екендігін ескерсек,

(17.14)-ші теңдеуден $\lambda_2 = 3/4$ екендігін көреміз. Ал λ_1 – дiң менiн анықтайтын теңдеу төмендегідей екі біртекті алгебралық теңдеуді шешумен пара-пар:

$$C_1 \left(\frac{1}{2} - \lambda_1 \right) = 0$$

$$C_2 \left(\frac{1}{2} + \lambda_1 \right) = 0$$

бұдан электронның спинінің z осінің бойымен бағытталу мүмкіндіктеріне байланысты екі түрлі шешуі алынады:

$$1) \lambda_2 = +1/2, C_1 = 1, C_2 = 0$$

Спин z осіне параллель бағытталған. $(1/2)$ – меншікті менінен сәйкес келетін толқындық функция:

$$C \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (17.15)$$

$$2) \lambda_1 = +1/2, C_1 = 0, C_2 = 1$$

Бұл жағдайда спин z осіне қарсы параллель бағытталған. Ал толқындық функция:

$$C \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (17.16)$$

Гелий атомының екі электронының толық спиндік функциясын спиндерінің бағытталуына байланысты ертүрлі болатын спиндік функциялардың суперпозициясы ретінде қарастырайық:

$$C(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = a_1 C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} C_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + a_2 C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} C_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} + a_3 C_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} C_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + a_4 C_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} C_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad (17.17)$$

$C_1(\pm 1/2), C_2(\pm 1/2)$ 1-ші 2-ші электрондардың спиндік функциялары a_1, a_2, a_3, a_4 Клебш-Жордан коэффициенттері. Енді (17.17) спиндік функция толық спиннің z осіне про-

екциясы операторының меншікті функциясы болатындай қылып a_i коэффициенттерінің мәндерін анықталық. Нольден өзгеше болатын шешулер үшін λ_1 және λ_2 параметрлерінің мәні төмендегідей болуы қажет:

$$1) \lambda_2 = 2, \quad a_1 = 1, \quad a_2 = a_3 = a_4 = 0$$

$$\lambda_1 = 1$$

толық спин бірге тең және z осінің бойымен бағытталған. Бұл жағдайдан толық спиндік функция

$$C^c(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = C_1\left(\frac{1}{2}\right)C_2\left(\frac{1}{2}\right), \quad \vec{s}_1 \uparrow \uparrow \vec{s}_2 \quad (17.18)$$

$$2) \lambda_2 = 2, \quad a_4 = 1, \quad a_1 = a_2 = a_3 = 0$$

$$\lambda_1 = -1$$

Спиндік функция

$$C^c(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = C_1\left(-\frac{1}{2}\right)C_2\left(-\frac{1}{2}\right), \quad \vec{s}_1 \uparrow \uparrow \vec{s}_2 \quad (17.19)$$

Толық спин бірге тең және z осіне қарсы бағытталған. Екі электронның спині параллель.

$$3) \lambda_2 = 2, \quad a_2 = a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a_1 = a_4 = 0$$

$$\lambda_1 = 0$$

Бөлшектердің спиндері параллель және z осіне перпендикуляр болады. Спиндік функция симметриялы болады:

$$C^c(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ C_1\left(\frac{1}{2}\right)C_2\left(-\frac{1}{2}\right) - C_1\left(-\frac{1}{2}\right)C_2\left(\frac{1}{2}\right) \right\} \quad (17.20)$$

$$4) \lambda_2 = 0,$$

$$\lambda_1 = a_2 = a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a_1 = a_4 = 0$$

толық спин нольге тең.

Бөлшектердің спиндері антипараллель. Спиндік функция:

$$C^a(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ C_1\left(\frac{1}{2}\right)C_2\left(-\frac{1}{2}\right) - C_1\left(-\frac{1}{2}\right)C_2\left(\frac{1}{2}\right) \right\} \quad (17.21)$$

Нольге тең болмайтындай қылыш Клебш-Жордан коэффициенттерін таңдап алғандықтан, төрт шешуде бірге нормаланған. Толық толқындық функцияға кері көшейік:

$$\Psi^a = C^c(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \Psi_{n_1 n_2}^a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (17.22)$$

Мұндай үш шешу болады: (17.18), (17.19), (17.20). Бұлардың ішінде:

$$\Psi^a = C^a(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \Psi_{n_1 n_2}^c(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (17.23)$$

бір күй. Мұндағы толқындық функциялардың координаттық бөлігі егер $n_1 \neq n_2$:

$$\Psi^{a,c} = \frac{1}{\sqrt{2}}(u \pm v) \quad (17.24)$$

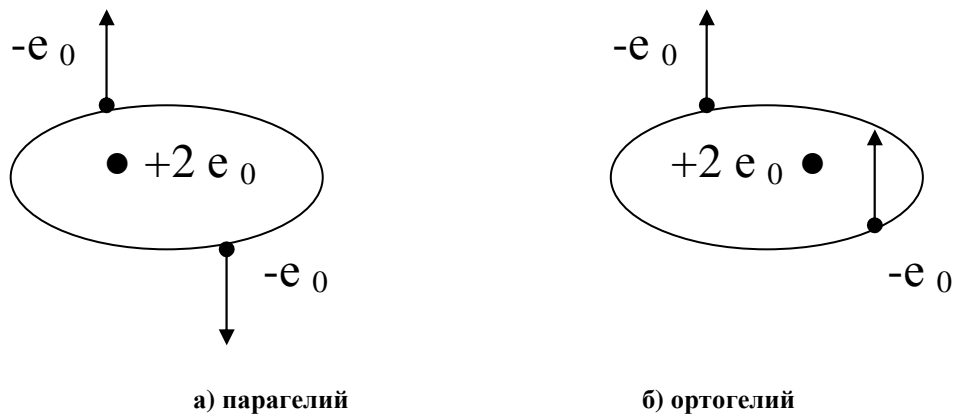
Ал, егер екі электронда бір кванттық күйде болса $n_1 \neq n_2$, онда толқындық теңдеудің координатшқ бөлігінщ симметриялы бір ғана шешуі болады:

$$\Psi^a = C^a (\vec{S}_1 \vec{S}_2) \cdot \Psi^c \quad (17.25)$$

ал $\Psi^c = U = \Psi_{n_1}(\vec{r}_1) \Psi_{n_2}(\vec{r}_2)$

§ 2. Пара және ортогелий

Гелий атомының күйін сипаттайтын толқындық функциялардың симметриялы және антисимметриялы екі түрі болатындығын делелдедік. Күйлердің бір түрі электрондардың спиндерінің қарсы бағытталған жағдайына сәйкес келеді. Гелий атомының бұл типі – паргелий деп аталады (17.1 а) сурет)



17.1 сурет

Бұл жағдайда толқындық функция координаттардың орындарын ауыстыруына симметриялы болады. Күйлердің екінші түрінде екі электронның спиндері параллель бағытталады, ал толқындық функция координаттардың орындарын ауыстыруға антисимметриялы болады. Мұндай гелий атомы ортогелий деп аталады. (17.1 б сурет). Парагелий және ортогелий күйлері тұйықталған. Сондықтан олар біріне-бірі ерікті түрде ауыспайды. Екі күйдің бірінен бірінің тұйықталғандығын былай дәлелдеуге болады. Ортогелийден паргелийге дипольдық өтудің моментінің матрицалық элементі:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}_{c,a} \rangle &= \int \Psi^{*c}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) (\hat{r}_1 + \hat{r}_2) \Psi^a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3x_1 d^3x_2 = \int \Psi^{*c}(\vec{r}_2, \vec{r}_1) (\hat{r}_1 + \hat{r}_2) \Psi^a(\vec{r}_2, \vec{r}_1) d^3x_2 d^3x_1 = \\ &= -\int \Psi^{*c}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) (\hat{r}_1 + \hat{r}_2) \Psi^a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3x_1 d^3x_2 \end{aligned} \quad (17.26)$$

нольге тең болады, себебі

$$\langle \vec{r}_{c,a} \rangle = -\langle \vec{r}_{a,c} \rangle \quad (17.27)$$

яғни бір күйден екінші күйге дипольдық өтуге тыйым салынған. Бірақ, гелий атомдарын сырттан түсетін атомдар арқылы атқылау нәтижесінде паргелийден ортогелийге ауыстыруға болады.

Мысалы: Ортогелийді спиндері төмен бағытталған электрондармен атқылайық. Сонда бұл электронның бірі қабықшадағы электрондардың бірінің орнына келіп орналасуы мүмкін. Яғни ортогелийдің орнына паргелий аламыз.

§ 3. Гелий атомының энергиялық спектрі

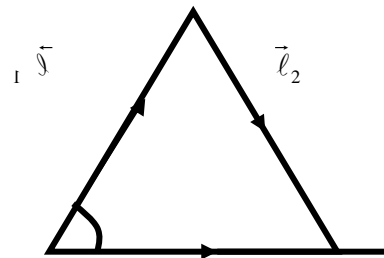
Гелий атомының толық моменті \vec{L} атомға кіретін екі электронның бүтін сандарға ие болатын орбиталық моменттерімен \vec{l}_1, \vec{l}_2 анықталады. Жеке жағдайда $\vec{l}_1 = \vec{l}_2 = 1$ деп алсақ екі электронда p -күйде, онда толық момент векторларды қосу ережелері бойынша мынадай мәндерге ие болады: $L=2, 1, 0$.

1) $L = 2$



2) $L = 1$. Қосылатын моменттердің векторлары 60° бұрыш жасай орналасқан.

$$L = l_1 + l_2 - 1 = 1$$



3) $L = 0$. Моменттер антипараллель:



Жалпы жағдайда $l_1 \geq l_2$ болғандықтан L төмендегідей бүтін сан мәндерге ие болады:

$$L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2, \dots, l_1 - l_2$$

Күрделі атомдардың энергиялық деңгейлеріне сәйкес келетін кванттық күйлерді мынадай символдармен белгілейді:

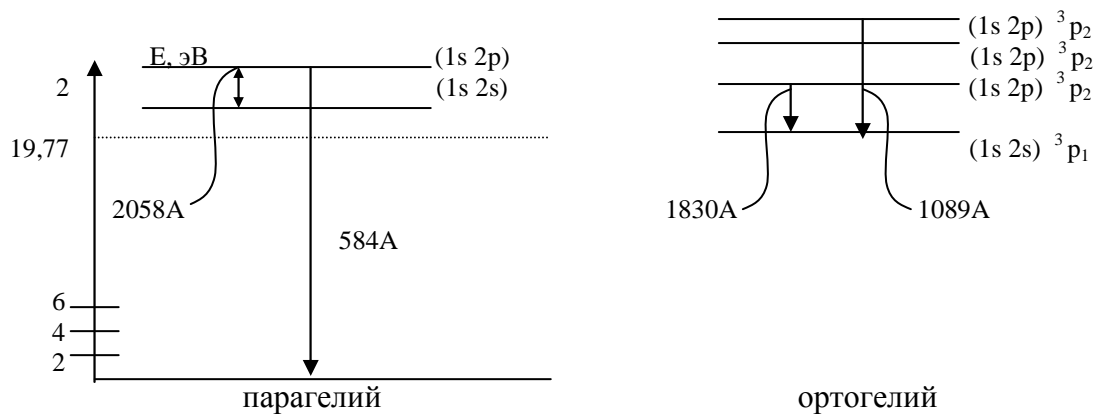
$L=0$	S – күй
$L=1$	P – күй
$L=2$	F – күй
$L=3$	D – күй

Гелий атомының энергиялық деңгейлерін қарастырайық. Ең төменгі энергиялық деңгейге толық орбиталық моменттің $L=0$ мәні сәйкес келеді. Бұл жағдайда екі электрон да $(1s\ 1s)\ ^1S_0$ электрондардың спиндері қарсы бағытталған болады. Атомның термин сипаттайтын еріптің сол жақ жоғары бұрышындағы индекс күйлердің мүмкін мәндерін (мультиплеттілігін) көрсетеді.

Келесі термде бір электрон $1s$ -күйде, ал екінші электрон $2s$ -күйде орналасады. Бұл жағдайда парагелий де $(1s\ 2s)\ ^1S_0$, ортогелий де $(1s\ 2s)\ ^3S_1$ болуы мүмкін. Ортогелийдің $(1s\ 2s)\ ^3S_1$ күйі метастабилді деп аталады, себебі бұл күйден төмен орналасқан парагелийдің энергиялық деңгейіне ауысуы сұрыптау ережелері бойынша

тиым салынған болып табылады. Парагелийдің деңгейлерінің жиыны синглеттік (спин нольге тең), ал ортогелийдің энергиялық деңгейлерінің жүйесі триплеттік (спин бірге тең) деңгейлер деп аталады.

Гелий атомының энергиялық деңгейлерінің жалпы схемасы 17.2-ші суретте берілген.



17.2 сурет. Гелий атомының энергиялық деңгейлерінің схемасы

ӘДЕБИЕТТЕР

1. Голдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. - М.: Наука, 1988. - 328 с.
2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. - М.: Высшая школа, 1963. - 620 с.
3. Вихман Э. Квантовая физика. - М.: Наука, 1977. - 416 с.
4. Грашин А.Ф. Квантовая механика. - М.: Просвещение, 1974.- 207 с.
5. Ферми Э. Квантовая механика. - М.: Мир, 1968. - 368 с.
6. Бом Д. Квантовая теория. - М.: Физматгиз, 1961. - 728 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Книга 2. Квантовая механика. - М.: Наука, 1972. - 368 с.
8. Соколов А.А., Тернов И.М. Квантовая механика и атомная физика.- М.: Просвещение, 1970. - 423 с.
9. Давыдов А.С. Квантовая механика. - М.: Наука, 1973. - 704 с.
- 10.Тарасов Л.В. Основы квантовой механики. - М.: Высшая школа, 1978. - 287 с.
11. Медведев Б.В. Начала теоретической физики. - М.: Наука, 1977. -496 с.
12. Де Бройль Л. Соотношение неопределенностей Гейзенберга и вероятностная интерпретация волновой механики. - М., 1986. - 344 с.
13. Друкарев Г.Ф. Квантовая механика. - Л.: Изд-во ЛГУ, 1988. - 200 с.
14. Липкин Г. Квантовая механика. Новый подход к некоторым проблемам. - М.: Мир, 1977. - 592 с
15. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика. - М.: Наука, 1976. - 336 с.